U.PORTO
FACULDADE DE CIÊNCIAS
UNIVERSIDADE DO PORTO

Mestrado em Física Médica
DFA
Faculdade de Ciências
Universidade do Porto

Métodos Numéricos em Física Médica
6ª aula

Pedro Teles
ppteles@fc.up.pt
Porto, 22 de Março de 2021

O João compilou numa base de dados as doses efectivas em todos os procedimentos de TC do tórax realizado num centro de radiologia ao longo de 20 anos *(assuma que o procedimento segue um protocolo que define quanto este valor deve ser).*

Qual o intervalo de valores onde vou encontrar 95% dos resultados?

→ Distribuição de Gauss

VI. Distribuição de Gauss.

- A distribuição de Gauss ou distribuição normal é uma distribuição para variáveis ***contínuas***.
- A distribuição de Gauss tem uma enorme importância em ciência devido ao **teorema do limite central**
- O teorema do limite central diz-nos que para números suficientemente grandes, i.e., quando o tamanho da nossa amostra $N \rightarrow \infty$, os valores das variáveis são descritos por distribuições normais.
- A distribuição gaussiana pode ser obtida como um caso limite da distribuição de Poisson em que $\lambda \gg 1$, e os valores de k podem assumir-se como estando distribuídos em torno de um valor central, tal que $k=\lambda+\delta$ ($\delta \ll \pm 1$) – (ver vídeo).
- As distribuições normais possuem propriedades muito interessantes, que permitem determinar onde ficará uma determinada % dos valores (ex: 68% encontram-se dentro do intervalo $[\mu - 1\sigma, \mu + 1\sigma]$, 95% encontram-se no intervalo $[\mu - 2\sigma, \mu + 2\sigma]$,99,7% no intervalo $[\mu - 3\sigma, \mu + 3\sigma]$....

$$P(x, \mu, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{\mu - x}{\sigma}\right)^2}$$

VII. Distribuição Gauss.

Distribuição (pdf)	$P(x,\mu,\sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{\mu-x}{\sigma}\right)^2}$
Cumulativa (cdf)	$cdf(k,n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \int_{-\infty}^{x} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{\mu-x}{\sigma}\right)^2} dx$
média	μ
mediana	μ
variância	σ^2
desvio padrão	σ

pdf= probability density function
cdf = cumulative distribution function

python

VIII. Distribuição cumulativa da Gaussiana.

$$cdf(k,n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\int_{-\infty}^{x} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{\mu-x}{\sigma}\right)^2} dx$$ → Esta função não tem solução analítica

Nós já tínhamos visto isto!!

Integração usando método numérico

Na verdade é possível demonstrar analiticamente que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}$$

Ou seja podemos normalizar tudo a 1 e reescrever usando uma transformação de variável $x' = \frac{1}{\sqrt{2}}x$:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2}z^2} dz = 1$$

Gaussiana com $\mu = 0$ e $\sigma = 1$, mas posso transformar sempre qualquer Gaussiana nesta forma usando $\boxed{z}= \frac{x-\mu}{\sigma}, dx = \frac{1}{\sigma}dx$

A área debaixo da curva é constante...

VIII. Valores z ou valores padrão.

- Conhecendo os valores z, é possível determinar a posição da variável x em função do valor médio μ e do desvio padrão σ.

Exemplo: Uma determinada distribuição tem $\mu = 2{,}3$ e $\sigma = 3{,}1$. Em que posição se encontram os pontos 1,2;2,4;5,3 ?

- $z_1 = \frac{1{,}2-2{,}3}{3{,}1} \cong -0{,}36 \rightarrow$ encontra-se a 0,36 desvios-padrão do valor médio para a esquerda.
- $z_2 = \frac{2{,}4-2{,}3}{3{,}1} \cong 0{,}03 \rightarrow$ encontra-se a 0,03 desvios padrões do valor médio para a direita.
- $z_3 = \frac{5{,}3-2{,}3}{3{,}1} \cong 0{,}64 \rightarrow$ encontra-se a 0,64 desvios padrões do valor médio.

Mas por exemplo, nós conhecemos alguns destes valores (regra dos 68–95–99.7):

- A 1 desvio padrão para a esquerda sabemos que estamos a 50−68/2=16% da distribuição
- A 2 desvios padrões para a direita sabemos que estamos a 50+95/2=97,5% da distribuição.

Como generalizar?

VIII. Distribuição cumulativa da Gaussiana.

Pelo exposto, a função cdf é frequentemente dada em função de z.

Ver pyhton

- É comum encontrar em livros de estatística tabelas com estes valores para z.
- Não esquecer que cdf(−z)=1−cdf(z), mas é comum dar os valores para z e −z
- http://www.z-table.com/

Para $z < 0$:

z	.00	.01	.02	.03	.04	.05	.06	.07	.08	.09
−3.4	.0003	.0003	.0003	.0003	.0003	.0003	.0003	.0003	.0003	.0002
−3.3	.0005	.0005	.0005	.0004	.0004	.0004	.0004	.0004	.0004	.0003
−3.2	.0007	.0007	.0006	.0006	.0006	.0006	.0006	.0005	.0005	.0005
−3.1	.0010	.0009	.0009	.0009	.0008	.0008	.0008	.0008	.0007	.0007
−3.0	.0013	.0013	.0013	.0012	.0012	.0011	.0011	.0011	.0010	.0010
−2.9	.0019	.0018	.0018	.0017	.0016	.0016	.0015	.0015	.0014	.0014
−2.8	.0026	.0025	.0024	.0023	.0023	.0022	.0021	.0021	.0020	.0019
−2.7	.0035	.0034	.0033	.0032	.0031	.0030	.0029	.0028	.0027	.0026
−2.6	.0047	.0045	.0044	.0043	.0041	.0040	.0039	.0038	.0037	.0036
−2.5	.0062	.0060	.0059	.0057	.0055	.0054	.0052	.0051	.0049	.0048
−2.4	.0082	.0080	.0078	.0075	.0073	.0071	.0069	.0068	.0066	.0064
−2.3	.0107	.0104	.0102	.0099	.0096	.0094	.0091	.0089	.0087	.0084
−2.2	.0139	.0136	.0132	.0129	.0125	.0122	.0119	.0116	.0113	.0110
−2.1	.0179	.0174	.0170	.0166	.0162	.0158	.0154	.0150	.0146	.0143
−2.0	.0228	.0222	.0217	.0212	.0207	.0202	.0197	.0192	.0188	.0183
−1.9	.0287	.0281	.0274	.0268	.0262	.0256	.0250	.0244	.0239	.0233
−1.8	.0359	.0351	.0344	.0336	.0329	.0322	.0314	.0307	.0301	.0294
−1.7	.0446	.0436	.0427	.0418	.0409	.0401	.0392	.0384	.0375	.0367
−1.6	.0548	.0537	.0526	.0516	.0505	.0495	.0485	.0475	.0465	.0455
−1.5	.0668	.0655	.0643	.0630	.0618	.0606	.0594	.0582	.0571	.0559
−1.4	.0808	.0793	.0778	.0764	.0749	.0735	.0721	.0708	.0694	.0681
−1.3	.0968	.0951	.0934	.0918	.0901	.0885	.0869	.0853	.0838	.0823
−1.2	.1151	.1131	.1112	.1093	.1075	.1056	.1038	.1020	.1003	.0985
−1.1	.1357	.1335	.1314	.1292	.1271	.1251	.1230	.1210	.1190	.1170
−1.0	.1587	.1562	.1539	.1515	.1492	.1469	.1446	.1423	.1401	.1379
−0.9	.1841	.1814	.1788	.1762	.1736	.1711	.1685	.1660	.1635	.1611
−0.8	.2119	.2090	.2061	.2033	.2005	.1977	.1949	.1922	.1894	.1867
−0.7	.2420	.2389	.2358	.2327	.2296	.2266	.2236	.2206	.2177	.2148
−0.6	.2743	.2709	.2676	.2643	.2611	.2578	.2546	.2514	.2483	.2451
−0.5	.3085	.3050	.3015	.2981	.2946	.2912	.2877	.2843	.2810	.2776
−0.4	.3446	.3409	.3372	.3336	.3300	.3264	.3228	.3192	.3156	.3121
−0.3	.3821	.3783	.3745	.3707	.3669	.3632	.3594	.3557	.3520	.3483
−0.2	.4207	.4168	.4129	.4090	.4052	.4013	.3974	.3936	.3897	.3859
−0.1	.4602	.4562	.4522	.4483	.4443	.4404	.4364	.4325	.4286	.4247
−0.0	.5000	.4960	.4920	.4880	.4840	.4801	.4761	.4721	.4681	.4641

Para $z > 0$:

z	.00	.01	.02	.03	.04	.05	.06	.07	.08	.09
0.0	.5000	.5040	.5080	.5120	.5160	.5199	.5239	.5279	.5319	.5359
0.1	.5398	.5438	.5478	.5517	.5557	.5596	.5636	.5675	.5714	.5753
0.2	.5793	.5832	.5871	.5910	.5948	.5987	.6026	.6064	.6103	.6141
0.3	.6179	.6217	.6255	.6293	.6331	.6368	.6406	.6443	.6480	.6517
0.4	.6554	.6591	.6628	.6664	.6700	.6736	.6772	.6808	.6844	.6879
0.5	.6915	.6950	.6985	.7019	.7054	.7088	.7123	.7157	.7190	.7224
0.6	.7257	.7291	.7324	.7357	.7389	.7422	.7454	.7486	.7517	.7549
0.7	.7580	.7611	.7642	.7673	.7704	.7734	.7764	.7794	.7823	.7852
0.8	.7881	.7910	.7939	.7967	.7995	.8023	.8051	.8078	.8106	.8133
0.9	.8159	.8186	.8212	.8238	.8264	.8289	.8315	.8340	.8365	.8389
1.0	.8413	.8438	.8461	.8485	.8508	.8531	.8554	.8577	.8599	.8621
1.1	.8643	.8665	.8686	.8708	.8729	.8749	.8770	.8790	.8810	.8830
1.2	.8849	.8869	.8888	.8907	.8925	.8944	.8962	.8980	.8997	.9015
1.3	.9032	.9049	.9066	.9082	.9099	.9115	.9131	.9147	.9162	.9177
1.4	.9192	.9207	.9222	.9236	.9251	.9265	.9279	.9292	.9306	.9319
1.5	.9332	.9345	.9357	.9370	.9382	.9394	.9406	.9418	.9429	.9441
1.6	.9452	.9463	.9474	.9484	.9495	.9505	.9515	.9525	.9535	.9545
1.7	.9554	.9564	.9573	.9582	.9591	.9599	.9608	.9616	.9625	.9633
1.8	.9641	.9649	.9656	.9664	.9671	.9678	.9686	.9693	.9699	.9706
1.9	.9713	.9719	.9726	.9732	.9738	.9744	.9750	.9756	.9761	.9767
2.0	.9772	.9778	.9783	.9788	.9793	.9798	.9803	.9808	.9812	.9817
2.1	.9821	.9826	.9830	.9834	.9838	.9842	.9846	.9850	.9854	.9857
2.2	.9861	.9864	.9868	.9871	.9875	.9878	.9881	.9884	.9887	.9890
2.3	.9893	.9896	.9898	.9901	.9904	.9906	.9909	.9911	.9913	.9916
2.4	.9918	.9920	.9922	.9925	.9927	.9929	.9931	.9932	.9934	.9936
2.5	.9938	.9940	.9941	.9943	.9945	.9946	.9948	.9949	.9951	.9952
2.6	.9953	.9955	.9956	.9957	.9959	.9960	.9961	.9962	.9963	.9964
2.7	.9965	.9966	.9967	.9968	.9969	.9970	.9971	.9972	.9973	.9974
2.8	.9974	.9975	.9976	.9977	.9977	.9978	.9979	.9979	.9980	.9981
2.9	.9981	.9982	.9982	.9983	.9984	.9984	.9985	.9985	.9986	.9986
3.0	.9987	.9987	.9987	.9988	.9988	.9989	.9989	.9989	.9990	.9990
3.1	.9990	.9991	.9991	.9991	.9992	.9992	.9992	.9992	.9993	.9993
3.2	.9993	.9993	.9994	.9994	.9994	.9994	.9994	.9995	.9995	.9995
3.3	.9995	.9995	.9995	.9996	.9996	.9996	.9996	.9996	.9996	.9997
3.4	.9997	.9997	.9997	.9997	.9997	.9997	.9997	.9997	.9997	.9998

Na verdade, a função cumulativa cdf(x) está relacionada com a erf(x) que nós integramos na primeira aula.

$$cdf(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{x} e^{-\frac{1}{2}x^2} dx$$

$$\mathrm{erf}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-x}^{x} e^{-x^2} dx$$

$$cdf(x) = \frac{1}{2}\left(1 + \mathrm{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{2}}\right)\right)$$

Torna-se assim fácil de determinar os intervalos nos quais encontraremos X% dos valores, correspondendo a z desvios padrões. Este valor é simplesmente e generalizando para z diferentes $cdf(z_1) - cdf(z_2)$, com $z_1 > z_2$. No caso em que $z_1 = -z_2$ podemos escrever: $cdf(z) - cdf(-z) = cdf(z) - 1 + cdf(z) = 2cdf(z) - 1$

Exemplos:

- Considere-se uma gaussiana com valor médio $\mu = 3{,}5$ e desvio padrão $\sigma = 1{,}2$. Determinar a percentagem de valores que encontramos entre 2,3 e 4,7.

    - $z_1 = \frac{2{,}3-3{,}5}{1{,}2} = -1 \rightarrow$ encontra-se a 1 desvios-padrão do valor médio para a esquerda.
    - $z_2 = \frac{4{,}7-3{,}5}{1{,}2} = +1 \rightarrow$ encontra-se a 1 desvios-padrão do valor médio para a direita.
    - Da tabela, encontramos o valor de cdf(z+)=0,8413 e o cdf(z-)=0,1587, então a percentagem de valores é: 0,6826~68% cqd.

- Considere-se uma gaussiana com valor médio $\mu = 3{,}5$ e desvio padrão $\sigma = 1{,}2$. Determinar a percentagem de valores que encontramos entre 3,2 e 3,7.

    - $z_1 = \frac{3{,}2-3{,}5}{1{,}2} = -0{,}3 \rightarrow$ encontra-se a 0,3 desvios padrões do valor médio para a esquerda.
    - $z_2 = \frac{4{,}7-3{,}5}{1{,}2} = +1 \rightarrow$ encontra-se a 1 desvios padrões do valor médio para a direita.
    - Da tabela, encontramos o valor de cdf(z1)=0,8413 e o cdf(z2)=0,3821, então a percentagem de valores é: 0,4592~46% cqd.

VIII. Algumas propriedades adicionais da Gaussiana.

- "regra empírica" ou "regra dos 68-95-99.7". 68% está a um desvio padrão, 95% a dois, e 99,7% a três.

- Sejam X_1 e X_2 duas variáveis aleatórias que obedecem a uma distribuição gaussiana, com $\mu = 0$ e desvio padrão $\sigma = 1$:
  - $X_1 + X_2$ também obedece a uma distribuição gaussiana com $\mu = 0$ e desvio padrão $\sigma = \sqrt{2}$

- Sejam X_1, X_2, ... , X_n 'n' variáveis aleatórias que obedecem a uma distribuição gaussiana,
  - A sua média é independente do desvio-padrão.
  - A soma dos seus quadrados obedece à distribuição χ^2-> muito usado em estatística inferencial...

IX. Resumo da parte de estatística descritiva.

- Tipos de variáveis (nominais, ordinais, numéricas contínuas ou discretas);
- Frequências, frequências acumuladas, relativas, e relativas acumuladas;
- Tipos de gráficos (pie chart, gráfico de barras, histogramas);
- Valores sumário em estatística;
- Medidas de tendência central – média, moda, mediana;
- Outras medidas de localização – os quantis: percentis, decis, quartis, etc..;
- Medidas de alcance: variância, desvio padrão.
- Incidência vs prevalência;
- Distribuições;
- Binomial e exemplos;
- Poisson e exemplos;
- Gaussiana e exemplos;

Aplicações em :

- Python

Pergunta para reflexão: Como obter variáveis aleatórias usando um computador? Um computador pode gerar valores aleatórios?

MCNPX

Fontes

Title card ------------------------- primeira linha
CELL CARDS (linhas com a definição das células)
<linha em branco>
c SURFACE CARDS (linhas com a definição das superfícies)
<linha em branco>
c DATA CARDS
m.... (materiais) $ (ex:alumínio)
Sdef (source definition)
Sp.. (source probability..)
etc.
f (definição de tallies – grandezas a calcular)
<linha em branco>

As fontes de partículas são definidas na card "dados".
os quatro principais comandos associados à definição de fonte são:

- "SDEF" → define a fonte com todos os parâmetros
- "SIn" → para identificar cada um dos parâmetros "n" variáveis (n=1,2,3.....).
- "SPn" → define a distribuição de probabilidade de emissão da partícula para o parâmetro "n".
- "SBn" → bias (viés), serve para obrigar as partículas a um determinado comportamento.

Apenas pode ser corrido um tipo de partícula de cada vez.

SDEF PAR= VOL= POS= CEL= RAD=

Fontes

Formato geral:

```
SDEF PAR=X VOL=d1 POS=d2 CEL=d3 RAD=d4 ERG=d5 SUR=... VEC=... DIR=... EXT=.... WGT=.... EFF=... ......
SI1 ...
SP1 ....
SI2 ....
SP2 ...
SI3 ....
SP3 ....
SI4 ....
SP4 ...
SI5....
SP5...
......
```

- Só pode haver um sdef por problema
- PAR= (1 neutrões, 2 fotões, 3 electrões .....), NB: tem que corresponder ao comando “mode”
- Cada parâmetro variável é definido por “dn”, em que “n” é o número que o identifica
- Para cada “dn”, deve definir-se o “SIn” e o “SPn”

SDEF – variáveis

Table 2-1
Most common variables used for general source ("SDEF") specification

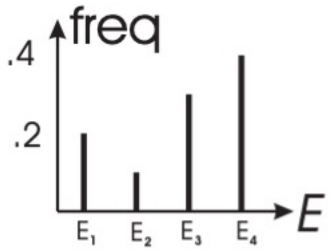
Variable	Meaning	Default
CEL	Cell	Determined from XXX, YYY, ZZZ and possibly UUU, VVV,
WWW		
SUR	Surface	Zero (means cell source)
ERG	Energy (MeV)	14 MeV
NRM	Sign of the surface normal	+1
POS	Reference point for position sampling	0,0,0
RAD	Radial distance of the position from POS or AXS	0
EXT	Cell case: distance from POS along AXS	0
	Surface case: cosine of angle from AXS	0
AXS	Reference vector for EXT and RAD	No direction
X	x-coordinate of position	No X
Y	y-coordinate of position	No Y
Z	z-coordinate of position	No Z
PAR	Particle type source will emit	1,n=neutron if MODE N, NP, or PE 2,p=photon if MODE P or PE 3,e=electron if MODE E 4,f=positron if MODE E
WGT	Particle weight	1

https://mcnp.lanl.gov/pdf_files/la-ur-07-4133.pdf

Exemplos de fontes pontuais

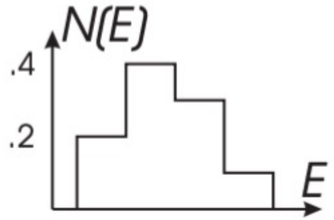
Fonte pontual isotrópica de fotões com energias discretas:

```
SDEF PAR=2 POS=X Y Z ERG=d1
SI1 L 1  1.5   2.  $ valor de cada energia
SP1  .4 .3 .3.  $ probabilidades de emissão
```



Fonte pontual isotrópica de fotões com energias com histograma:

```
SDEF PAR=2 POS=X Y Z ERG=d1
SI1  H 1  1.5   2.  $ valor de cada limite de histograma
SP1 D  .4 .3 .3.  $ frequências do histograma
```



Fonte pontual monoenergética (1.2 MeV) de electrões a emitir de três pontos diferentes:

```
SDEF PAR=3 POS=d1 ERG=1.2
SI1  L 0 0 -1  0 -1 0  0 0 -1  $ valor de cada limite de histograma
SP1 0.33 0.33 0.33 $ frequências do histograma
```

Exercícios 7, 8, e 9

PARTE 1:
Desenhar Três cilindros ao longo do eixo dos zzz com raios 3,6, 9 cm respectivamente, com a base em z=−5 e topo em z=5. O cilindro interior constituído por Ferro, o intermédio por Alumínio e o exterior por PMMA. Envolver tudo numa caixa de ar de dimensões 20x20x20 centrada na origem. Visualizar

PARTE 2:
Definir uma fonte de electrões pontual e isotrópica a emitir do ponto 0 0 0 com energias discretas 1.1 e 1.5 MeV com a mesma probabilidade. Correr o ficheiro com nps 1000 (usar print 110)

PARTE 3:
Substituir por uma fonte pontual e isotrópica de fotões a emitir dos pontos 0 0 −1 e 0 0 1 com um histograma de energias com limites dos bins
0 0.0001 2.5 5.0 7.5 10 12.5 15 17.5 20 e frequências de cada bin
0 0.1 0.2 0.4 0.8 1.0 0.7 0.5 0.2 0.1. Correr o ficheiro com nps 1000 (usar print 110)

Controlar o que é escrito no ficheiro de output

Output tables available

Table No.	Table Description	Table No.	Table Description
10	Source information	120	Importance function analysis
20	Weight windows information	126	Cell particle activity
30	Tally descriptions	128(*b*)	Universe map
35	Coincident detectors	130	Particle weight balances
40	Material compositions	140	Neutron/photon nuclide activity
50	Cell vols & masses; surface areas	150	DXTRAN diagnostics
60(*b*)	Cell importances	160(*d*)	TFC bin tally analysis
62(*b*)	Forced coll.; expon. transform	161(*d*)	$p(x)$ tally PDF plot
70	Surface coefficients	162(*d*)	Cumulative $p(x)$ plot
72(*b*)	Cell temperatures	170	Source frequency; surface source
85	Electron range & straggling	175	Estimated k_{eff} by cycle
90	KCODE source data	178	Estimated k_{eff} by batch size
98	Physics const.& compile options	180	WWG bookkeeping summary
100(*b*)	Cross section tables	190(*b*)	WWG summary
102	$S(\alpha, \beta)$ nuclide assignment	198	WW from multigroup fluxes
110	First 50 starting histories	200(*b*)	WW generated windows

(d) = default, (b) = basic