

Modélisation du transport d'ions lourds dans la matière avec des méthodes aux moments entropiques

Erwan Olivier

Journées de Rencontres Jeunes Chercheurs, 14 – 20 octobre 2018

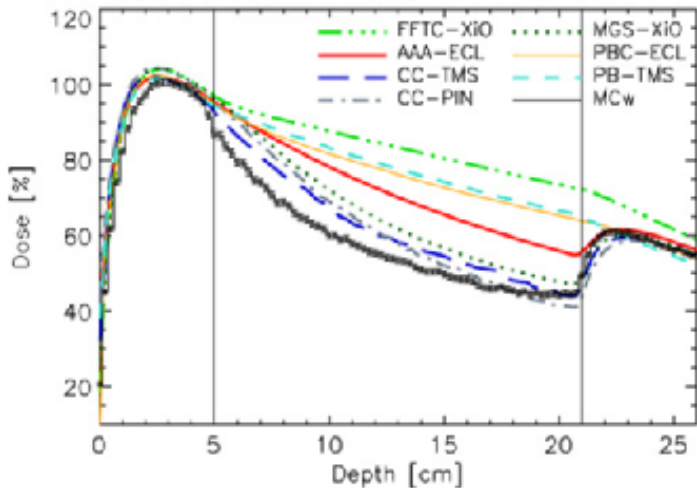
Directeurs de thèse : T. Nguyen-Bui, C. Champion

Collaboration : M. Alcocer-Avila, B. Dubroca, M. Quinto, J. Monti,
R. Rivarola, M. Frank

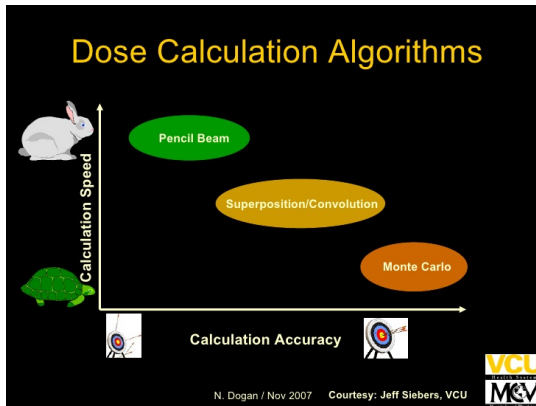


Introduction

- Modélisation du ralentissement des particules nécessaire dans de nombreux domaines : physique atomique, plasmas, matériaux
- Intérêt en médecine : hadronthérapie pour le traitement des cancers (recherche active)



Fogliata *et al.*, Phys Med Biol. (2007)



Modèle aux moments : permet un traitement déterministe du transport, bonne précision et rapidité.

Plan

- 1 Modèle Mn
- 2 Sections efficaces
- 3 Résultats
- 4 Conclusion et perspectives

Plan

- 1 Modèle Mn
- 2 Sections efficaces
- 3 Résultats
- 4 Conclusion et perspectives

Hypothèses

- Pas de collisions entre particules transportées
- Pas d'altération du milieu par les particules transportées
- Milieu fixe
- Flux constant, transport stationnaire
- Caractéristiques de la collision traduites par la section efficace, indépendantes de la composition du milieu

Équation de transport

Équation de Boltzmann linéarisée

$$\Omega \cdot \nabla \cdot \psi^i + \sigma_t^i \psi^i = \sum_{p=[i,j]} \int d\epsilon \int_{S^2} d\Omega \sigma^{p,i}(\epsilon \rightarrow \epsilon', \Omega \rightarrow \Omega') \psi^i(r, \epsilon, \Omega)$$

Discrétisation : en espace (3 variables), en énergie (1), en angle (2) soit 6 variables → prise des moments

Équations aux moments

$$\psi_0^i(r, \epsilon) = \int_{S^2} \psi^i(r, \epsilon, \Omega) d\Omega$$

$$\psi_1^i(r, \epsilon) = \int_{S^2} \Omega \cdot \psi^i(r, \epsilon, \Omega) d\Omega$$

$$\psi_2^i(r, \epsilon) = \int_{S^2} (\Omega \otimes \Omega) \psi^i(r, \epsilon, \Omega) d\Omega$$

Prise des moments

Équations pour les 2 premiers moments :

$$\nabla \cdot \psi_1^i(r, \epsilon') + \sigma_t^i(\epsilon') \psi_0^i(r, \epsilon') = \sum_{p=[i,j]} \int \sigma_0^{p,i}(\epsilon \rightarrow \epsilon') \psi_0^i(r, \epsilon) d\epsilon$$

$$\nabla \cdot \psi_2^i(r, \epsilon') + \sigma_t^i(\epsilon') \psi_1^i(r, \epsilon') = \sum_{p=[i,j]} \int \sigma_1^{p,i}(\epsilon \rightarrow \epsilon') \psi_1^i(r, \epsilon, \Omega) d\epsilon$$

3 inconnues, 2 équations → relation de fermeture

Théorème H

Théorème H (Boltzmann, 1872)

$$H = \iiint P(v) \ln P(v) d^3v$$

$$\frac{dH}{dt} \leq 0$$

Solution

Fonction de distribution de type Maxwell-Boltzmann :

$$\psi_{ME} = a_0 e^{-\Omega \cdot a_1}$$

où $a_0 \geq 0$ et $a_1 \in \mathbb{R}^3$ (multiplicateurs de Lagrange)

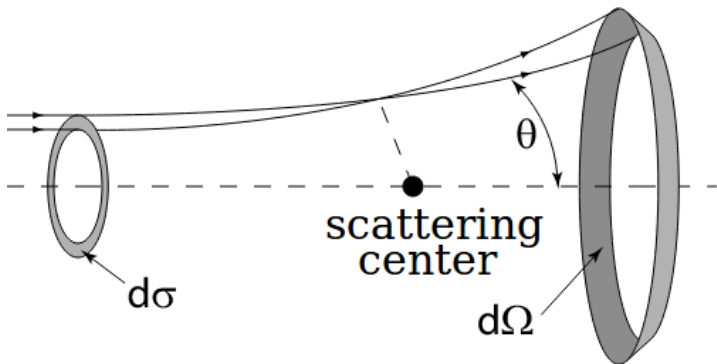
$$\psi_0^i = 4\pi a_0 \frac{\sinh(|a_1|)}{|a_1|}$$

$$\psi_1^i = 4\pi a_0 \frac{\sinh(|a_1|)(|a_1| \coth(|a_1|) - 1)}{|a_1|^2} a_1^i$$

Plan

- 1 Modèle Mn
- 2 Sections efficaces
- 3 Résultats
- 4 Conclusion et perspectives

Considérations générales

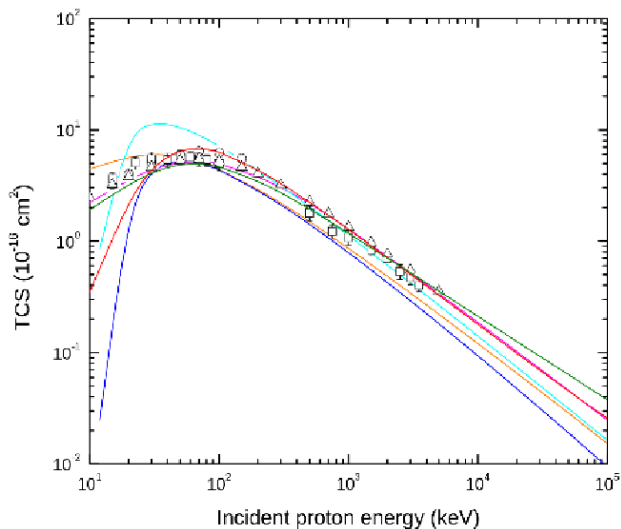


Sections efficaces *ab initio*

3.000e+01	1.000000000e-01	8.000e+00	9.27911899E-12	8.5079914e-05	4.85113040e-04	1.60040254e-03	1.64744085E-03	3.82150051e-03
3.000e+01	1.000000000e-01	1.000e+00	9.27897462E-12	8.50907153e-05	4.90932090e-04	1.60031092e-03	1.64776917E-03	3.82171750e-03
1.000e+01	1.000000000e-01	2.000e+00	9.27817803E-12	8.50691876e-05	4.9031647e-04	1.60009107e-03	1.64687323E-03	3.82126450e-03
3.000e+01	1.000000000e-01	3.000e+00	9.27791853E-12	8.50327508e-05	4.84913300e-04	1.67949042e-03	1.65935022E-03	3.82329971E-03
1.000e+01	1.000000000e-01	4.000e+00	9.27679771E-12	8.49431500e-05	4.84730907e-04	1.67876532e-03	1.65157945E-03	3.82463064e-03
1.000e+01	1.000000000e-01	5.000e+00	9.27548407E-12	8.44172737e-05	4.84668909e-04	1.67797016e-03	1.65149514E-03	3.82635396e-03
1.000e+01	1.000000000e-01	6.000e+00	9.27388765E-12	8.33821569e-05	4.84330009e-04	1.67701611e-03	1.65087532E-03	3.82835097E-03
1.000e+01	1.000000000e-01	7.000e+00	9.27208108E-12	8.24521871e-05	4.84131015e-04	1.67544058e-03	1.65111759E-03	3.83092970E-03
1.000e+01	1.000000000e-01	8.000e+00	9.26991792E-12	8.13193170e-05	4.83816388e-04	1.67394515e-03	1.65078073E-03	3.83388384e-03
1.000e+01	1.000000000e-01	9.000e+00	9.26743732E-12	8.01197165e-05	4.83593516e-04	1.67274051e-03	1.65117708E-03	3.83708797e-03
1.000e+01	1.000000000e-01	1.000e+01	9.26461102E-12	7.88411838e-05	4.83148928e-04	1.67031079e-03	1.67928232E-03	3.84086741e-03
1.000e+01	1.000000000e-01	1.200e+01	9.26159029E-12	7.75732934e-05	4.82756009e-04	1.66833001e-03	1.66589548E-03	3.844647935e-03
1.000e+01	1.000000000e-01	1.300e+01	9.25827451E-12	7.63757404e-05	4.82382329e-04	1.66607378e-03	1.66911091E-03	3.849402471e-03
1.000e+01	1.000000000e-01	1.400e+01	9.25468322E-12	7.52374050e-05	4.81937077e-04	1.66368467e-03	1.67095151E-03	3.85322229e-03
1.000e+01	1.000000000e-01	1.600e+01	9.25088181E-12	7.42185438e-05	4.81418209e-04	1.66098078e-03	1.67094554E-03	3.856856814e-03
1.000e+01	1.000000000e-01	1.800e+01	9.24693294E-12	7.32749090e-05	4.80818075e-04	1.65851826e-03	1.67162690E-03	3.860463575e-03
1.000e+01	1.000000000e-01	2.000e+01	9.24221368E-12	7.24481745e-05	4.80237081e-04	1.65634807e-03	1.67277068E-03	3.86393854e-03
1.000e+01	1.000000000e-01	1.700e+01	9.23752840E-12	7.16990104e-05	3.99698904e-04	1.65421577e-03	1.73787532E-03	3.87650180e-03
1.000e+01	1.000000000e-01	1.800e+01	9.23256381E-12	7.10369960e-05	3.99088715e-04	1.65211074e-03	1.74849444E-03	3.88913936e-03
1.000e+01	1.000000000e-01	1.900e+01	9.22737893E-12	7.04358229e-05	3.98468003e-04	1.65005951e-03	1.75964083E-03	3.89914231e-03
1.000e+01	1.000000000e-01	2.000e+01	9.22178939E-12	6.98820820e-05	3.97845471e-04	1.64804636e-03	1.77129932E-03	3.89745220e-03
1.000e+01	1.000000000e-01	2.100e+01	9.21681377E-12	6.93640648e-05	3.97221715e-04	1.64608206e-03	1.78345619E-03	3.90152064e-03
1.000e+01	1.000000000e-01	2.200e+01	9.20997378E-12	6.88742792e-05	3.96688996e-04	1.64515090e-03	1.79489537E-03	3.91189838e-03
1.000e+01	1.000000000e-01	2.300e+01	9.20307956E-12	6.84082300e-05	3.96213845e-04	1.64511816e-03	1.80902007E-03	3.92140064e-03
1.000e+01	1.000000000e-01	2.400e+01	9.19712758E-12	6.80001204e-05	3.95871632e-04	1.64741638e-03	1.82775432E-03	3.93084251e-03
1.000e+01	1.000000000e-01	2.500e+01	9.19203208E-12	6.76458404e-05	3.95634652e-04	1.65231796e-03	1.85073796E-03	3.93882620e-03
1.000e+01	1.000000000e-01	2.600e+01	9.18732898E-12	6.73414818e-05	3.95487121e-04	1.65294242e-03	1.88153186E-03	3.94821359e-03
1.000e+01	1.000000000e-01	2.700e+01	9.18300821E-12	6.70812446e-05	3.95437151e-04	1.65410407e-03	1.90519123E-03	3.95772098e-03
1.000e+01	1.000000000e-01	2.800e+01	9.18004802E-12	6.68648548e-05	3.95397809e-04	1.65497499e-03	1.93158706E-03	3.96712810e-03
1.000e+01	1.000000000e-01	2.900e+01	9.18040765E-12	6.67029378e-05	3.95324803e-04	1.65631492e-03	1.95815709E-03	3.97754516e-03
1.000e+01	1.000000000e-01	3.000e+01	9.18261533E-12	6.65787435e-05	3.95304821e-04	1.65818144e-03	1.98139268E-03	3.98761144e-03
1.000e+01	1.000000000e-01	3.100e+01	9.18443845E-12	6.65158838e-05	3.94971495e-04	1.65971648e-03	1.99512197E-03	3.99829324e-03
1.000e+01	1.000000000e-01	3.200e+01	9.18493286E-12	6.65009468e-05	3.94899720e-04	1.65973050e-03	1.99492464E-03	4.00097976e-03
1.000e+01	1.000000000e-01	3.300e+01	9.18271869E-12	6.64905400e-05	3.94815724e-04	1.65897046e-03	1.99155737E-03	4.00412987E-03
1.000e+01	1.000000000e-01	3.400e+01	9.18103099E-12	6.64876672e-05	3.94757296e-04	1.65834101e-03	1.98745025E-03	4.00867758e-03
1.000e+01	1.000000000e-01	3.500e+01	9.18047771E-12	6.64917804e-05	3.94652811e-04	1.65741642e-03	1.98515215E-03	4.01409100e-03
1.000e+01	1.000000000e-01	3.600e+01	9.98901117E-12	6.18139520e-05	3.83733009e-04	1.57389451e-03	1.81276814E-03	4.05319812E-03
1.000e+01	1.000000000e-01	3.700e+01	9.98901117E-12	6.18139520e-05	3.83733009e-04	1.57389451e-03	1.81276814E-03	4.05319812E-03
1.000e+01	1.000000000e-01	3.800e+01	9.98851898E-12	6.18257438e-05	3.84083691e-04	1.56892337e-03	1.804784722E-03	4.07878070E-03
1.000e+01	1.000000000e-01	3.900e+01	9.98851898E-12	6.18257438e-05	3.84083691e-04	1.56892337e-03	1.804784722E-03	4.07878070E-03
1.000e+01	1.000000000e-01	4.000e+01	9.98604868E-12	6.179604157e-05	3.82335530e-04	1.55734515e-03	1.80285388E-03	4.09984386e-03
1.000e+01	1.000000000e-01	4.100e+01	9.9851881E-12	6.179366295e-05	3.81672731e-04	1.54882044e-03	1.80018042E-03	4.11996442e-03
1.000e+01	1.000000000e-01	4.200e+01	9.98391117E-12	6.179125209e-05	3.81001361e-04	1.54234408e-03	1.80133440E-03	4.12123814E-03
1.000e+01	1.000000000e-01	4.300e+01	9.98290998E-12	6.178748158e-05	3.79731515e-04	1.53821889e-03	1.81714913E-03	4.13240684e-03
1.000e+01	1.000000000e-01	4.400e+01	9.98181053E-12	6.178308107e-05	3.78461801e-04	1.53297480E-03	1.83297480E-03	4.14329610e-03
1.000e+01	1.000000000e-01	4.500e+01	9.98171841E-12	6.180618108e-05	3.77927201e-04	1.52791603e-03	1.847946643E-03	4.15411078e-03
1.000e+01	1.000000000e-01	4.600e+01	9.98171841E-12	6.180618108e-05	3.77927201e-04	1.52791603e-03	1.847946643E-03	4.15411078e-03
1.000e+01	1.000000000e-01	4.700e+01	9.98073212E-12	6.174624180e-05	3.76984241e-04	1.51678554e-03	1.820887327E-03	4.17519380e-03
1.000e+01	1.000000000e-01	4.800e+01	9.97327610E-12	6.17158800e-05	3.75987004e-04	1.511218129e-03	1.822899212E-03	4.18551693e-03

- calcul quantique
- modèle CDW-EIS
- données tabulées

Comparaison modèle-expérience (ionisation)



Réalabilité

Le k -ième moment de σ est donné par :

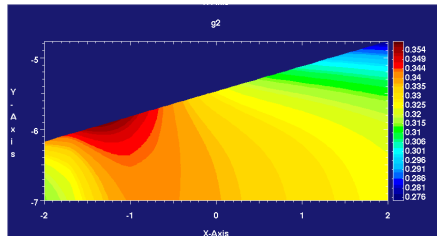
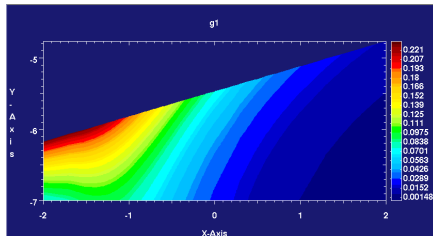
$$\sigma_k = 2\pi \int_{-1}^1 \sigma(\epsilon, \epsilon', \mu) \mu^k d\mu$$

avec $\mu = \cos(\theta)$ où θ est l'angle de diffusion

En posant $g_k = \frac{\sigma_k}{\sigma_0}$, on peut démontrer des conditions de *réabilité* :

$$\begin{aligned} |g_k| &\leq 1 \\ g_1^2 &\leq g_2 \leq 1 \\ \sigma_0 &\geq 0 \end{aligned}$$

Réalisabilité



X : $\log(\epsilon [MeV])$ vs Y : $\log(\epsilon' [MeV])$

Processus

Protons

- ionisation : $H^+ \rightarrow H^+ + e^-$
- excitation : $H^+ \rightarrow H^+$
- capture : $H^+ \rightarrow H$

Neutres

- ionisation : $H^+ \rightarrow H^+ + e^-$
- excitation : $H^+ \rightarrow H^+$
- perte : $H \rightarrow H^+$

Mise en groupe pour M1

Traitement multi-groupe des sections efficaces :

$$\sigma_{p,p'} = \frac{1}{\epsilon_p - \epsilon_{p+1}} \int_{\epsilon_{p+1}}^{\epsilon_p} d\epsilon \int_{\epsilon_{p'+1}}^{\epsilon_{p'}} \sigma(\epsilon, \epsilon') d\epsilon'$$

Les sections $\sigma(\epsilon, \epsilon')$ ont été calculées théoriquement au préalable.
Données discrètes \rightarrow une interpolation est nécessaire.

Plan

- 1 Modèle Mn
- 2 Sections efficaces
- 3 Résultats**
- 4 Conclusion et perspectives

Pouvoir d'arrêt et dose

Les sections efficaces permettent de calculer le pouvoir d'arrêt des protons par l'eau et la dose déposée.

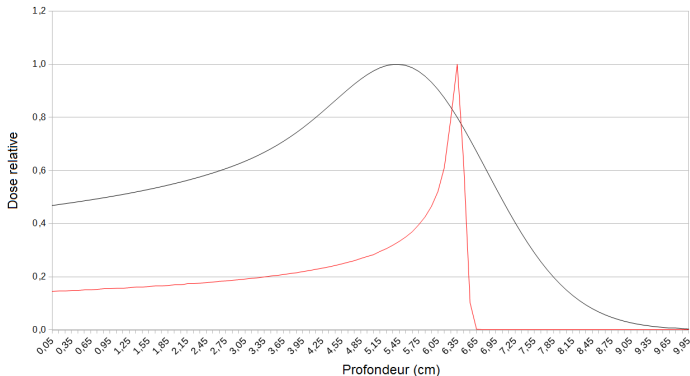
- Pouvoir d'arrêt :

$$S(\epsilon) = \int_{\epsilon_{min}}^{\epsilon} \epsilon' \sigma(\epsilon, \epsilon') d\epsilon'$$

- Dose déposée :

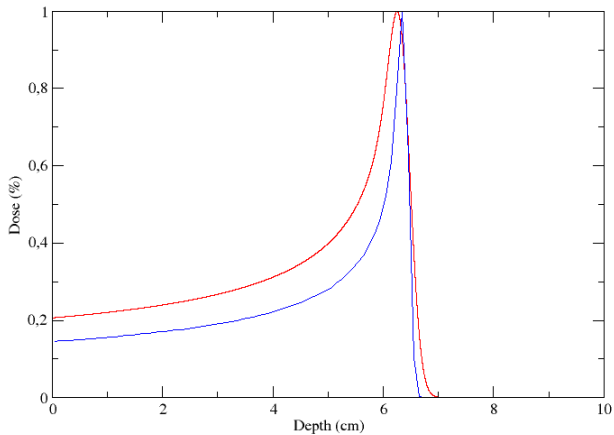
$$D(r) = \frac{T}{\rho(r)} \int_0^{\infty} S(r, \epsilon) \psi_0(r, \epsilon) d\epsilon$$

Dose déposée



Dose relative calculée avec le pouvoir d'arrêt de référence (noir), dose calculée par code MC-Geant4 (rouge). Énergie des protons : 90 MeV.

Un effet de maillage...



... et deux populations liées

$$\begin{aligned}
 \operatorname{div}_x \psi_{H^+}(x, \epsilon, \Omega) &= \int_{S^2} \int_{\epsilon}^{\infty} \sigma_{H^+, \text{ioniz}}(\epsilon', \epsilon, \Omega \cdot \Omega') \psi_{H^+}(x, \epsilon', \Omega') d\epsilon' d\Omega' \\
 &- \int_{S^2} \int_0^{\epsilon} \sigma_{H^+, \text{ioniz}}(\epsilon, \epsilon', \Omega \cdot \Omega') d\epsilon' d\Omega' \psi_{H^+}(x, \epsilon, \Omega) \\
 &+ \int_{S^2} \int_{\epsilon}^{\infty} \sigma_{H^+, \text{exc}}(\epsilon', \epsilon, \Omega \cdot \Omega') \psi_{H^+}(x, \epsilon', \Omega') d\epsilon' d\Omega' \\
 &- \int_{S^2} \int_0^{\epsilon} \sigma_{H^+, \text{exc}}(\epsilon, \epsilon', \Omega \cdot \Omega') d\epsilon' d\Omega' \psi_{H^+}(x, \epsilon, \Omega) \\
 &- \int_{S^2} \int_0^{\epsilon} \sigma_{H^+, \text{capt}}(\epsilon, \epsilon', \Omega \cdot \Omega') d\epsilon' d\Omega' \psi_{H^+}(x, \epsilon, \Omega) \\
 &+ \int_{S^2} \int_{\epsilon}^{\infty} \sigma_{H^+, \text{perte}}(\epsilon', \epsilon, \Omega \cdot \Omega') \psi_{H^+}(x, \epsilon', \Omega') d\epsilon' d\Omega'
 \end{aligned}$$

... et deux populations liées

$$\begin{aligned}
 \operatorname{div}_x \psi_{H^+}^{i+1}(x, \epsilon) = & \int_{\epsilon}^{\infty} \left(\sigma_{H^+, \text{ioniz}}^i(\epsilon', \epsilon) + \sigma_{H^+, \text{exc}}^i(\epsilon', \epsilon) \right) \psi_{H^+}^i(\epsilon') d\epsilon' \\
 & - \left(\sigma_{T, H^+, \text{ioniz}}(\epsilon) + \sigma_{T, H^+, \text{exc}}(\epsilon) + \sigma_{T, H^+, \text{capt}}(\epsilon) \right) \psi_{H^+}^i(\epsilon) \\
 & + \int_{\epsilon}^{\infty} \sigma_{H, \text{perte}}^i(\epsilon', \epsilon) \psi_H^i(\epsilon') d\epsilon'
 \end{aligned}$$

Plan

- 1 Modèle Mn
- 2 Sections efficaces
- 3 Résultats
- 4 Conclusion et perspectives

Conclusion

- résolution de l'EBL, moyennée sur les angles
- relation de fermeture basée sur la minimisation de l'entropie
- sections efficaces *ab initio* mises en groupe, sous les conditions de réalisabilité
- le pouvoir d'arrêt permet le calcul de dose
- couplage entre populations

Perspectives

- amélioration des calculs
- calculs 3D
- nouvelles particules : He^+ , C^+ ... \rightarrow processus supplémentaires ; nouveaux milieux
- amélioration du schéma numérique

Facteur d'anisotropie

$$|\alpha| = \frac{|\psi_1^i|}{\psi_0^i} = \frac{1 - |a_1| \coth(|a_1|)}{|a_1|}$$

- $\alpha \rightarrow 0$: émission isotrope
- $\alpha \rightarrow 1$: faisceau collimaté