

CHALMERS



GÖTEBORGS UNIVERSITET

Härledning och implementering av två matematiska modeller för strålningspridning

Examensarbete för kandidatexamen i matematik vid Göteborgs Universitet

Kristina Nordlund

Viktor Skokić

Elin Solberg

Institutionen för matematiska vetenskaper
Chalmers tekniska högskola
Göteborgs universitet
Göteborg 2009

Härledning och implementering av två matematiska modeller för strålnings spridning

Examensarbete för kandidatexamen i tillämpad matematik inom matematikprogrammet vid Göteborgs universitet

Kristina Nordlund Viktor Skokić Elin Solberg

Handledare: Mohammad Asadzadeh
Examinator: Carl-Henrik Fant

Institutionen för matematiska vetenskaper
Chalmers tekniska högskola
Göteborgs universitet
Göteborg 2009

Sammanfattning

Denna rapport behandlar transportekvationer, för framåtriktad partikelstrålning, som används för dosberäkning i strålningsbehandling av cancer. Vi börjar med att härleda den linjära transportekvationen och följer sedan en asymptotisk utveckling för att ersätta integraloperatoren på högersidan av transportekvationen med en differentialoperator, kallad Fokker-Planckoperatoren, i riktningvariabeln. Denna procedur ger oss en konvektions-diffusionsekvation som kallas Fokker-Plancks ekvation.

En projektion av Fokker-Planckoperatoren på enhetsfären till tangentplanet i punkten $(0, 0, 1)$ ger oss Fermis ekvation. Fermis ekvation är en förenklad version av Fokker-Plancks ekvation framtagen för strålningspartiklar som endast avviker lite från strålningsriktningen.

Slutligen använder vi en Galerkin finita element-metod för numeriska lösningar av Fermis ekvation.

Abstract

This paper concerns preliminary studies of, forward directed, radiation particle transport equations applied in dose computation in cancer therapy. To this approach we start with derivation of the linear transport equation and follow an asymptotic expansion procedure to replace the integral operator on the right hand side of the transport equation by a Fokker-Planck, diffusion, differential operator in the directional variable. This procedure yields a convection-diffusion equation called the Fokker-Planck equation.

A geometric projection of the diffusion operator on the unit sphere, to the tangent plane to the sphere at the point $(0, 0, 1)$, yields the Fermi equation. The Fermi equation is a simplified version of the Fokker-Planck equation, derived for the forward peaked radiation particles used in cancer therapy.

Finally, we use a Galerkin finite element method for numerical solution of the Fermi equation.

Innehåll

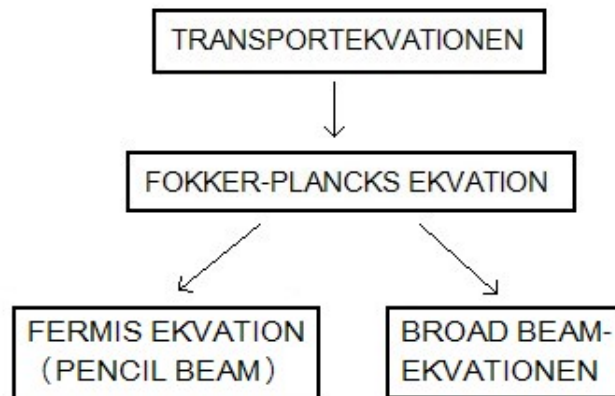
1	Inledning	1
2	Härledning av ekvationerna	3
2.1	Teori	3
2.1.1	Legendrepolytom	3
2.1.2	Klotytfunktioner	5
2.2	Härledning	8
2.2.1	Transportekvationen	8
2.2.2	Fokker-Plancks ekvation	10
2.2.3	Fermis ekvation	16
2.2.4	Broad beam-ekvationen	16
3	Implementering av modellerna	18
3.1	Introduktion till Standard Galerkin-metoden	18
3.2	Implementering	20
3.2.1	Implementering av pencil beam-modellen (Fermis ekvation)	20
3.2.2	Implementering av broad beam-modellen	25
4	Diskussion	28

1 Inledning

Inom cancerbehandling används strålning för att bekämpa elakartade tumörer. Både friska celler och cancerceller skadas i någon mån av strålningen, men friska celler återhämtar sig bättre än sjuka. Målet med en behandling är att orsaka maximal skada på tumören och samtidigt skona omgivande frisk vävnad så mycket som möjligt. För att kunna uppnå detta är det ibland nödvändigt att bestrålningen sker från flera håll på ett sätt så att strålarna möts i tumören. Behandlingen delas också upp på flera tillfällen, så att den omgivande vävnaden får tid att återhämta sig [1].

Då partiklar strålas genom en vävnad kolliderar de med partiklar i denna och kan då släppa ifrån sig energi samt byta riktning. För att det ska vara möjligt att utforma behandlingsscheman måste man kunna utföra snabba och korrekta beräkningar av hur strålningen sprider sig genom kroppen. Beräkningarna utförs utifrån matematiska modeller vilka bygger på lämpliga förenklingar av problematiken. Genom detta åstadkommer man en balans mellan beräknings-effektivitet och precision.

De matematiska modellerna utgår oftast från transportekvationen som beskriver flödet av partiklar i något medium. I detta projekt härleds först transportekvationen, sedan en förenkling som kallas Fokker-Plancks ekvation varefter ytterligare förenklingar leder till två olika ekvationer: Fermis ekvation och broad beam-ekvationen. Därefter införs lämpliga randvillkor, tillsammans med vilka ekvationerna utgör två modeller: pencil beam-modellen och broad beam-modellen. Skillnaden mellan dessa har att göra med hur man antar att strålningen som skickas in är fördelad. I pencil beam-modellen antar man att strålningskällan är punktformig och i broad beam-modellen att strålningskällan är ett plan. I Figur 1 visas hierarkin mellan de olika ekvationerna i härledningen.



Figur 1: Schematisk bild av de ekvationer vi härleder. Pilarna representerar förenklingar från mer komplicerade till enklare ekvationer.

Som en sista del i arbetet implementeras även de två modellerna. Implementeringen innebär numerisk lösning av de partiella differentialekvationer (PDE) som modellerna bygger på med hjälp av programvaran MATLAB och PDE-verktyget Puffin. De metoder som då används är Standard Galerkin- och bakåt-Euler-metoden.

Det huvudsakliga syftet med detta arbete är att sammanställa de viktigaste matematiska byggstenarna som används i samband med pencil beam- och broad beam-modellerna. För att visa hur en lösning kan se ut, implementeras även modellerna.

Då detta är ett arbete inom tillämpad *matematik*, ligger fokus på de matematiska aspekterna av problemet ifråga. Beskrivning av fysikaliska konstanter och liknande bortses ifrån och området antas endast bestrålas från ett håll.

I implementeringen används inte exakt de härledda ekvationerna, utan de förenklas ytterligare för att kunna lösas i färre dimensioner.

Under projektets gång har förstås hela gruppen varit engagerad i såväl instudering, härledning, implementering som rapportskrivande. Gränserna är alltså något flytande, men de individuella bidragen är i huvudsak enligt följande:

Kristina Nordlund Huvudförfattare till avsnitten 2.2 och 3.2.2, medförfattare till avsnittet 3.2.1. Ansvarig för administration av rapport-dokumentet och för figurerna, och medansvarig för den teoretiska framställningen.

Viktor Skokić Huvudförfattare till kapitel 2 utom 2.2.1 och till 3.2.1, medförfattare till avsnittet 3.2.2. Ansvarig för den teoretiska framställningen.

Elin Solberg Huvudförfattare till avsnitten 3.1 och 3.2.1, medförfattare till avsnitten 2.1.1 och 2.1.2. Ansvarig för implementering.

För utförligare information om enskildas prestationer under arbetet har vi har fört en loggbok.

2 Härledning av ekvationerna

2.1 Teori

Innan vi börjar med den egentliga härledningen av ekvationerna vill vi närmare förklara vissa viktiga begrepp som vi kommer att använda oss av.

Bland annat vill vi kunna uttrycka funktioner i något ortogonalt, fullständigt system. En mängd av funktioner $\{\phi_n\}_{n=0}^{\infty}$ är ett fullständigt ortogonalt system i ett funktionsrum F med skalärprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle_F$ om alla funktioner $f \in F$ kan skrivas som en serieutveckling i funktionerna ϕ_n dvs. $f = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \phi_n$, där a_n fås som den normerade skalärprodukten av f och ϕ_n , dvs.

$$a_n = \frac{\langle f, \phi_n \rangle_F}{\|\phi_n\|^2}. \quad (1)$$

Ett exempel på hur funktioner kan skrivas på detta vis är Fourierserier. Vi kommer att använda oss av två olika ortogonala system; Legendrepolyinom och klotytfunktioner. I de kommande två avsnitten definierar vi dessa och härleder några av deras viktigaste egenskaper.

2.1.1 Legendrepolyinom

Legendrepolynomen, $\{P_n(x)\}$, utgör ett ortogonalt system till funktionsrummet

$$L^2(-1, 1) = \{f : (-1, 1) \rightarrow \mathbb{R}; \int_{-1}^1 |f(x)|^2 dx < \infty\},$$

där skalärprodukten definieras genom

$$\langle f, g \rangle_{L^2(-1,1)} := \int_{-1}^1 fg dx.^1$$

Varje funktion i $L^2(-1, 1)$ kan alltså skrivas som en utveckling i Legendrepolynomen. För varje n bildar de $n + 1$ första Legendrepolynomen, $\{P_i(x)\}_{i=0}^n$, dessutom en ortogonal bas till vektorrummet

$$P^n(-1, 1) = \{p(x); p(x) \text{ polynom i } (-1, 1), \text{ grad}(p(x)) \leq n\}^2.$$

Legendrepolynomen definieras genom

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n.$$

Fem viktiga egenskaper hos Legendrepolynomen, som vi kommer att använda i härledningen av Fokker-Plancks ekvation, är

$$P_n(1) = 1 \quad (2)$$

$$\frac{d}{dx} P_n(1) = n(n+1) \quad (3)$$

$$P_n(x) = \frac{(2n)!}{2^n (n!)^2} x^n + \dots \quad (4)$$

$$P_k(\xi) = \sum_{l=-k}^k a_{kl} Y_{kl}(\boldsymbol{\Omega}) Y_{kl}^*(\boldsymbol{\Omega}'), \quad (5)$$

där \dots i (4) står för termer av grad mindre än n , och

$$\langle P_n, P_m \rangle_{L^2(-1,1)} := \int_{-1}^1 P_n(x) P_m(x) dx = \frac{2}{2n+1} \delta_{nm}, \quad (6)$$

¹De kan formuleras mer generellt för ett funktionsrum $L^2(a, b)$, $a, b \in \mathbb{R}$.

²Här, och i fortsättningen, menar vi med $\text{grad}(p)$ graden av polynomet p .

$$\text{där } \delta_{nm} = \begin{cases} 1 & \text{om } n = m \\ 0 & \text{om } n \neq m \end{cases}.$$

Vidare uppfyller $P_n(x)$ Legendres ekvation

$$\frac{d}{dx} \left((1-x^2) \frac{d}{dx} f \right) + \lambda f = 0, \quad (7)$$

för $\lambda = n(n+1)$.

Egenskaperna (2)-(6) står att finna i till exempel [2], och vi använder dem här utan härledning. Egenskapen (7) är avgörande för den kommande framställningen, och vi ägnar resterande del av detta avsnitt åt att visa att Legendrepolynomerna har denna egenskap.

Betrakta till att börja med funktionen

$$g(x) := \frac{d}{dx} \left((1-x^2) \frac{d}{dx} P_n(x) \right) = \frac{d^2}{dx^2} P_n(x) - \frac{d}{dx} \left(x^2 \frac{d}{dx} P_n(x) \right).$$

Enligt (4) är $\text{grad}(P_n(x)) = n$ vilket innebär att

$$\text{grad} \left(\frac{d^2}{dx^2} P_n(x) \right) = n - 2$$

och

$$\text{grad} \left(\frac{d}{dx} \left(x^2 \frac{d}{dx} P_n(x) \right) \right) = n. \quad (8)$$

Alltså är $g(x)$ ett polynom av grad n . De två ledande termerna i detta polynom kommer från polynomet

$$\frac{d}{dx} \left(x^2 \frac{d}{dx} P_n(x) \right).$$

Enligt (4) gäller nu att

$$\frac{d}{dx} \left(x^2 \frac{d}{dx} P_n(x) \right) = \frac{d}{dx} \left(\frac{(2n)!}{2^n(n!)^2} x^2 (nx^{n-1} + \dots) \right) = \frac{(2n)!}{2^n(n!)^2} (n(n+1)x^n + \dots).$$

Utifrån detta konstaterar vi att

$$g(x) + n(n+1)P_n(x)$$

är ett polynom av grad högst $n-1$. Enligt ovan är dock $\{P_i(x)\}_{i=0}^n$ en bas till $P^n(-1, 1)$ och alltså finns c_i , $i = 0, \dots, n-1$ sådana att $g(x) + n(n+1)P_n(x) = \sum_{i=0}^{n-1} c_i P_i(x)$.

För att visa att Legendrepolynomerna löser (7) räcker det alltså att visa att $c_i = 0$ för $i = 0, \dots, n-1$. Koefficienterna c_i beräknas som vanligt när man har en ortogonal bas i ett vektorrum genom

$$\begin{aligned} c_i &= \frac{\langle g(x) + n(n+1)P_n(x), P_i(x) \rangle}{\|P_i(x)\|^2} \\ &= \frac{\langle g(x), P_i(x) \rangle + n(n+1) \langle P_n(x), P_i(x) \rangle}{\|P_i(x)\|^2}. \end{aligned} \quad (9)$$

Eftersom $i \leq n-1$ så är $\langle P_n(x), P_i(x) \rangle = 0$, tack vare Legendrepolynomernas ortogonalitet (6). Det ger att täljarens andra term är noll för alla i . För att visa att även täljarens första term är noll börjar vi med att partialintegrera två gånger och båda gångerna notera att

$1 - x^2 = 0$ för $x = -1, 1$, vilket ger

$$\begin{aligned}
\langle g(x), P_i(x) \rangle &= \int_{-1}^1 \frac{d}{dx} \left((1-x^2) \frac{d}{dx} P_n(x) \right) P_i(x) dx \\
&= \left[(1-x^2) \left(\frac{d}{dx} P_n(x) \right) P_i(x) \right]_{-1}^1 - \int_{-1}^1 (1-x^2) \left(\frac{d}{dx} P_n(x) \right) \left(\frac{d}{dx} P_i(x) \right) dx \\
&= - \left[P_n(x) (1-x^2) \left(\frac{d}{dx} P_i(x) \right) \right]_{-1}^1 + \int_{-1}^1 P_n(x) \frac{d}{dx} \left((1-x^2) \frac{d}{dx} P_i(x) \right) dx \\
&= \langle P_n(x), \frac{d}{dx} \left((1-x^2) \frac{d}{dx} P_i(x) \right) \rangle.
\end{aligned}$$

Precis som ovan, i (8), har vi att den högra termen i denna skalärprodukt är ett polynom av grad i och alltså kan skrivas som en linjärkombination av $P_m(x)_{m=0}^i$. Vi har då, tack vare linjäriteten hos skalärprodukt, ortogonaliteten hos Legendrepolynom samt det faktum att $i \leq n-1$, att

$$\begin{aligned}
\langle P_n(x), \frac{d}{dx} \left((1-x^2) \frac{d}{dx} P_i(x) \right) \rangle &= \langle P_n(x), \sum_{m=0}^i a_m P_m(x) \rangle \\
&= \sum_{m=0}^i a_m \langle P_n(x), P_m(x) \rangle = 0.
\end{aligned}$$

Vi har nu visat att båda termerna i täljaren i (9) är noll för alla i . Med andra ord är samtliga $c_i = 0$ och vi har därmed visat att $P_n(x)$ löser (7) för $\lambda = n(n+1)$.

2.1.2 Klotytfunktioner

Klotytfunktioner (eng. *spherical harmonics*) är nära besläktade med Legendrepolynom men ger en ortogonal bas till funktionsrummet $L^2(S^2)$ ³ istället för till $L^2(-1, 1)$. Klotytfunktionerna dyker upp naturligt då Laplaces egenvärdesekvation⁴

$$\Delta u = -\lambda u, \tag{10}$$

med egenvärden $\lambda = n(n+1)$, studeras på enhetssfären.

Klotytfunktionerna, Y_{nm} , definieras i termer av Legendrepolynomen, P_n , som

$$Y_{nm}(\mathbf{\Omega}) := P_n^m(\xi) e^{im\phi}, \text{ där } \mathbf{\Omega} \in S^2, n \in \mathbb{N} \text{ och } m \in \mathbb{Z}$$

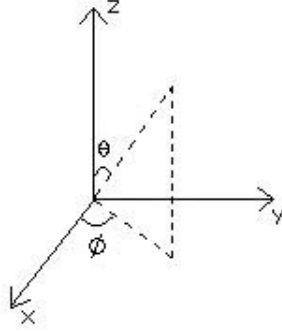
$$P_n^m(\xi) = (1-\xi^2)^{m/2} \frac{d^m P_n(\xi)}{d\xi^m}, m \geq 0$$

$$P_n^{-m}(\xi) = P_n^m(\xi).$$

Här är $\xi = \cos(\theta)$, θ är polvinkeln och ϕ är azimuthvinkeln. Vi illustrerar detta i Figur 2.

³ $L^2(S^2)$ är ett funktionsrum, definierat på samma sätt som $L^2(-1, 1)$ men med S^2 , d.v.s. enhetssfären i \mathbb{R}^3 , som definitionsmängd istället för $(-1, 1)$.

⁴Laplaceoperatoren är $\Delta = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$



Figur 2: Illustration av sfäriska vinklar. θ är vinkeln mot z -axeln, och kallas polvinkeln, medan ϕ är vinkeln mellan projektionen på xy -planet och x -axeln, och kallas azimuthvinkeln

Eftersom vi vill betrakta Laplaces egenvärdesekvation på en sfär skriver vi om Laplaceoperatorn i sfäriska koordinater, och får, på en sfär med radie r , operatorn

$$\frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin(\theta) \frac{\partial u}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2(\theta)} \frac{\partial^2 u}{\partial \phi^2} \right). \quad (11)$$

Under variabelbytet $\xi = \cos(\theta)$ gäller för en godtycklig deriverbar funktion $f(\xi)$ att

$$\frac{1}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} f(\xi) = -\frac{\partial}{\partial \xi} f(\xi). \quad (12)$$

Genom att använda (12) två gånger får vi nu

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} u(\xi) \right) &= -\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\sin(\theta) (-\sin(\theta)) \frac{\partial}{\partial \xi} u(\xi) \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial \xi} \left((1 - \cos^2(\theta)) \frac{\partial}{\partial \xi} u(\xi) \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial \xi} \left((1 - \xi^2) \frac{\partial}{\partial \xi} u(\xi) \right). \end{aligned} \quad (13)$$

Laplaceoperatorn (11) är alltså under detta variabelbyte ekvivalent med operatorn $\frac{1}{r^2} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} (1 - \xi^2) \frac{\partial}{\partial \xi} + \left(\frac{1}{1 - \xi^2} \right) \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]$. Då $r = 1$ kallas denna för Fokker-Planckoperatorn och betecknas L_{FP} .

Laplaces egenvärdesekvation (10) blir på enhetssfären

$$\begin{aligned} L_{FP}u &= -\lambda u \\ &\Leftrightarrow \\ \left[\frac{\partial}{\partial \xi} (1 - \xi^2) \frac{\partial}{\partial \xi} + \left(\frac{1}{1 - \xi^2} \right) \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \lambda \right] u &= 0 \end{aligned} \quad (14)$$

Vi ska visa att klotytfunktionerna, $Y_{nm}(\Omega)$, uppfyller differentialekvationen (14) för $\lambda = n(n + 1)$. För detta utnyttjar vi klotytfunktionernas ortogonalitet

$$\langle Y_{nm}, Y_{kl} \rangle_{L^2(S^2)} := \int_{S^2} Y_{nm}(\Omega) Y_{kl}^*(\Omega) d\Omega = \left(\frac{4\pi}{2n + 1} \right) \left(\frac{1}{a_{nm}} \right) \delta_{nk} \delta_{ml}, \quad (15)$$

där * betyder komplexkonjugat och $a_{nm} = \frac{(n-|m|)!}{(n+|m|)!}$ [3].

För att visa att klotytfunktionerna uppfyller (14) använder vi oss av variabelseparation; vi söker en lösning till (14) på formen $u(\xi, \phi) = F(\xi)G(\phi)$. Om vi sätter in denna ansats i (14) och gör några omskrivningar erhålles, då $F(\xi) \neq 0$, $G(\phi) \neq 0$, ekvationen

$$\frac{1 - \xi^2}{F(\xi)} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} (1 - \xi^2) \frac{\partial}{\partial \xi} F(\xi) + \lambda F(\xi) \right) = -\frac{\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} G(\phi)}{G(\phi)}. \quad (16)$$

Då vi följer det vanliga tillvägagångssättet vid användning av variabelseparation, se till exempel [2], innebär detta att det finns en konstant, μ , sådan att

$$\frac{1 - \xi^2}{F(\xi)} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} (1 - \xi^2) \frac{\partial}{\partial \xi} F(\xi) + \lambda F(\xi) \right) = \mu \quad (17)$$

och

$$-\frac{\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} G(\phi)}{G(\phi)} = \mu. \quad (18)$$

Vi kan nu lösa de ordinära differentialekvationerna (17) och (18) var för sig och produkten av deras lösningar blir då en lösning till (14).

Lösningar till (18) ges av $G(\phi) = \alpha e^{ik\phi} + \beta e^{-ik\phi}$ där $k^2 = \mu$ [2]. Eftersom bakgrunden till (14), och därmed till (18), är ett egenvärdesproblem på sfären, intresserar vi oss här enbart för lösningar med period 2π , varför $k \in \mathbb{Z}$. Speciellt ser vi att $\{e^{ik\phi}\}_{k=-\infty}^{\infty}$ är lösningar till (18).

För att finna lösningar till (17) återvänder vi till Legendres ekvation (7), nu uttryckt i ξ istället för i x . Låt k vara ett positivt heltal och låt $w(\xi)$ vara en lösning till (7). Produktregeln för derivator säger att

$$(fg)^{(k+1)} = \sum_{j=0}^{j=k+1} \frac{(k+1)!}{j!(k+1-j)!} f^{(j)} g^{(k+1-j)},$$

och låter vi i detta uttryck $f(\xi) = 1 - \xi^2$ och $g(\xi) = \frac{d}{d\xi} w(\xi)$ får vi

$$\left((1 - \xi^2) \frac{d}{d\xi} w \right)^{(k+1)} = (1 - \xi^2) w^{(k+2)} - 2(k+1)\xi w^{(k+1)} - k(k+1)w^{(k)}.$$

Vi tar hjälp av denna identitet för att derivera (7) k gånger, och får differentialekvationen

$$(1 - \xi^2)w^{(k+2)} - 2(k+1)\xi w^{(k+1)} - k(k+1)w^{(k)} + \lambda w^{(k)} = 0, \quad (19)$$

som förstas är uppfylld för varje funktion w som uppfyller (7) och är $k+2$ gånger deriverbar.

Vi inför nu funktionen

$$S(\xi) := (1 - \xi^2)^{k/2} w^{(k)}$$

som en lösningskandidat till (17). Med denna definition av S får vi genom elementära, men aningen långa, beräkningar likheten

$$\begin{aligned} & \frac{d}{d\xi} \left((1 - \xi^2) \frac{d}{d\xi} S(\xi) \right) \\ &= (1 - \xi^2)^{k/2} \left((1 - \xi^2) w^{(k+2)} - 2(k+1)\xi w^{(k+1)} + \frac{k^2 w^{(k)}}{(1 - \xi^2)} - k(k+1)w^{(k)} \right). \end{aligned} \quad (20)$$

Innehållet i högerledets stora parentes är snarlikt vänsterledet i (19) och genom att lägga till och dra ifrån $\lambda w^{(k)}$ erhåller vi

$$\frac{d}{d\xi} \left((1 - \xi^2) \frac{d}{d\xi} S(\xi) \right) = \frac{k^2 S(\xi)}{(1 - \xi^2)} - \lambda S(\xi).$$

Vi ser att om w löser (7) så löser $S(\xi)$ (17). I förra avsnittet visade vi att Legendrepolyomet $P_n(\xi)$ löser (7) för $\lambda = n(n+1)$, så vi kan, för varje $n = 0, 1, 2, \dots$, välja $w = P_n$. Vi får då

$$S(\xi) = (1 - \xi^2)^{(k/2)} \frac{d^k}{d\xi^k} P_n(\xi) =: P_n^k(\xi)$$

där $P_n^k(\xi)$ löser (17) med $\lambda = n(n+1)$.

Vi har nu hittat lösningarna $P_n^k(\xi)$ respektive $\{e^{ik\phi}\}_{k=-\infty}^{\infty}$ till ekvationerna (17) och (18), och produkten $P_n^k(\xi)e^{ik\phi}$ löser därmed (14) för $k \in \mathbb{Z}$, $n = 0, 1, 2, \dots$. Men detta är precis definitionen av klotytfunktioner, och vi har därmed visat att klotytfunktionerna, som definierade ovan, löser Laplaces egenvärdesekvation på enhetssfären (14).

2.2 Härledning

Nu när vi har de verktyg vi behöver kan vi börja med att härleda alla ekvationer för att därefter implementera och lösa dem.

Vi kommer först att härleda transportekvationen, som sedan leder till Fokker-Plancks ekvation. Dessa är utgångspunkter för pencil beam- och broad beam-modellen.

I både pencil beam- och broad beam-modellen skickas strålningen in parallellt med z-axeln; den kommer dock att se lite olika ut i de två fallen. Strålningen består av partiklar som då och då under sin bana är involverade i kollisioner. Vid en kollision ändras en partikels energi och riktning. Om all energi avges säger vi att partikeln absorberats, och vi intresserar oss ej för den därefter. Vi approximerar det bestrålade området med en låda i \mathbb{R}^3 sådan att $(x, y, z) \in [-x_0, x_0] \times [-y_0, y_0] \times [0, L]$. Nedan följer de variabler och funktioner vi kommer att använda.

$\mathbf{x} = (x, y, z) \in \mathbb{R}$ är partikelns position

$E' \in \mathbb{R}$ är partikelns energi innan kollision

$E \in \mathbb{R}$ är partikelns energi efter kollision

$\Omega' \in S^2$ är partikelns riktning innan kollision - alla riktningar antas ha längd 1

$\Omega = (\mu, \eta, \gamma) \in S^2$ är partikelns riktning efter kollision

$\mathbf{v} = v\Omega$ är partikelns hastighet, där v är partikelns fart: $v = |\mathbf{v}|$

$N(\mathbf{x}, \Omega, E, t)$ är densiteten av partiklar vid tiden t med avseende på såväl vinkel och energi som position

$\sigma_{s\Delta}(E', E, \Omega', \Omega)$ kallas spridningskärna (eng. *scattering kernel*). Den är ett mått på sannolikheten per längdenhet att en partikel, med energi E' och riktning Ω' , kolliderar och får ny energi E och ny riktning Ω .

$\sigma_s(\mathbf{x}, E')$ kallas spridningstvårsnitt (eng. *scattering cross section*). Det är sannolikheten per längdenhet för en partikel med energin E' att kollidera utan att absorberas. Spridningstvårsnittet fås genom att integrera $\sigma_{s\Delta}$ med avseende på E och riktningsförändringen.

$\sigma_a(\mathbf{x}, E')$ kallas absorptionstvårsnitt (eng. *absorption cross section*). Det är sannolikheten per längdenhet att en partikel ska kollidera och absorberas.

$\sigma_{tot}(\mathbf{x}, E') = \sigma_s(\mathbf{x}, E') + \sigma_a(\mathbf{x}, E')$ kallas totalt tvårsnitt (eng. *total cross section*). Det är den totala sannolikheten per längdenhet för partikelkollision.

2.2.1 Transportekvationen

Vi kommer här att härleda transportekvationen för strålning med neutroner. Eftersom vi bortser från kollisioner mellan laddade partiklar i strålningen, och endast tar hänsyn till kollisioner mellan bestrålningspartiklar och bakgrundspartiklar så kan vi använda oss av en linjär transportekvation som beskriver transport av neutroner.

Vi antar att en neutron är en punktformig partikel med positionsvektor $\mathbf{x} = (x, y, z)$, hastighet $\mathbf{v} = v\Omega$ och energi E , och $\Omega = (\mu, \eta, \gamma)$ är enhetsvektorn i rörelseriktningen.

Vi låter även $N(\mathbf{x}, \Omega, E, t)dVd\Omega dE$ vara antalet neutroner vid tiden t i volymen dV runt \mathbf{x} med energi dE runt E och i riktningar $d\Omega$ runt Ω . Vi vill ta reda på vad som händer denna mängd neutroner när man följer dem under ett litet tidsintervall av längden Δt .

Sannolikheten att en neutron kolliderar med något i tidsintervallet Δt är

$$\sigma_{tot}(\mathbf{x}, E)v\Delta t$$

ty farten multiplicerat med tiden, $v\Delta t$, är sträckan neutronen färdas och σ_{tot} är sannolikhet per längdenhet. Om detta händer så kan neutronen antingen byta riktning och energi eller

absorberas helt, det vill säga få energi noll. I båda fallen kommer neutronen inte längre att finnas med i mängden av neutroner vi betraktade eftersom de hade en viss riktning Ω och en viss energi E . Därför kommer sannolikheten att en neutron stannar kvar i mängden att vara

$$1 - \sigma_{tot}(\mathbf{x}, E)v\Delta t,$$

så när tiden Δt har gått kommer antalet neutroner som är kvar i mängden att vara

$$(1 - \sigma_{tot}(\mathbf{x}, E)v\Delta t) N(\mathbf{x}, \Omega, E, t) dV d\Omega dE. \quad (21)$$

Dessa neutroner kommer att anlända till positionen $\mathbf{x} + \Omega v\Delta t$ vid tiden $t + \Delta t$.

Sannolikheten för kollision om man har energin E' på position \mathbf{x} fås genom att integrera $\sigma_{s\Delta}(E', E, \Omega', \Omega)$ över alla möjliga riktningsförändringar och över alla möjliga slutenergier (ej negativa ty sannolikheten att få en negativ energi är noll). Alltså får vi

$$\sigma_s(\mathbf{x}, E') = \int_0^\infty \int_{S^2} \sigma_{s\Delta}(E', E, \Omega', \Omega) d\Omega dE. \quad (22)$$

Då vi antar att mediet strålningen färdas i är isotropiskt beror sannolikheten att få en ny riktning på vinkeln mellan den gamla och den nya riktningen - ej på det rigida koordinatsystemet. Vi betraktar därmed vinkeln θ mellan Ω' och Ω och inför variabeln $\xi = \cos(\theta) = \Omega' \cdot \Omega$. Integrerat över hela varvet, 2π , blir spridningstvårsnittet

$$\sigma_s(\mathbf{x}, E') = 2\pi \int_{-1}^1 \int_0^\infty \sigma_{s\Delta}(E', E, \xi) dE d\xi. \quad (23)$$

Detta samband kommer senare att användas då vi går från transportekvationen till Fokker-Plancks ekvation.

För att få fram hur många neutroner som tillkommer i mängden vi har som resultat av en kollision integrerar vi antalet neutroner multiplicerat med sträckan $v'\Delta t$, samt sannolikheten att få rätt energi och riktning, över alla möjliga energier och riktningar som neutronerna kan ha från början.

$$\left(\int_0^\infty \int_{S^2} \sigma_{s\Delta}(E', E, \Omega', \Omega) v' N(\mathbf{x}, \Omega', E', t) d\Omega' dE' \right) dV d\Omega dE \Delta t. \quad (24)$$

Det kan även tillkomma neutroner från andra källor men eftersom vi antar att det inte händer har vi inte med någon term för det i ekvationen.

Så nu har vi att densiteten av neutroner på positionen $\mathbf{x} + \Omega v\Delta t$ vid tiden $t + \Delta t$ är

$$\begin{aligned} N(\mathbf{x} + \Omega v\Delta t, \Omega, E, t + \Delta t) &= N(\mathbf{x}, \Omega, E, t)(1 - \sigma_{tot}(\mathbf{x}, E)v\Delta t) + \\ &+ \left(\int_0^\infty \int_{S^2} \sigma_{s\Delta}(E', E, \Omega', \Omega) v' N(\mathbf{x}, \Omega', E', t) d\Omega' dE' \right) dV d\Omega dE \Delta t. \end{aligned} \quad (25)$$

Nu lägger vi till och drar bort $N(\mathbf{x}, \Omega, E, t + \Delta t)$, och får efter lite omarrangering av termerna att

$$\begin{aligned} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{N(\mathbf{x} + \Omega v\Delta t, \Omega, E, t + \Delta t) - N(\mathbf{x}, \Omega, E, t + \Delta t) + N(\mathbf{x}, \Omega, E, t + \Delta t) - N(\mathbf{x}, \Omega, E, t)}{\Delta t} \right] \\ = -\sigma_{tot}(\mathbf{x}, E)vN(\mathbf{x}, \Omega, E, t) + \int_0^\infty \int_{S^2} \sigma_{s\Delta}(E', E, \Omega', \Omega) v' N(\mathbf{x}, \Omega', E', t) d\Omega' dE'. \end{aligned} \quad (26)$$

Eftersom

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{N(\mathbf{x}, \Omega, E, t + \Delta t) - N(\mathbf{x}, \Omega, E, t)}{\Delta t} = \frac{\partial N(\mathbf{x}, \Omega, E, t)}{\partial t} \quad (27)$$

och

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{N(\mathbf{x} + \mathbf{\Omega}v\Delta t, \mathbf{\Omega}, E, t + \Delta t) - N(\mathbf{x}, \mathbf{\Omega}, E, t + \Delta t)}{\Delta t} = v\mathbf{\Omega} \cdot \nabla_x N(\mathbf{x}, \mathbf{\Omega}, E, t) \quad (28)$$

så får vi att

$$\begin{aligned} & \frac{\partial N(\mathbf{x}, \mathbf{\Omega}, E, t)}{\partial t} + v\mathbf{\Omega} \cdot \nabla_x N(\mathbf{x}, \mathbf{\Omega}, E, t) + \sigma_{tot}(\mathbf{x}, E)vN(\mathbf{x}, \mathbf{\Omega}, E, t) \\ &= \int_0^\infty \int_{S^2} \sigma_{s\Delta}(E', E, \mathbf{\Omega}', \mathbf{\Omega})v'N(\mathbf{x}, \mathbf{\Omega}', E', t) d\mathbf{\Omega}' dE'. \end{aligned} \quad (29)$$

Om vi låter $\psi(\mathbf{x}, \mathbf{\Omega}, E, t) = vN(\mathbf{x}, \mathbf{\Omega}, E, t)$ vara flödet får vi slutligen transportekvationen

$$\begin{aligned} & \frac{1}{v} \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, \mathbf{\Omega}, E, t)}{\partial t} + \mathbf{\Omega} \cdot \nabla_x \psi(\mathbf{x}, \mathbf{\Omega}, E, t) + \sigma_{tot}(\mathbf{x}, E)\psi(\mathbf{x}, \mathbf{\Omega}, E, t) \\ &= \int_0^\infty \int_{S^2} \sigma_{s\Delta}(E', E, \mathbf{\Omega}', \mathbf{\Omega})\psi(\mathbf{x}, \mathbf{\Omega}, E, t) d\mathbf{\Omega}' dE'. \end{aligned} \quad (30)$$

2.2.2 Fokker-Plancks ekvation

Förenkling av transportekvationen

Det vi vill få fram genom att lösa transportekvationen är $\psi(\mathbf{x}, E, \mathbf{\Omega}, t)$, som beskriver flödet av partiklar med energi E och riktning $\mathbf{\Omega}$ i position \mathbf{x} . Att utföra detta analytiskt är i allmänhet inte möjligt utan man är hänvisad till approximativa, numeriska metoder. Men transportekvationen utgör en så kallad integral-differential ekvation⁵ vilken är svår att lösa med numeriska metoder. Det krävs därför att ekvationen förenklas avsevärt, för att bli möjlig att ta sig an med t.ex. en Galerkinmetod. Nedan kommer vi att genomföra sådana förenklingar och följer därvid Pomraning [4]. Vi kommer att utveckla detaljer och resonemang som inte beskrivs utförligt i [4].

Flödet beror av både \mathbf{x} , E , $\mathbf{\Omega}$ och t men vi kommer inte att skriva ut beroendet av \mathbf{x} eftersom det inte påverkar beräkningarna. Vidare kommer vi enbart att intressera oss för stationära lösningar, det vill säga lösningar som är konstanta över tid, varför vi kan avstå från att skriva ut tidsberoendet och konstaterar de termer som innehåller en tidsderivata då blir noll. Utgångspunkten är alltså transportekvationen som under dessa förutsättningar lyder

$$\mathbf{\Omega} \cdot \nabla_x \psi(E, \mathbf{\Omega}) + \sigma_{tot}(E)\psi(E, \mathbf{\Omega}) = \int_0^\infty \int_{S^2} \sigma_{s\Delta}(E', E, \xi)\psi(E', \mathbf{\Omega}') d\mathbf{\Omega}' dE'. \quad (31)$$

Här har vi utnyttjat samma variabelsubstitution som i (23), $\xi = \mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{\Omega}$.

Som en första förberedelse för våra förenklingar kommer vi att utveckla $\sigma_{s\Delta}(E', E, \xi)$ i Legendrepolyinom $P_k(\xi)$ vilket är ett naturligt val av basfunktioner då ξ varierar mellan -1 och 1. Denna utveckling genomförs alltså i variabeln ξ varför koefficienterna kommer att bero av både E och E' . Vi får

$$\sigma_{s\Delta}(E', E, \xi) = \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{2k+1}{4\pi} \right) \sigma_{sk}(E', E) P_k(\xi). \quad (32)$$

Vi betraktar här hela uttrycket $\left(\frac{2k+1}{4\pi} \right) \sigma_{sk}(E', E)$ som a_n i standardformen för koefficienterna i ett fullständigt ortogonalt system, se (1). Anledningen till att vi gör så kommer att framgå

⁵Den innehåller såväl integraler som derivator av lösningfunktionen

längre fram. Vi har nu för koefficienterna $\left(\frac{2k+1}{4\pi}\right) \sigma_{sk}(E', E)$

$$\begin{aligned} \left(\frac{2k+1}{4\pi}\right) \sigma_{sk}(E', E) &= \frac{\langle \sigma_{s\Delta}(E', E, \xi), P_k(\xi) \rangle_{L^2(-1,1)}}{\frac{2}{2k+1}} \\ &= \frac{2k+1}{2} \langle \sigma_{s\Delta}(E', E, \xi), P_k(\xi) \rangle_{L^2(-1,1)} \\ &= \frac{2k+1}{2} \int_{-1}^1 \sigma_{s\Delta}(E', E, \xi) P_k(\xi) d\xi \end{aligned} \quad (33)$$

$$(34)$$

Flödet, $\psi(E', \mathbf{\Omega}')$, utvecklar vi istället i klotytffunktioner. Denna utveckling genomför vi i $\mathbf{\Omega}'$, som ju varierar över S^2 , och koefficienterna i denna utveckling kommer alltså att bero av E' . Vi får

$$\psi(E', \mathbf{\Omega}') = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \left(\frac{2n+1}{4\pi}\right) a_{nm} \psi_{nm}(E') Y_{nm}(\mathbf{\Omega}'). \quad (35)$$

Här betraktar vi, precis som ovan, hela uttrycket $\left(\frac{2n+1}{4\pi}\right) a_{nm} \psi_{nm}(E')$ som a_n i standardformen för koefficienterna i en serietveckling, se (1), där a_{nm} är som i (15). Koefficienterna ges med andra ord av

$$\begin{aligned} \left(\frac{2n+1}{4\pi}\right) a_{nm} \psi_{nm} &= \frac{\langle \psi(E', \mathbf{\Omega}'), Y_{nm}(\mathbf{\Omega}') \rangle_{L^2(S^2)}}{\frac{4\pi}{(2n+1)a_{nm}}} \\ &= \left(\frac{2n+1}{4\pi}\right) a_{nm} \int_{S^2} \psi(E', \mathbf{\Omega}') Y_{nm}(\mathbf{\Omega}') d\mathbf{\Omega}' \end{aligned}$$

Nu studerar vi den innersta integralen i högerledet av transportekvationen (31) och kallar den för I .

$$I = \int_{S^2} \sigma_{s\Delta}(E', E, \xi) \psi(E', \mathbf{\Omega}') d\mathbf{\Omega}'$$

Om vi i detta uttryck introducerar utvecklingarna av $\sigma_{s\Delta}$ och ψ , det vill säga (32) respektive (35), och flyttar de faktorer som inte beror av $\mathbf{\Omega}'$ ut ur integralen får I formen

$$I = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \left(\frac{2k+1}{4\pi}\right) \left(\frac{2n+1}{4\pi}\right) a_{nm} \sigma_{sk}(E', E) \psi_{nm}(E') \int_{S^2} P_k(\xi) Y_{nm}(\mathbf{\Omega}') d\mathbf{\Omega}'. \quad (36)$$

Vi utgår under detta steg ifrån att det är tillåtet att byta plats på summation och integration. Motsvarande antagande görs genomgående under denna härledning.

Detta uttryck för I vill vi nu förenkla och fokuserar på integralen i slutet som vi betecknar med J .

$$J = \int_{S^2} P_k(\xi) Y_{nm}(\mathbf{\Omega}') d\mathbf{\Omega}'.$$

För att angripa J använder vi oss nu av (5) som säger att

$$P_k(\xi) = \sum_{l=-k}^k a_{kl} Y_{kl}(\mathbf{\Omega}) Y_{kl}^*(\mathbf{\Omega}') \quad (37)$$

där $\xi = \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{\Omega}'$ precis som ovan.

Sätter vi in detta uttryck för $P_k(\xi)$ i J och utnyttjar ortogonaliteten hos klotytfunktionerna (15) kan vi utföra följande beräkningar:

$$\begin{aligned}
J &= \int_{S^2} \left(\sum_{l=-k}^k a_{kl} Y_{kl}(\boldsymbol{\Omega}) Y_{kl}^*(\boldsymbol{\Omega}') \right) Y_{nm}(\boldsymbol{\Omega}') d\boldsymbol{\Omega}' \\
&= \sum_{l=-k}^k a_{kl} Y_{kl}(\boldsymbol{\Omega}) \int_{S^2} Y_{nm}(\boldsymbol{\Omega}') Y_{kl}^*(\boldsymbol{\Omega}') d\boldsymbol{\Omega}' \\
&= \frac{a_{km} 4\pi}{a_{nm} (2n+1)} Y_{km}(\boldsymbol{\Omega}) \delta_{nk}
\end{aligned} \tag{38}$$

Här är δ_{nk} definierad som i avsnittet om Legendrepolytom.

Vi utnyttjar nu detta uttryck för J i (36). Definitionen av δ_{nk} medför då att endast de termer där $n = k$ kommer att ha betydelse, resten kommer att försvinna. Vi får med andra ord att

$$I = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \left(\frac{2n+1}{4\pi} \right) a_{nm} \sigma_{sn}(E', E) Y_{nm}(\boldsymbol{\Omega}) \psi_{nm}(E').$$

Sätter vi så in denna form för I i (31) och flyttar alla faktorer som är oberoende av E' ut ur integralen får vi ekvationen

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla_x \psi(E, \boldsymbol{\Omega}) + \sigma_{tot}(E) \psi(E, \boldsymbol{\Omega}) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \left(\frac{2n+1}{4\pi} \right) a_{nm} Y_{nm}(\boldsymbol{\Omega}) \int_0^{\infty} \sigma_{sn}(E', E) \psi_{nm}(E') dE'.
\end{aligned} \tag{39}$$

Vi har alltså lyckats avlägsna en av integralerna i transportekvationen till förmån för en dubbelsumma. Om vi nu slutligen inför uttrycket för σ_{sn} , det vill säga (33), i denna ekvation och delar upp σ_{tot} i en absorptionsterm σ_a och en spridningsterm σ_s får vi

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla_x \psi(E, \boldsymbol{\Omega}) + (\sigma_a(E) + \sigma_s(E)) \psi(E, \boldsymbol{\Omega}) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \left(\frac{2n+1}{2} \right) a_{nm} Y_{nm}(\boldsymbol{\Omega}) \int_0^{\infty} \psi_{nm}(E') \int_{-1}^1 P_n(\xi) \sigma_{s\Delta}(E', E, \xi) d\xi dE'.
\end{aligned} \tag{40}$$

Denna form av transportekvationen kommer att vara utgångspunkten när vi nu går vidare för att härleda Fokker-Plancks ekvation.

Asymptotisk utveckling

Vi antar att längdenheten är vald så att storleken av systemet partiklarna rör sig i är av ordning $\mathcal{O}(1)$ ⁶. Eftersom partiklarna färdas endast en mycket kort sträcka mellan varje kollision är då $\sigma_s(E) \gg 1$; det kommer att äga rum ett stort antal kollisioner per enhetslängd. Vi behöver arbeta med något av ordning $\mathcal{O}(1)$ och inför därför

$$\hat{\sigma}_s(E) = \Delta \sigma_s(E) \tag{41}$$

där $\hat{\sigma}_s(E) = \mathcal{O}(1)$ och $0 < \Delta \ll 1$ är av samma storleksordning som fria medelvägen (eng. *mean free path*), det vill säga den genomsnittliga sträcka en partikel färdas mellan två kollisioner.

Vi vill utföra en liknande skalning för $\sigma_{s\Delta}$, spridningskärnan, och gör därför variabelbytet

$$x = \frac{E' - E}{\varepsilon}, \quad 0 < \varepsilon \ll 1 \tag{42}$$

$$y = \frac{1 - \xi}{\delta}, \quad 0 < \delta \ll 1. \tag{43}$$

⁶Att $f(x)$ är $\mathcal{O}(g(x))$ betyder att $\frac{f(x)}{g(x)}$ är begränsad då $x \rightarrow 0$.

Vi definierar nu $\hat{\sigma}_{s\Delta}$ som

$$\hat{\sigma}_{s\Delta}(E', x, y) = \Delta \sigma_{s\Delta}(E', E, \xi). \quad (44)$$

Då är $\hat{\sigma}_s$ av ordningen $\mathcal{O}(1)$ och derivatorna med avseende på x och y antas vara $\mathcal{O}(1)$ då $\varepsilon, \delta \rightarrow 0$ [4]. Betraktad ur vår ursprungliga skalning är då $\hat{\sigma}_{s\Delta}$ mindre koncentrerad kring $\xi = 1$ och $E' = E$ än $\sigma_{s\Delta}$ och kraftigt dämpad. Omvänt kommer vår ursprungliga $\sigma_{s\Delta}$ i vår nya skalning att framstå som mycket koncentrerad kring $x = 0$ och $y = 0$. Vi inför $\hat{\sigma}_{s\Delta}$ i (40) och erhåller

$$\begin{aligned} & \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla_x \psi(E, \boldsymbol{\Omega}) + \left(\sigma_a(E) + \frac{\hat{\sigma}_s(E)}{\Delta} \right) \psi(E, \boldsymbol{\Omega}) \\ &= \frac{1}{\Delta} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \left(\frac{2n+1}{2} \right) a_{nm} Y_{nm}(\boldsymbol{\Omega}) \\ & \cdot \int_0^{\infty} \psi_{nm}(E') \int_{-1}^1 P_n(\xi) \hat{\sigma}_{s\Delta} \left(E', \frac{E' - E}{\varepsilon}, \frac{1 - \xi}{\delta} \right) d\xi dE'. \end{aligned} \quad (45)$$

Det vi nu söker är den asymptotiska gränsen av (45) då ε , δ och Δ går mot noll. Vi kommer först att koncentrera oss på dubbelintegralen i detta uttryck, vilket är naturligt då det är där ε och δ förekommer. 2π multiplicerat med denna dubbelintegral kommer vi att beteckna med K

$$K = \frac{2\pi}{\Delta} \int_0^{\infty} \int_{-1}^1 P_n(\xi) \hat{\sigma}_{s\Delta} \left(E', \frac{E' - E}{\varepsilon}, \frac{1 - \xi}{\delta} \right) \psi_{nm}(E') d\xi dE'.$$

Vi byter nu variabler i K från E' och ξ till x och y enligt (42) och (43) och får

$$K = \frac{2\pi\varepsilon\delta}{\Delta} \int_{-E/\varepsilon}^{\infty} \int_0^{2/\delta} P_n(1 - \delta y) \hat{\sigma}_{s\Delta}(E + \varepsilon x, x, y) \psi_{nm}(E + \varepsilon x) dy dx.$$

Detta uttryck kommer vi nu att Taylorutveckla runt $\varepsilon = \delta = 0$. Vi behåller därvid linjära termer i δ och kvadratiska termer i ε , resten kommer vi att bortse ifrån. Denna utveckling ger oss följande uttryck för K

$$\begin{aligned} K &= \frac{2\pi\varepsilon\delta}{\Delta} \int_{-E/\varepsilon}^{\infty} \int_0^{2/\delta} [P_n(1) - \delta y P_n'(1) + \mathcal{O}(\delta^2)] \\ & \cdot \left[1 + \varepsilon x \frac{\partial}{\partial E^2} + \frac{\varepsilon^2 x^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial E^2} + \mathcal{O}(\varepsilon^3) \right] [\hat{\sigma}_{s\Delta}(E, x, y) \psi(E)] dy dx. \end{aligned} \quad (46)$$

Den undre gränsen i integralen i x -led utgör ett problem för kommande steg och vi skulle vilja ersätta den med $-\infty$. Ett sådant byte introducerar naturligtvis ett fel, men så länge detta fel är högst $\mathcal{O}(\varepsilon^3)$ är detta acceptabelt då vi redan valt att försumma termer av sådan storleksordning. Hur stort felet blir beror på hur snabbt $\hat{\sigma}_s$ klingar av kring sitt maximum i $x = 0$. Exponentiellt avtagande funktioner uppför sig asymptotiskt som $e^{-|x|}$ för vilken det gäller att

$$\int_{-\infty}^{-E/\varepsilon} e^{-|x|} dx = [-e^x]_{-\infty}^{-E/\varepsilon} = -e^{-E/\varepsilon}.$$

Felet avtar alltså exponentiellt i ε och utgör därmed inget problem. Vi kommer därför att anta att $\hat{\sigma}_s$ avtar exponentiellt i x .

Vi kommer vidare att bortse från korstermer mellan ε och δ då dessa inte brukar tas i beaktande när man studerar Fokker-Planck ekvationen. Använder vi nu (2) och (3), delar

upp uttrycket samt grupperar termerna utifrån deras koefficient kan vi skriva om (46) som

$$\begin{aligned}
K &= \frac{2\pi\varepsilon\delta}{\Delta} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2/\delta} [1 + \mathcal{O}(\delta^2 + \varepsilon\delta + \varepsilon^3)] \hat{\sigma}_{s\Delta}(E, x, y) \psi_{nm}(E) dy dx \\
&\quad - \frac{n(n+1)\pi\varepsilon\delta^2}{\Delta} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2/\delta} y \hat{\sigma}_{s\Delta}(E, x, y) \psi_{nm}(E) dy dx \\
&\quad + \frac{2\pi\varepsilon^2\delta}{\Delta} \frac{\partial}{\partial E} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2/\delta} x \hat{\sigma}_{s\Delta}(E, x, y) \psi_{nm}(E) dy dx \\
&\quad + \frac{\pi\varepsilon^3\delta}{\Delta} \frac{\partial^2}{\partial E^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2/\delta} x^2 \hat{\sigma}_{s\Delta}(E, x, y) \psi_{nm}(E) dy dx. \tag{47}
\end{aligned}$$

Vi utför nu ännu ett variabelbyte, nära besläktat med (42) och (43) men något varierat,

$$\begin{aligned}
x &= \frac{E - E'}{\varepsilon} \\
y &= \frac{1 - \xi}{\delta}.
\end{aligned}$$

Om vi applicerar detta variabelbyte på K , noterar att jacobianen blir $\frac{1}{\varepsilon\delta}$ och ändrar integrationsordningen⁷ i båda variablerna får vi istället

$$\begin{aligned}
K &= \frac{2\pi}{\Delta} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-1}^1 [1 + \mathcal{O}(\delta^2 + \varepsilon\delta + \varepsilon^3)] \hat{\sigma}_{s\Delta}(E, \frac{E - E'}{\varepsilon}, \frac{1 - \xi}{\delta}) \psi_{nm}(E) dy \xi dE' \\
&\quad - \frac{n(n+1)\pi}{\Delta} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-1}^1 (1 - \xi) \hat{\sigma}_{s\Delta}(E, \frac{E - E'}{\varepsilon}, \frac{1 - \xi}{\delta}) \psi_{nm}(E) d\xi dE' \\
&\quad + \frac{2\pi}{\Delta} \frac{\partial}{\partial E} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-1}^1 (E - E') \hat{\sigma}_{s\Delta}(E, \frac{E - E'}{\varepsilon}, \frac{1 - \xi}{\delta}) \psi_{nm}(E) d\xi dE' \\
&\quad + \frac{\pi}{\Delta} \frac{\partial^2}{\partial E^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-1}^1 (E - E')^2 \hat{\sigma}_{s\Delta}(E, \frac{E - E'}{\varepsilon}, \frac{1 - \xi}{\delta}) \psi_{nm}(E) d\xi dE'. \tag{48}
\end{aligned}$$

Vi kan i dessa integraler utan vidare ersätta gränsen $-\infty$ med 0 då negativa energier inte förekommer och integralerna över negativa E' följaktligen är noll. Om vi nu går tillbaka från $\hat{\sigma}_{s\Delta}$ till vår ursprungliga $\sigma_{s\Delta}$ och utnyttjar (23) på den första termen i K får vi

$$\begin{aligned}
K &= \sigma_s(E) \psi_{nm}(E) - n(n+1)T(E) \psi_{nm}(E) + \frac{\partial}{\partial E} [S(E) \psi_{nm}(E)] \\
&\quad + \frac{\partial^2}{\partial E^2} [R(E) \psi_{nm}(E)] + \mathcal{O}\left(\frac{\delta^2 + \varepsilon\delta + \varepsilon^3}{\Delta}\right) \tag{49}
\end{aligned}$$

där vi har definierat:

$$T(E) = \pi \int_0^{\infty} \int_{-1}^1 (1 - \xi) \sigma_{s\Delta}(E, E', \xi) d\xi dE' = \mathcal{O}\left(\frac{\delta}{\Delta}\right) \tag{50}$$

$$S(E) = 2\pi \int_0^{\infty} \int_{-1}^1 (E - E') \sigma_{s\Delta}(E, E', \xi) d\xi dE' = \mathcal{O}\left(\frac{\varepsilon}{\Delta}\right) \tag{51}$$

$$R(E) = 2\pi \int_0^{\infty} \int_{-1}^1 (E - E')^2 \sigma_{s\Delta}(E, E', \xi) d\xi dE' = \mathcal{O}\left(\frac{\varepsilon^2}{\Delta}\right) \tag{52}$$

För att kunna uttala oss om storleksordningen hos dessa integraler har vi antagit att integrandernas storleksordningar bevaras under integrationen.

⁷Alltså byter plats på den övre och undre integrationsgränsen och därmed får ut ett minustecken. Då vi utför två sådana byten tillkommer bara en faktor 1.

$R(E)$ är uppenbarligen av mindre ordning än övriga termer och vi kommer därför att bortse från denna. Utnyttjar vi nu (49) och använder detta uttryck för K i (45) får vi nedanstående ekvation, utifrån vilken vi kan inleda våra slutliga förenklingar. Vi har

$$\begin{aligned} & \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla_x \psi(E, \boldsymbol{\Omega}) + [\sigma_a(E) + \sigma_s(E)]\psi(E, \boldsymbol{\Omega}) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \left(\frac{2n+1}{4\pi} \right) a_{nm} Y_{nm}(\boldsymbol{\Omega}) \left(\sigma_s(E)\psi_{nm}(E) \right. \\ & \quad \left. - n(n+1)T(E)\psi_{nm}(E) + \frac{\partial}{\partial E}[S(E)\psi_{nm}(E)] \right) + \mathcal{O}\left(\frac{\delta^2 + \varepsilon\delta + \varepsilon^3}{\Delta}\right). \end{aligned} \quad (53)$$

Första delen av summan i högerledet kan nu strykas mot $\sigma_s(E)\psi(E, \boldsymbol{\Omega})$ i vänsterledet enligt (35). Att utföra nästa delsummation är inte lika trivialt då där förekommer en faktor $-n(n+1)$. Denna kan dock avlägsnas genom att utnyttja att klotytfunktionerna uppfyller (14) med $\lambda = n(n+1)$, det vill säga sambandet $-n(n+1)Y_{nm} = L_{FP}Y_{nm}$. Därefter utförs summationen precis som i första delsumman med hänvisning till (35). Den tredje delsumman utförs analogt med den första. Dessa förenklingar utmynnar då i

$$\begin{aligned} & \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla_x \psi(E, \boldsymbol{\Omega}) + \sigma_a(E)\psi(E, \boldsymbol{\Omega}) \\ &= T(E)L_{FP}\psi(E, \boldsymbol{\Omega}) + \frac{\partial}{\partial E}[S(E)\psi(E, \boldsymbol{\Omega})] + \mathcal{O}\left(\frac{\delta^2 + \varepsilon\delta + \varepsilon^3}{\Delta}\right). \end{aligned} \quad (54)$$

För att förenkla denna ekvation ytterligare antar vi att vi har energioberoende vilket tillåter oss att stryka den term som deriveras med avseende på E . Vi antar även att partiklarna inte kan absorberas, det vill säga att $\sigma_a = 0$.

Vi gör dessutom en uppskattning av $T(E)$ genom att uppskatta $\sigma_{s\Delta}$ med de två första termerna i dess Legendreutveckling och därefter utföra integrationen över ξ . Vi utför med andra ord beräkningarna

$$\begin{aligned} T(E) &= \pi \int_0^\infty \int_{-1}^1 (1-\xi)\sigma_{s\Delta}(E, E', \xi) d\xi dE' \\ &\approx \pi \int_0^\infty \int_{-1}^1 (1-\xi) \left(\frac{1}{4\pi}\sigma_{s0}P_0(\xi) + \frac{3}{4\pi}P_1(\xi) \right) d\xi dE' \\ &= \frac{1}{4} \int_0^\infty \int_{-1}^1 \sigma_{s0} + 3\sigma_{s1}\xi - \sigma_{s0}\xi - 3\sigma_{s1}\xi^2 d\xi dE' \\ &= \frac{1}{4} \int_0^\infty \left(\sigma_{s0} + \frac{3}{2}\sigma_{s1} + \sigma_{s0} - \frac{3}{2}\sigma_{s1} - \frac{1}{2}\sigma_{s0} - \sigma_{s1} + \frac{1}{2}\sigma_{s0} - \sigma_{s1} \right) dE' \\ &= \int_0^\infty \frac{\sigma_{s0} - \sigma_{s1}}{2} dE' =: \hat{T}(E). \end{aligned} \quad (55)$$

Sammantaget leder dessa förenklingar, om vi bortser från feltermerna i (54), fram till Fokker-Plancks ekvation

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla_x \psi(\boldsymbol{\Omega}) = \hat{T}(E) \left[\frac{\partial}{\partial \gamma}(1-\gamma^2) \frac{\partial}{\partial \gamma} + \left(\frac{1}{1-\gamma^2} \right) \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \psi(\boldsymbol{\Omega}) \quad (56)$$

Vi har här skrivit ut L_{FP} med γ som variabel istället för med ξ som i avsnitt 2.1.1, för att ansluta oss till våra beteckningar i detta avsnitt. ξ betecknade tidigare polvinkeln i polära koordinater, vilket med vår notation $\boldsymbol{\Omega} = (\mu, \eta, \gamma)$ är precis detsamma som γ .

I och med (56) har vi lyckats åstadkomma en förenkling av (31) där alla integraler är avlägsnade och det endast förekommer derivator. Vi börjar därmed närma oss en form som är möjlig att lösa med en Galerkin-metod. I nästa avsnitt kommer vi att genomföra de förenklingar som återstår innan vi slutligen kan tillämpa en sådan.

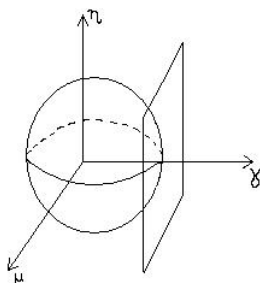
2.2.3 Fermis ekvation

Enligt beteckningen, L_{FP} , på Fokker-Planckoperatoren som vi infört tidigare kan (56) skrivas som

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla_x \psi(\boldsymbol{\Omega}) = T(E)L_{FP}\psi(\boldsymbol{\Omega}).$$

Som vi sett tidigare, se avsnitt 2.1.1, är L_{FP} helt enkelt Laplaceoperatoren på en sfär med radie 1, vilket vi nu ska använda för att förenkla ekvationen.

För att göra geometrin enklare och undvika en frihetsgrad approximerar vi den halva av enhetssfären där $\gamma > 0$ med planet $\gamma = 1$, se Figur 3. Vi utför, som föreslaget av Ivarez et al. i [8], en radiell projektion, $P : S^2 \rightarrow (\mu, \eta, 1)$, av enhetssfärshalvan på tangentplanet genom punkten $(0, 0, 1)$.



Figur 3: Projektion av halvsfären på planet $\gamma = 1$. För att det ska bli entydigt projiceras endast högra halvan av enhetssfären.

För att se att detta inte är en alltför stor inskränkning bildar vi nu mängden

$$M_\theta = \{(\mu, \eta, \gamma) \in S^2; \cos(\theta) = \gamma\}$$

som är en cirkel på enhetssfären. Den cirkeln projiceras vi nu på planet $\gamma = 1$ och får $P[M_\theta]$. $P[M_\theta]$ bildar då en cirkel på planet $\gamma = 1$ som ligger på en sfär med centrum i origo och radie $(1 + \tan^2 \theta)^{1/2}$. Laplaceoperatoren på denna nya sfär kommer då att skilja sig från Laplaceoperatoren på den ursprungliga sfären med en faktor $\frac{1}{r^2} = \frac{1}{1 + \tan^2 \theta}$, se (11), vilket ju går mot 1 då θ går mot 0.

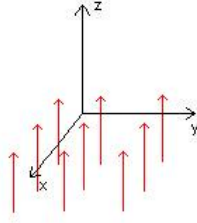
Om vi nu låter Ω variera i projektionsplanet $(\mu, \eta, 1)$ istället för i enhetssfären och ersätter L_{FP} med Laplaceoperatoren på det planet erhåller vi

$$\mu \frac{\partial \psi}{\partial x} + \eta \frac{\partial \psi}{\partial y} + \frac{\partial \psi}{\partial z} = T(E) \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial \mu^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial \eta^2} \right). \quad (57)$$

Denna ekvation kallas Fermis ekvation och den är en god approximation, enligt det tidigare resonemanget, av (56) då spridningsvinkeln, θ , är liten.

2.2.4 Broad beam-ekvationen

I broad beam-modellen antas det att strålningskällan är homogen över hela xy-planet och att strålningen är parallell med z-axeln, vilket illustreras i Figur 4.



Figur 4: Strålningsriktning i broad beam-modellen. Pilarna i figuren visar var och med vilken riktning strålningen skickas in.

Detta medför av symmetriskäl att lösningen blir oberoende av x, y och ϕ vilket innebär att vi kan, genom att helt enkelt ta bort derivatorna med avseende på x, y och ϕ då de blir noll, reducera (56) till

$$\gamma \frac{\partial \psi(\boldsymbol{\Omega})}{\partial z} = T(E) \left[\frac{\partial}{\partial \gamma} (1 - \gamma^2) \frac{\partial}{\partial \gamma} \right] \psi(\boldsymbol{\Omega}). \quad (58)$$

Detta är den ekvation man löser för att få fram flödet i broad beam modellen.

3 Implementering av modellerna

3.1 Introduktion till Standard Galerkin-metoden

Vi ger en kort introduktion till finita element-metoden, och särskilt Standard Galerkin-metoden, som vi använder vid implementeringen av våra modeller. Vi utgår från framställningen i [7] av Eriksson et al, och hänvisar den intresserade läsaren till denna bok för en djupare genomgång av finita element-metoden.

Finita element-metoden används för att lösa partiella differentialekvationer numeriskt, genom att approximera den exakta lösningen med en funktion i ett funktionsrum, försöksrummet (eng. *trial space*) V_h , med ändligt antal dimensioner. Den exakta lösningen antas ligga i ett oändligdimensionellt funktionsrum V , och V_h väljs som ett delrum till V .

Första steget är att skriva differentialekvationen på så kallad svag form, även kallad variationsformulering (eng. *variational formulation*). Detta görs i Standard Galerkin-metoden genom att hela ekvationen skalärmultiplikeras, i en lämpligt vald skalärprodukt, med en testfunktion $v \in V$. Det går att visa att variationsformuleringen är ekvivalent med den ursprungliga differentialekvationen. Vi konkretiserar proceduren med ett exempel: för differentialekvationen

$$u'(x) - \lambda u(x) = f(x), \quad x \in (-1, 1), \quad (59)$$

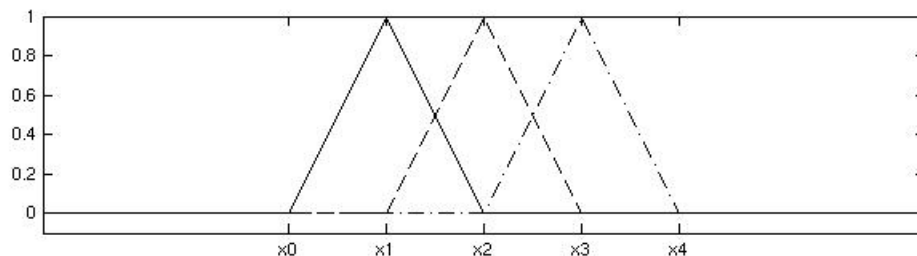
där $f(x)$ är en känd funktion, definierar vi skalärprodukten $\langle g, h \rangle = \int_{-1}^1 g(x)h(x) dx$, och ekvationen på svag form blir

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 (u'(x) - \lambda u(x))v(x)dx &= \int_{-1}^1 f(x)v(x)dx, \quad \forall v \in V \\ &\Leftrightarrow \\ \langle u', v \rangle - \lambda \langle u, v \rangle &= \langle f, v \rangle, \quad \forall v \in V. \end{aligned} \quad (60)$$

Nästa steg, diskretiseringen, är att välja ett lämpligt, ändligdimensionellt försöksrum V_h , som vi söker en approximativ lösning i, och ett ändligdimensionellt testrum (eng. *test space*), även det ett delrum till V , som testfunktionerna v ska tillhöra. Vi låter här testrummet vara samma rum som försöksrummet, och hanterar alltså endast två funktionsrum, V och V_h . Ett vanligt val av försöksrum, som även vi använder, är rummet av styckvis linjära funktioner (på en lämplig triangulering, \mathcal{T}_h , av definitionsmängden). Finita element-formuleringen av problemet lyder nu: hitta en funktion $U \in V_h$ som uppfyller variationsformuleringen för alla $v \in V_h$. I exemplet får vi: hitta $U \in V_h$, så att

$$\langle U', v \rangle - \lambda \langle U, v \rangle = \langle f, v \rangle, \quad \forall v \in V_h. \quad (61)$$

Eftersom rummet V_h är ändligdimensionellt, med dimension M säg, kan vi hitta en bas för det. För valet $V_h = \{\text{styckvis linjära funktioner i } V\}$ utgörs en lämplig bas av $\{\phi_i(x)\}_{i=1}^M$, där för varje i ϕ_i är styckvis linjär, och har funktionsvärdet 0 i alla noder utom noden x_i , där funktionsvärdet är 1. En fördel med denna bas är att den är nästan ortogonal, vilket underlättar beräkningarna. Figur 5 illustrerar basfunktionerna ϕ_1 , ϕ_2 och ϕ_3 , i det endimensionella fallet.



Figur 5: Basfunktioner till rummet av styckvis linjära funktioner i en dimension.

Eftersom $U \in V_h$ kan vi nu skriva U som en linjärkombination av basfunktionerna på formen

$$U = \sum_{j=1}^M \xi_j \phi_j(x), \quad (62)$$

där koefficienterna ξ_j är okända. Vi sätter in (62) i (61) och utnyttjar skalärprodukternas linjäritet för att flytta ut summor och koefficienter ur skalärprodukterna, vilket ger

$$\sum_{j=1}^M \xi_j (\langle \phi'_j, v \rangle - \lambda \langle \phi_j, v \rangle) = \langle f, v \rangle, \quad \forall v \in V_h. \quad (63)$$

Att kräva att U uppfyller (63) för varje v i V_h är detsamma som att kräva att (63) är uppfyllt med $v = \phi_i$, för varje $i = 1, \dots, M$, eftersom varje v i V_h kan skrivas som en linjärkombination av basfunktionerna ϕ_i . De oändligt många ekvationerna (63) kan därför ekvivalent skrivas som de M ekvationerna

$$\sum_{j=1}^M \xi_j (\langle \phi'_j, \phi_i \rangle - \lambda \langle \phi_j, \phi_i \rangle) = \langle f, \phi_i \rangle, \quad i = 1, \dots, M. \quad (64)$$

Då funktionerna ϕ_i och f alla är kända kan skalärprodukterna i (64) beräknas, och vi får för varje i en linjär ekvation i de okända koefficienterna ξ_j . Tillsammans utgör de M ekvationerna ett linjärt ekvationssystem $A\xi = \mathbf{b}$, där $A = (a_{ij})$, $\xi = (\xi_j)$ och $\mathbf{b} = (b_i)$, med

$$\begin{aligned} a_{ij} &= \langle \phi'_j, \phi_i \rangle - \lambda \langle \phi_j, \phi_i \rangle, \quad i, j = 1, \dots, M \\ b_i &= \langle f, \phi_i \rangle, \quad i = 1, \dots, M. \end{aligned}$$

Vi har alltså lyckats överföra det ursprungligen kontinuerliga problemet att lösa en differentialekvation till ett väsentligen diskret problem; att lösa ett linjärt ekvationssystem. Detta ekvationssystem kan lösas med lämplig programvara, till exempel MATLAB, och genom att sätta in den funna lösningen ξ i (62) får vi så vår sökta approximation U av u .

Denna metod kan formuleras mer generellt för en allmän partiell differentialekvation. Låt A vara en linjär operator och studera den partiella differentialekvation

$$A\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad \mathbf{u}(\mathbf{x}) \in V \quad (65)$$

där Ω är en delmängd till \mathbb{R}^n och V är ett funktionsrum. Utifrån en triangulering, \mathcal{T}_h , av Ω bildar man så ett ändligdimensionellt delrum V_h till V i vilket man söker en approximativ lösning, $\mathbf{U}(\mathbf{x})$, till (65). Associerar man till V en skalärprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle_\Omega$ kan man nu ställa upp den till (65) hörande variationsformuleringen

$$\langle A\mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle = \langle \mathbf{f}, \mathbf{v} \rangle, \quad \forall \mathbf{v} \in V. \quad (66)$$

Nu begränsar vi Lösningssrummet till V_h och ansätter som ovan den approximativa lösningen på formen

$$\mathbf{U} = \sum_{j=1}^M \xi_j \phi_j(x), \quad (67)$$

där $\{\phi_j(x)\}_{j=1}^M$ utgör en bas i V_h . Sätter man in denna ansats i (66) kommer man helt analogt med exemplet ovan, att erhålla ett linjärt ekvationssystem i ξ . Lösningen till detta kommer sedan att ge \mathbf{U} , genom att än en gång utnyttja (67).

3.2 Implementering

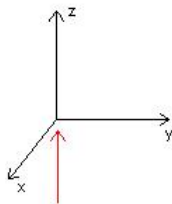
Vi betraktar det område man vill bestråla som ett konvext område inuti en låda men vi approximerar det bestrålade området med en låda i \mathbb{R}^3 sådan att

$$(x, y, z) \in [-x_0, x_0] \times [-y_0, y_0] \times [0, L],$$

det vill säga inga avancerade geometrier. Bestrålning mot tumör kan givetvis ske från alla möjliga riktningar, men man kan alltid betrakta strålningen som ortogonal mot lådans sidor genom att komposantuppdelat strålningens riktningsektor. Därför antar vi att all instrålning sker ortogonalt mot sidorna på våra områden.

3.2.1 Implementering av pencil beam-modellen (Fermis ekvation)

I pencil beam-modellen är det Fermis ekvation (57) som ger lösningen. Strålningskällan antas vara punktformig och skicka ut strålning från origo längs med z-axeln. Detta illustreras i Figur 6.



Figur 6: Strålningsriktning i pencil beam-modellen. Pilen visar var och med vilken riktning strålningen skickas in.

Vid implementering förenklas Fermis ekvation (57) ytterligare och lösningen studeras endast på planet $x = 0$. Även Ω begränsas och tillåts bara variera på linjestycket $\mu = 0$, $-1 \leq \eta \leq 1$, $\gamma = 1$. Begränsningen av η beror på att approximationen av Fokker-Plancks ekvation till Fermis ekvation är bäst för små vinklar. Lösningen söks alltså i en genomskärning av den ursprungliga geometrin och y tillåts variera mellan -1 och 1 eftersom strålningen huvudsakligen håller sig inom dessa gränser. Detta nya område kallar vi $O := [-1, 1] \times [0, L] \times [-1, 1]$. Ekvationen som då återstår att lösa är

$$\eta \frac{\partial \psi}{\partial y} + \frac{\partial \psi}{\partial z} = T(E) \frac{\partial \psi}{\partial \eta^2} \quad (68)$$

där $T(E)$ sätts till 0.002, vilket är det värde som används i [5].

Denna ekvation måste nu kompletteras med ett antal randvillkor som motiveras av den fysikaliska situation vi vill modellera. Till att börja med innebär det att vi lägger till ett randvillkor som beskriver den tänkta strålningen in i området genom ytan $-1 \leq y \leq 1$, $z = 0$, $-1 \leq \eta \leq 1$, yta 1 i Figur 7. Denna strålning beskrivs av en kontinuerlig funktion $f(\eta, y)$, utformad för att approximera ett Dirac- δ^8 i origo. Funktionen som används är

$$f(\eta, y) = \frac{m^2}{2\pi} e^{-\frac{1}{2}((\eta m)^2 + (y m)^2)}.$$

Här kan m varieras för att uppnå önskad spetsighet på funktionen; ju större m desto spetsigare funktion. Här sätts m till 100.

Utöver det behöver randvillkoren garantera att strålningen in genom denna yta är den enda instrålning som äger rum. Enligt de restriktioner som upprättats är strålningsriktningen Ω

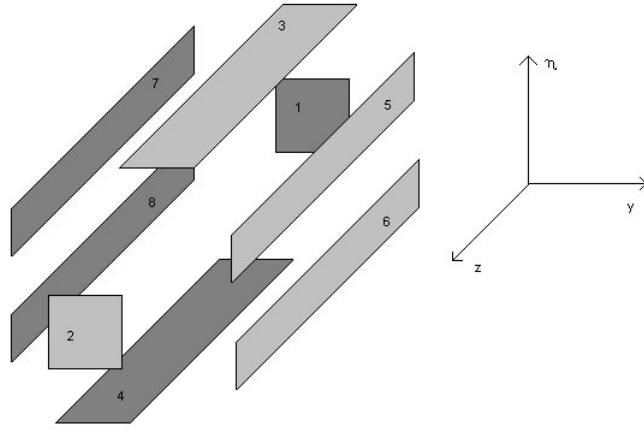
⁸En funktion $\delta(t)$ vars värde är noll överallt utom i $t = 0$ där funktionsvärdet är oändligt på ett sådant sätt att integralen av $\delta(t)$ över \mathbb{R} blir ett.

på formen $\mathbf{\Omega} = (0, \eta, 1)$. Genom att studera skalärprodukten mellan denna vektor och den från vårt geometriska område utåtriktade normalen, \mathbf{n} , kan vi avgöra om $\mathbf{\Omega}$ är riktad in i området; $\mathbf{\Omega}^T \mathbf{n} < 0$ innebär inåtriktad $\mathbf{\Omega}$ och $\mathbf{\Omega}^T \mathbf{n} > 0$ innebär utåtriktad. På de delar av vårt område där $\mathbf{\Omega}$ är inåtriktad sätter vi $\psi(\mathbf{\Omega}) = 0$.

Vi vill dessutom isolera vår lösning vid den maximala tillåtna vinkeln för att undvika läckage ut ur vårt område. Av denna anledning sätter vi $\frac{\partial}{\partial \eta} \psi(\eta) = 0$ för $\eta = \pm 1$. Sammanfattningsvis upprättas alltså följande randvillkor

$$\begin{cases} \psi(y, 0, \eta) = f(y, \eta) \text{ för } (y, \eta) \in [-y_0, y_0] \times [-1, 1], \text{ yta 1 i Figur (7)} & (a) \\ \frac{\partial}{\partial \eta} \psi(y, z, \pm 1) = 0 \text{ för } (y, z) \in [-y_0, y_0] \times [0, L], \text{ ytor 3 och 4 i Figur (7)} & (b) \\ \psi(y, z, \eta) = 0 \text{ på } \Gamma_{\Omega}^{-}, \text{ ytor 6 och 7 i figur (7)} & (c) \end{cases}$$

där $\Gamma_{\Omega}^{-} := \{(y, z, \eta) \in \partial O; \mathbf{\Omega}^T \mathbf{n} < 0\}$ och $\mathbf{\Omega} = (0, \eta, 1)$. Tillsammans med dessa randvillkor utgör Fermis ekvation (57) pencil beam-modellen.



Figur 7: Området vi löser Fermis ekvation på uppdelat i de ytor som har olika randvillkor.

Strålningsriktningen, z , behandlas som en tidsvariabel, som Asadzadeh, Larsen i [5]. Problemet betraktas då som en ekvation i två rumsvariabler - y , som verkligen är en rumsvariabel, och η , som egentligen representerar en vinkel - och en tidsvariabel. Eftersom z ses som en tidsvariabel så ses nu randvillkor (a) som ett begynnelsevillkor.

Ekvationen (68) löses med finita element-metoden Standard Galerkin, se avsnitt 3.1, i rumsled och bakåt-Euler (eng. *Backward Euler*) i tidsled (det vill säga z -led).

Bakåt-Euler innebär att intervallet $[0, L]$ delas in i ett ändligt antal delintervall med ändpunkterna $0 = z_0 < z_1 < \dots < z_N = L$, och att man utför approximationen

$$\frac{\partial \psi_{(n)}}{\partial z} \approx \frac{\psi_{(n)} - \psi_{(n-1)}}{k_n}, \quad (69)$$

där $\psi_{(n)} = \psi|_{z=z_n}$ och $k_n = z_n - z_{n-1}$, det vill säga längden av tidsintervallet. Steglängden väljs som $k_n = 0.01$. Approximationen (69) används sedan för att stega framåt från lösningen i ett tidssteg till lösningen i nästa tidssteg.

För att kunna använda Standard Galerkin i rumsled skrivs först ekvation (68) på svag form, genom att multiplicera hela ekvationen med en testfunktion $v \in V$, som är det oändligdimensionella rum den riktiga lösningen ligger i, där

$$V = \{u : \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 (u^2 + \|\nabla u\|^2) d\eta dy < \infty, u'_\eta(y, z, \pm 1) = 0, u = 0 \text{ på } \Gamma_{\Omega}^{-}\},$$

och sedan integrera över hela området $[-1, 1] \times [-1, 1]$

$$\int_{-1}^1 \int_{-1}^1 (\eta \psi'_y v + \psi'_z v) d\eta dy = T(E) \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \psi''_{\eta\eta} v d\eta dy.$$

Partialintegrering, med avseende på η , av den inre integralen i högerledet ger

$$\int_{-1}^1 \psi''_{\eta\eta} v d\eta = [\psi'_\eta v]_{-1}^1 - \int_{-1}^1 \psi'_\eta v'_\eta d\eta = - \int_{-1}^1 \psi'_\eta v'_\eta d\eta$$

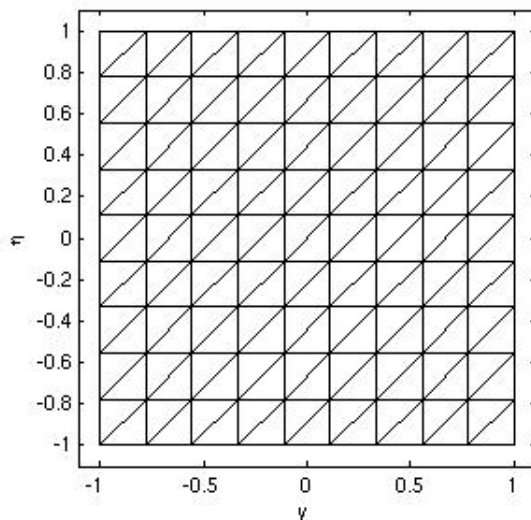
där den sista likheten gäller tack vare randvillkor (b).

Vi sätter nu in approximationen (69), multiplicerar hela ekvationen med k_n och får, efter omflyttning av några termer, ekvationen på svag form

$$\int_{-1}^1 \int_{-1}^1 (k_n \eta \psi'_{(n)y} v + \psi_{(n)} v + k_n T(E) \psi'_{(n)\eta} v'_\eta) d\eta dy = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \psi_{(n-1)} v d\eta dy \quad \forall v \in V.$$

Genom att sätta $\psi_{(0)} = f(y, \eta)$, där f kommer från begynnelsevillkoret, blir högerledet ovan känd data för $n = 1$, och vi kan lösa problemet för den okända funktionen $\psi_{(1)}$, som sedan blir till data i högerledet då vi löser problemet för nästa tidssteg, och så vidare.

En likformig triangulering \mathcal{T}_h av området $[-1, 1] \times [-1, 1]$, som illustreras i Figur 8, införs.



Figur 8: Likformig triangulering av området $[-1, 1] \times [-1, 1]$.

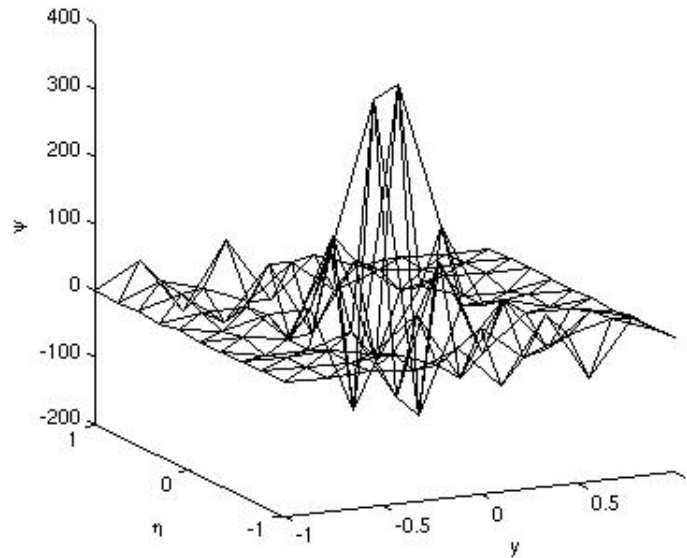
Ett diskret, ändligdimensionellt funktionsrum införs nu som testrum och försöksrum

$$V_h = \{u : u \in V, u \text{ styckvis linjär på } \mathcal{T}\}.$$

Standard Galerkin-metoden innebär att man, för varje n , approximerar $\psi_{(n)}$ med en funktion $\hat{\psi}_{(n)} \in V_h$ som uppfyller

$$\int_{-y_0}^{y_0} \int_{-1}^1 (k_n \eta \hat{\psi}'_{(n)y} v + \hat{\psi}_{(n)} v + k_n T(E) \hat{\psi}'_{(n)\eta} v'_\eta) d\eta dy = \int_{-y_0}^{y_0} \int_{-1}^1 \hat{\psi}_{(n-1)} v d\eta dy \quad \forall v \in V_h. \quad (70)$$

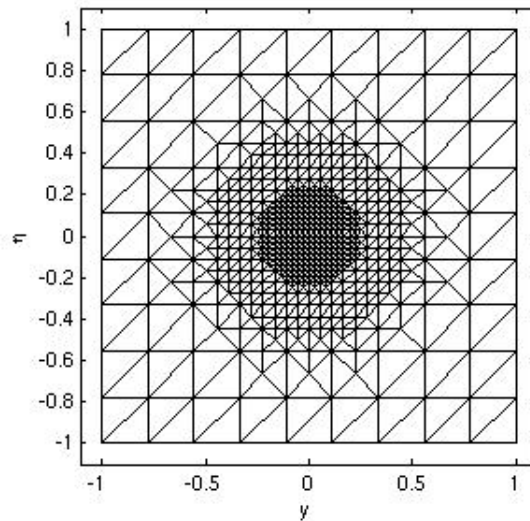
För att få fram de matriser och vektorer som bildas vid integration av (70) för $n = 1, \dots, N$ används Puffin, ett program som kan användas tillsammans med MATLAB. Då erhålls ett linjärt ekvationssystem som löses i MATLAB. Detta ger lösningarna $\hat{\psi}_{(n)}$, där n beskriver hur många steg in i området strålningen har kommit.



Figur 9: Lösning av pencil beam-modellen efter 100 tidssteg, alltså då $z=1$, med likformig triangulering.

Med trianguleringen i Figur 8 erhålls lösningen i Figur 9 för $z = 1$. Det betyder att efter en tidsenhet kommer strålningen att ha den fördelning som ses i figuren från att vid tid 0 ha varit starkt koncentrerad i origo. Vid studie av figuren ser man att mycket oscillationer har uppstått; detta kan delvis avhjälpas genom förfining av trianguleringen. Denna förfining utförs endast nära origo för att spara beräkningskraft.

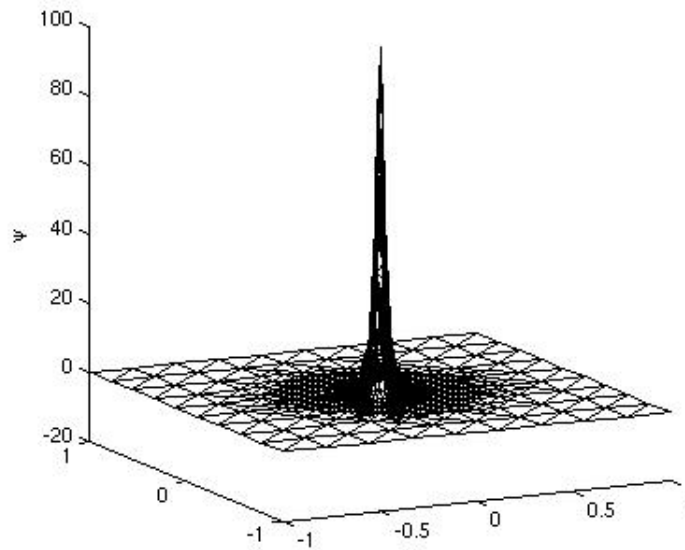
Nu införs därför en ny triangulering \mathcal{T}_{hf} av området $[-1, 1] \times [-1, 1]$ som är tätare i mitten, se Figur 10, eftersom strålningen är koncentrerad där.



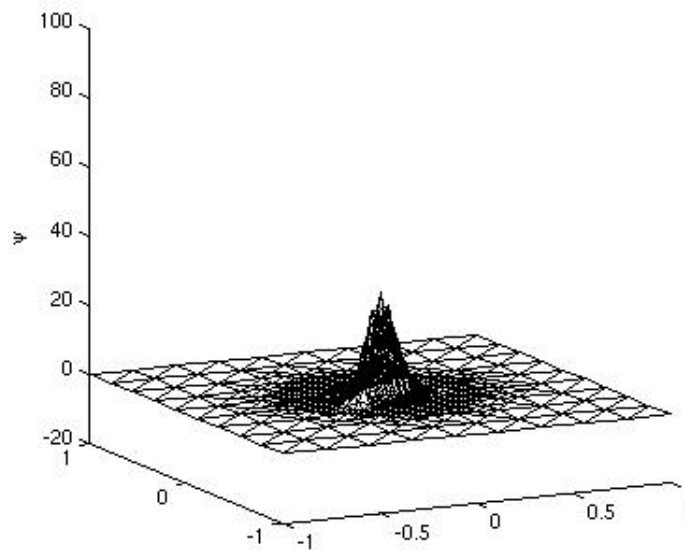
Figur 10: Den triangulering som använts, med förfining nära origo.

Med trianguleringen i Figur 10 erhålls lösningen i Figur 11 för $z = 1$ och lösningen i Figur 12 för $z = 2$. Mycket av oscillationerna har nu försvunnit tack vare den tätare trianguleringen.

Figureerna visar även att strålningen breder ut sig längs diagonalen mellan y och η .



Figur 11: Lösning av pencil beam-modellen efter 100 tidssteg, alltså då $z=1$, med förfinad triangulering.



Figur 12: Lösning av pencil beam-modellen efter 200 tidssteg, alltså då $z=2$, med förfinad triangulering.

3.2.2 Implementering av broad beam-modellen

Vi vill lösa ekvationen (58) som lyder

$$\gamma \frac{\partial \psi(\boldsymbol{\Omega})}{\partial z} = T(E) \left[\frac{\partial}{\partial \gamma} (1 - \gamma^2) \frac{\partial}{\partial \gamma} \right] \psi(\boldsymbol{\Omega}).$$

Här är $\gamma = \cos(\theta)$ representant för strålningsriktningen och z är rumsvariabeln längs med vilken strålningen skickas in.

Vi låter γ variera mellan -1 och 1 eftersom det motsvarar att den polära vinkeln θ varierar mellan 0 och π och i enlighet med vår tidigare beskrivning av området ligger z mellan 0 och L . Precis som i implementeringen av pencil beam-modellen så låter vi $T(E) = 0.002$ och stegar framåt i z -led med steglängden $k_n = 0.01$.

Randvillkoret som beskriver strålningen in i området blir i detta fall en funktion $g(\gamma)$ som approximerar ett Dirac- δ i punkten $\gamma = 1$ eftersom det motsvarar $\theta = 0$, det vill säga en strålningsriktning som är parallell med z -axeln. Den funktion vi använder är helt enkelt en halv kon.

För att isolera lösningen vid det största tillåtna γ sätter vi $\frac{\partial}{\partial \gamma} \psi(z, 1) = 0$ och eftersom vi förutom att isolera lösningen vid det minsta tillåtna γ inte vill ha någon strålning som färdas rakt bakåt sätter vi $\psi(z, -1) = 0$

Vårt strålningsområde kan nu ses som oändligt brett eftersom lösningen inte längre beror på x eller y så några randvillkor för att se till att det inte kommer in strålning i området från någon annan sida behövs inte.

Sammanfattningsvis har vi alltså följande randvillkor

$$\begin{cases} \psi(0, \gamma) = g(\gamma) \text{ för } (\gamma) \in [-1, 1] & (a) \\ \frac{\partial}{\partial \gamma} \psi(z, 1) = 0 \text{ för } z \in [0, L] & (b) \\ \psi(z, -1) = 0 \text{ för } z \in [0, L] & (c) \end{cases}$$

Då ekvationen i broad beam modellen endast är i två dimensioner kan vi inte använda Puffin för att få fram matriserna som i pencil beam-modellen. Därför skriver vi ett program i MATLAB för att lösa ekvationen med Standard Galerkin-metoden i variabeln γ och med bakåt-Euler i z . Vi delar upp intervallet $[0, L]$ i ett ändligt antal delintervall med ändpunkterna $0 = z_0 < z_1 < \dots < z_N = L$ och använder samma approximation av derivatan med avseende på z som i (69). Då har vi nu $\psi_{(n)} = \psi|_{z=z_n}$.

Ekvationen måste först skrivas på svag form och därför låter vi V beteckna det oändligdimensionella rum lösningen ligger i,

$$V = \left\{ u : \int_{-1}^1 (u^2 + (u'_\gamma)^2) d\gamma < \infty, \frac{\partial}{\partial \gamma} u(z, 1) = 0, u(z, -1) = 0 \right\},$$

och låter $v \in V$. Efter multiplikation av hela ekvationen med v och integrering över $[-1, 1]$ med avseende på γ får vi

$$\int_{-1}^1 \gamma \psi_{(n)} v d\gamma + k_n \int_{-1}^1 (1 - \gamma^2) \psi'_{(n)\gamma} v'_\gamma d\gamma = \int_{-1}^1 \gamma \psi_{(n-1)} v d\gamma, \quad (71)$$

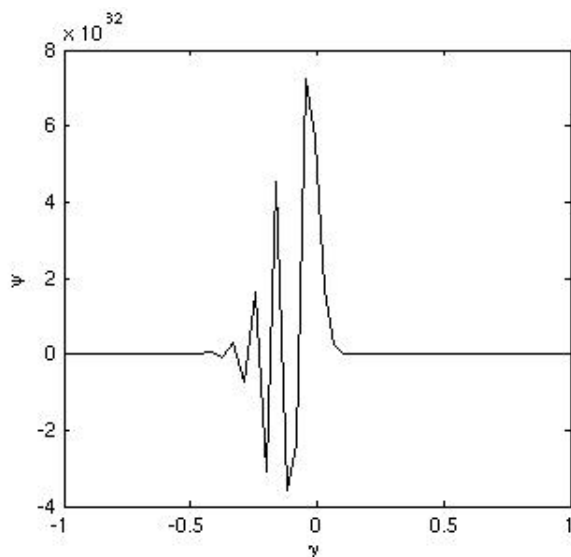
vilket är ekvationen på svag form.

Vi inför en triangulering \mathcal{T}_h av intervallet $[-1, 1]$ som är lite tätare vid γ nära 1 eftersom strålningen är koncentrerad där.

Det behövs även ett test- och försöksrum och vi väljer

$$V_h = \{u : u \in V, u \text{ styckvis linjär på } \mathcal{T}\}.$$

Nu approximerar vi, för varje n , $\psi_{(n)}$ med en funktion $\hat{\psi}_{(n)} \in V_h$ som uppfyller (71). Dessa $\hat{\psi}_{(n)}$ är våra lösningar för olika n .



Figur 13: Lösning av broad beam-modellen för $z=1$ då γ går från -1 till 1 .

I figur 13 presenteras lösningen efter 100 tidssteg, alltså då $z = 100 * k_n = 1$. Som framgår uppträder mycket kraftiga oscillationer och själva lösningen går inte att urskilja eftersom den är mycket mindre. Detta beror på att Standard Galerkin inte är en bra metod för att lösa ekvationer av den här typen.

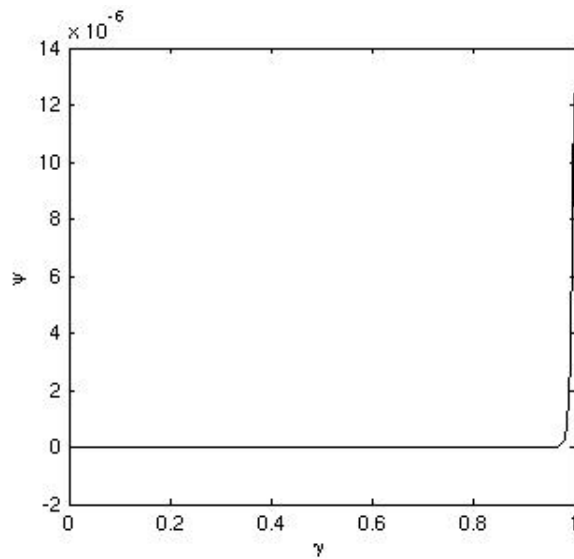
Broad beam-ekvationen (58) tillhör en klass av ekvationer som kallas stationära konvektionsdominerade konvektion-diffusion-ekvationer. Konvektionsriktningen beskrivs i detta fall av fältet $\beta = (0, \gamma)$. I allmänhet när man tar sig an denna typ av ekvationer, formulerar man randvillkor för inflödesranden, det vill säga den del av randen där β pekar in i lösningsområdet. Randvillkoret (a) uttalar sig emellertid om området $z = 0$, $\gamma \in [-1, 1]$, och för $\gamma < 0$ är utgör detta en utflödesrand; β pekar ut ur området. Våra randvillkor är alltså inga standardrandvillkor för denna typ av ekvation.

Att lösa konvektionsdominerade konvektion-diffusion-ekvationer med villkor på utflödesranden är ett ytterst svårt problem och Standard Galerkin-metoden är här mycket instabil. Detta förklarar förekomsten av de kraftiga oscillationerna i vår lösning. Denna problematik är nära besläktad med den som uppstår då man vill lösa värmeekvationen baklänges, vilket är ett notoriskt svårt problem.

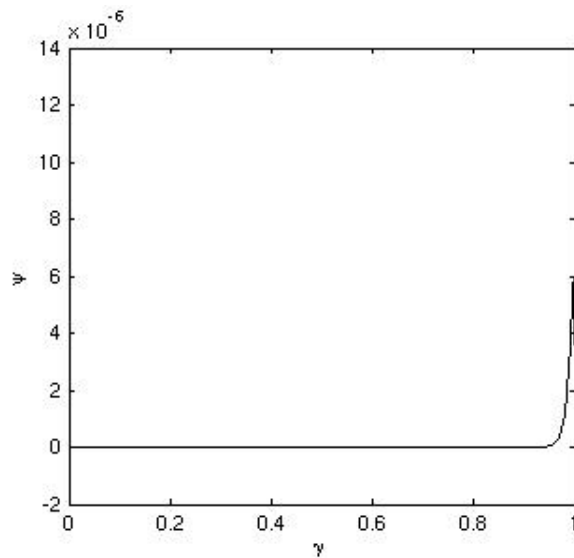
Den så kallade Streamline Diffusion-metoden skulle i detta sammanhang eventuellt vara mer stabil än Standard Galerkin-metoden. Att genomföra en implementering utifrån denna metod hamnar dessvärre utanför denna framställning och vi hänvisar till [6] för en detaljerad presentation.

Vi förenklar istället problemet. Som vi sett uppstår problemen kring $\gamma = 0$ varför vi testar att låta γ variera mellan 0 och 1 istället för mellan -1 och 1 . Detta motsvarar att den polära vinkeln θ ligger mellan 0 och $\frac{\pi}{2}$. Eftersom vinklar större än $\frac{\pi}{2}$ motsvarar strålning som färdas bakåt och vi vet att största delen av strålningen inte avviker så mycket vid varje krock, då våra ekvationer är konvektionsdominerade, är det inte orimligt att resultaten vid detta tillvägagångssätt hamnar i närheten av de riktiga.

Randvillkor (a) och (b) blir samma som ovan, randvillkor (c) blir istället $\psi(z, 0) = 0$ för $z \in [0, L]$.



Figur 14: Lösning av broad beam-modellen för $z=1$ då γ går från 0 till 1.



Figur 15: Lösning av broad beam-modellen för $z=2$ då γ går från 0 till 1.

I figurerna 14 och 15 visas lösningen för $z = 1$ och $z = 2$, där z är antalet längdenheter som strålningen nått in i området. Viktigt att komma ihåg när man studerar dessa grafer är att vi har γ på horisontella axeln. Ett stort värde på vår lösning för ett givet γ motsvarar alltså att en stor del av strålningen har riktningen γ .

4 Diskussion

I denna rapport härleds en transportekvation, och utifrån den Fokker-Plancks och Fermis ekvation samt broad beam-ekvationen. De två sista ekvationerna kompletterades med randvillkor vilket utmynnade i pencil beam- respektive broad beam-modellen, som båda beskriver strålningsspridning i ett isotropiskt medium. Modellerna implementerades i MATLAB med en Standard Galerkin-metod.

Istället för den använda transportekvationen skulle en icke-linjär transportekvation kunna användas som utgångspunkt för härledningen. Detta skulle möjligen ge ett mer tillfredsställande resultat.

I härledningen av Fokker-Plancks ekvation antogs flödet ψ vara energioberoende. En modell med energiberoende är sannolikt mer realistisk, men i gengäld betydligt svårare att implementera. I härledningen av ekvationerna gjordes ytterligare ett antal förenklande antaganden, vilka samtliga förekommer i referenslitteraturen.

Vid implementering av pencil beam-modellen erhålls en lösning som klingar av och breder ut sig då avståndet i z -led från strålningskällan ökar, vilket stämmer väl överens med såväl intuitionen som tidigare visade resultat. För att reducera de av metoden introducerade felen krävdes en lokal förfining av trianguleringen kring origo; med den grövre (likformiga) trianguleringen oscillerade lösningen.

Vid implementering av broad beam-modellen med Standard Galerkin-metoden uppstod lösningar med betydande oscillationer, som inte finns i den verkliga lösningen, även med förfinad triangulering. Detta beror på att Standard Galerkin-metoden inte är stabil vid denna typ av problem (konvektionsdominerade konvektion-diffusion-ekvationer). Dessa problem skulle eventuellt kunna avhjälpas genom att använda Streamline Diffusion-metoden, vilket vore en intressant vidareutveckling av projektet.

Genomgående har strålningen antagits komma från endast en källa. I verkligheten består en strålningsbehandling oftast av bestrålning från flera håll, så en vidareutveckling skulle kunna vara att hitta metoder för att addera resultaten av bestrålning från flera riktningar.

Sammanfattningsvis känns det inspirerande att ha kommit en god bit på väg mot en användbar modell i meningsfull tillämpning.

Referenser

- [1] E.W. Larsen, The nature of transport calculations in radiation oncology, *Transport Theory and Statistical Physics, Volume 26, Issue 7* (1997)
- [2] G. Folland, Fourier analysis and its applications, Brooks/Cole Publishing Company (1992)
- [3] O. Brander, Partiella differentialekvationer - en kurs i fysikens matematiska metoder, del B, Studentlitteratur (1973)
- [4] G.C. Pomraning, The Fokker-Planck operator as an asymptotic limit, *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences Vol.2, No.1* (1992) 21-36
- [5] M. Asadzadeh och E.W. Larsen, Linear transport equations in flatland with small angular diffusion and their finite element approximations, *Mathematical and Computer Modelling* 47 (2008) 495-514
- [6] J. Xin, Comparing the streamline diffusion method and bipartition model for electron transport [masterexamensarbete], Chalmers university of technology, university of Gothenburg (2008)
- [7] K. Eriksson, D. Estep, P. Hansbo och C. Johnson, Computational differential equations, Studentlitteratur (1996)
- [8] M. Ivarez, S. Bornhofen, S. Czerwiński, M. Schossleitner och N. Svendsen, A Fermi pencil beam model of radiation therapy, ECMI modelling week, (2001) Klagenfurt, Austria