

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

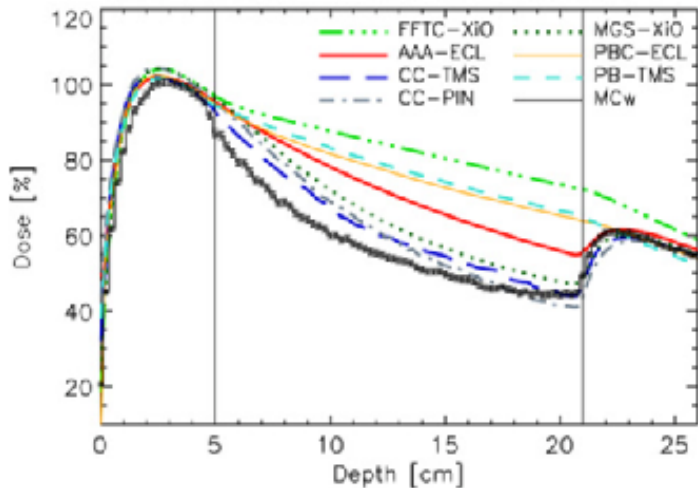
Directeurs de thèse : T. Nguyen-Bui, C. Champion

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

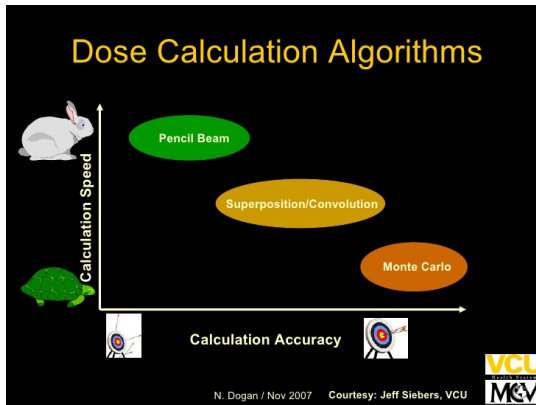


Introduction

- 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 \rightarrow 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 \rightarrow 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)

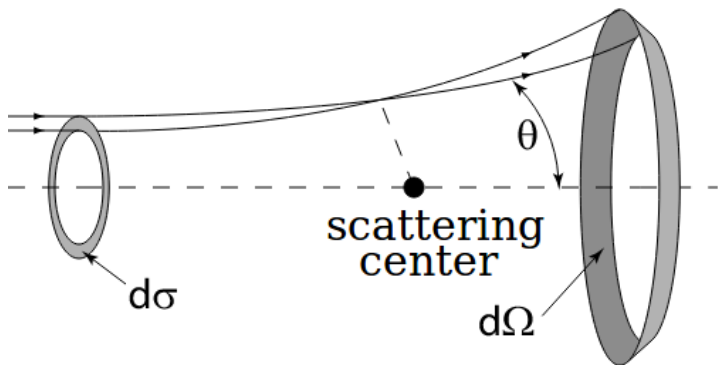
$$\psi_0^i = 4\pi a_0 \frac{\sinh(|a_1|)}{|a_1|}$$

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

Plan

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

Considérations générales

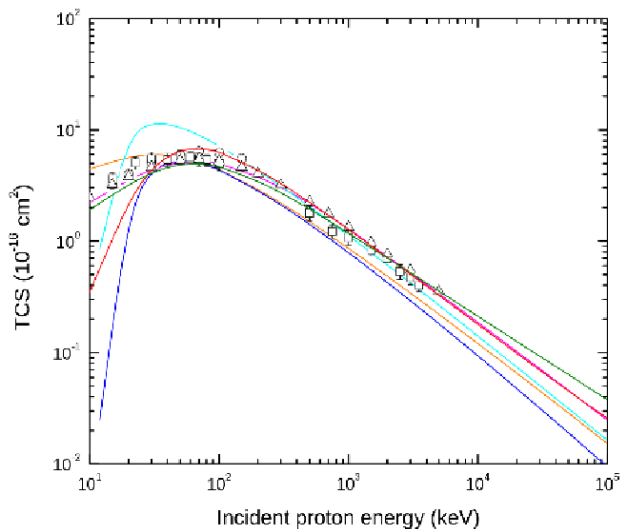


Sections efficaces *ab initio*

- calcul quantique
- modèle CDW-EIS
- données tabulées

3.000E+01	1.00000000E-01	8.000E+00	9.27911899E-12	8.50799144E-05	4.85113040E-04	1.60040204E-03	1.64744085E-03	3.82150051E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	1.000E+00	9.27897442E-12	8.50907153E-05	4.85093209E-04	1.60031092E-03	1.64776917E-03	3.82127155E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	2.000E+00	9.27873071E-12	8.50989747E-05	4.85031647E-04	1.60009378E-03	1.64817323E-03	3.82120458E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	3.000E+00	9.27781853E-12	8.51227508E-05	4.84931300E-04	1.67949942E-03	1.65935022E-03	3.82329971E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	4.000E+00	9.27679771E-12	8.51463150E-05	4.84730907E-04	1.67876523E-03	1.65157945E-03	3.82436364E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	5.000E+00	9.27548467E-12	8.51727374E-05	4.84648090E-04	1.67787016E-03	1.65145954E-03	3.82623596E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	6.000E+00	9.27388765E-12	8.52021569E-05	4.84530000E-04	1.67675613E-03	1.65087522E-03	3.82825697E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	7.000E+00	9.27208108E-12	8.52452176E-05	4.84413105E-04	1.67544508E-03	1.65111759E-03	3.83092970E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	8.000E+00	9.26991792E-12	8.5193176E-05	4.83816388E-04	1.67394515E-03	1.65078073E-03	3.83388384E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	9.000E+00	9.26743732E-12	8.51817656E-05	4.83593531E-04	1.67274051E-03	1.65117708E-03	3.83708979E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	1.000E+01	9.26461102E-12	8.52011838E-05	4.83148928E-04	1.67031079E-03	1.67928232E-03	3.84086741E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	1.200E+01	9.26159028E-12	8.52272934E-05	4.82756090E-04	1.66831001E-03	1.65389548E-03	3.844647935E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	1.300E+01	9.25827451E-12	8.52574804E-05	4.82382232E-04	1.66607374E-03	1.65911091E-03	3.84940247E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	1.400E+01	9.25468322E-12	8.52903079E-05	4.81937074E-04	1.66368467E-03	1.66993121E-03	3.85522229E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	1.600E+01	9.25088181E-12	8.53228543E-05	4.81418229E-04	1.66088078E-03	1.67994554E-03	3.86295684E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	1.800E+01	9.24693294E-12	8.53624099E-05	4.80818075E-04	1.65831626E-03	1.71826908E-03	3.86844357E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	2.000E+01	9.24222368E-12	8.54017451E-05	4.80237081E-04	1.65544878E-03	1.72776908E-03	3.87633954E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	1.700E+01	9.23752840E-12	8.53590150E-05	3.99698904E-04	1.65241577E-03	1.73787523E-03	3.87651018E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	1.800E+01	9.23254381E-12	8.53699460E-05	3.99698715E-04	1.65011974E-03	1.74849444E-03	3.88139396E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	1.900E+01	9.22737893E-12	8.53862290E-05	3.99688003E-04	1.64859561E-03	1.75964083E-03	3.89142230E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	2.000E+01	9.22178939E-12	8.54028292E-05	3.99674571E-04	1.64824636E-03	1.77129912E-03	3.89745256E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	2.100E+01	9.21601377E-12	8.54204648E-05	3.97471515E-04	1.64686366E-03	1.78345619E-03	3.90129059E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	2.200E+01	9.20997374E-12	8.53574293E-05	3.96488996E-04	1.65351909E-03	1.79489537E-03	3.91389389E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	2.300E+01	9.20367956E-12	8.53062300E-05	3.95781845E-04	1.65113162E-03	1.80952007E-03	3.92140064E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	2.400E+01	9.19712758E-12	8.48809120E-05	3.95071632E-04	1.62741638E-03	1.82775421E-03	3.93868251E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	2.500E+01	9.19032388E-12	8.45186404E-05	3.94346632E-04	1.62331796E-03	1.83673796E-03	3.95882625E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	2.600E+01	9.18328398E-12	8.42145181E-05	3.93987121E-04	1.61924242E-03	1.85135186E-03	3.98213593E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	2.700E+01	9.17598882E-12	8.39124496E-05	3.93817158E-04	1.61504607E-03	1.86519123E-03	3.95772098E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	2.800E+01	9.16842802E-12	8.36048154E-05	3.93709780E-04	1.61074909E-03	1.88539706E-03	3.90251286E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	2.900E+01	9.16004765E-12	8.32923789E-05	3.93712403E-04	1.60631492E-03	1.90851709E-03	3.87754516E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	3.000E+01	9.15189155E-12	8.29787458E-05	3.93682821E-04	1.60181844E-03	1.93129628E-03	3.80871148E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	3.100E+01	9.14438458E-12	8.26558838E-05	3.89751495E-04	1.59751468E-03	1.95821297E-03	3.59829324E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	3.200E+01	9.13691286E-12	8.23315104E-05	3.88997201E-04	1.59374053E-03	1.98492464E-03	3.40897876E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	3.300E+01	9.12941861E-12	8.20054960E-05	3.88152744E-04	1.58997046E-03	1.95157573E-03	3.41982297E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	3.400E+01	9.12183099E-12	8.16876672E-05	3.87537296E-04	1.58534101E-03	1.97845260E-03	3.40866775E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	3.500E+01	9.11404777E-12	8.13977807E-05	3.86562811E-04	1.57914672E-03	1.99515216E-03	3.41190108E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	3.600E+01	9.09981174E-12	8.10139520E-05	3.85733809E-04	1.57289451E-03	1.98217682E-03	3.453319812E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	3.700E+01	9.08790000E-12	8.06647487E-05	3.84809497E-04	1.56600768E-03	1.98067803E-03	3.45613291E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	3.800E+01	9.08051899E-12	8.03374538E-05	3.84013691E-04	1.55938237E-03	1.94764722E-03	3.478787075E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	3.900E+01	9.07590288E-12	8.00238386E-05	3.83289999E-04	1.552868878E-03	1.925688788E-03	3.49190989E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	4.000E+01	9.06406882E-12	7.96941015E-05	3.82335539E-04	1.55740516E-03	1.92085388E-03	3.49984349E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	4.100E+01	9.05181881E-12	7.93662956E-05	3.81492735E-04	1.54882484E-03	1.90818862E-03	3.49898482E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	4.200E+01	9.03907112E-12	7.90412299E-05	3.80613618E-04	1.54023480E-03	1.91213381E-03	3.49223391E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	4.300E+01	9.02601996E-12	7.87184515E-05	3.79731515E-04	1.53282489E-03	1.91747493E-03	3.48123468E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	4.400E+01	9.01318165E-12	7.84028187E-05	3.78818810E-04	1.52529476E-03	1.92436136E-03	3.46913266E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	4.500E+01	9.00178161E-12	7.80926188E-05	3.77927201E-04	1.51761603E-03	1.92764464E-03	3.45141076E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	4.600E+01	8.99151908E-12	7.77978289E-05	3.77029201E-04	1.51000000E-03	1.92229776E-03	3.43118764E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	4.700E+01	8.98273121E-12	7.74924218E-05	3.76084245E-04	1.50265544E-03	1.92084927E-03	3.41757938E-03
3.000E+01	1.00000000E-01	4.800E+01	8.97327610E-12	7.71958808E-05	3.75097004E-04	1.511218129E-03	1.92289921E-03	3.418551693E-03

Comparaison modèle-expérience (ionisation)



Réalisabilité

Le k -ième moment de σ est donné par :

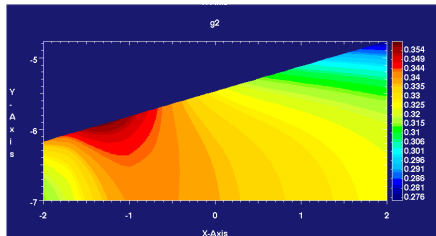
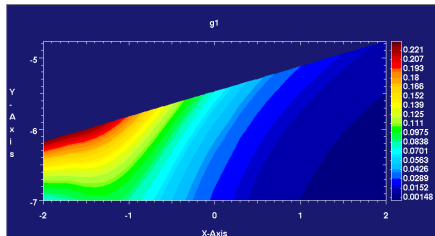
$$\sigma_k = 2\pi \int_{-1}^1 \sigma(\epsilon, \epsilon', \mu) \mu^k d\mu$$

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 *réalisabilité* :

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

Réalabilité



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.

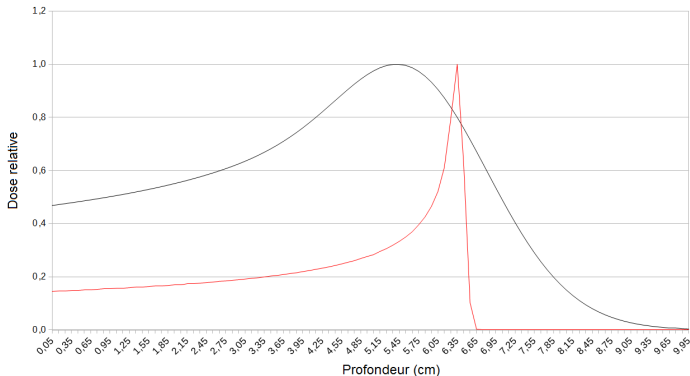
- Pouvoir d'arrêt :

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

- Dose déposée :

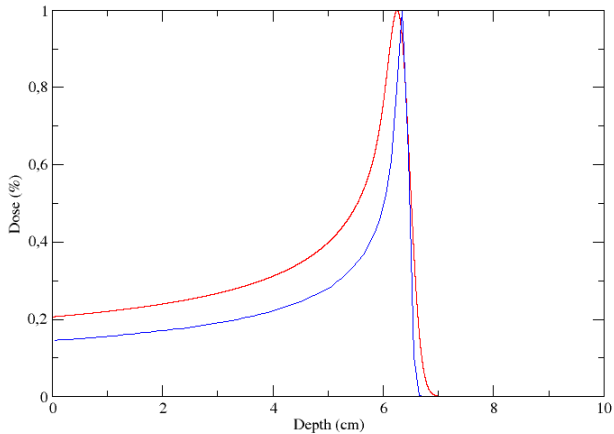
$$D(r) = \frac{T}{\rho(r)} \int_0^{\infty} S(r, \epsilon) \psi_0(r, \epsilon) d\epsilon$$

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

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

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