

Determinação semi-empírica do coeficiente de difusão do dosímetro Fricke Xilenol Gel através do Método de Diferenças Finitas

E. O. Nascimento; L. N. Oliveira

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás-IFG, 74055-110, Campus Goiânia-GO, Brasil

lucas@ifg.edu.br

(Recebido em 25 de abril de 2014; aceito em 15 de setembro de 2014)

As Equações Diferenciais Parciais (EDP's) podem modelar fenômenos da natureza, tais como aqueles estudados pela física, química e engenharia. Para essa classe de equações, as soluções analíticas são de difícil obtenção, por isso uma abordagem computacional é indicada. Nesse contexto, o Método das Diferenças Finitas (MDF), pode fornecer ferramentas úteis para a área de Física Médica. Neste trabalho, buscou-se descrever a implementação de uma malha computacional, com a finalidade de ser utilizada na determinação do Coeficiente de Difusão (CD) do dosímetro Fricke Xilenol Gel (FXG). As condições iniciais e de contorno, ambas referidas por fatores experimentais serão modeladas em MDF, fazendo dessa forma um estudo semi-empírico na determinação do CD. Em conjunto, o Método da Reflexão e Superposição (MRS) e a análise dos dados experimentais, serviram como primeira validação para a simulação. Essa interface de metodologias geraram resultados concordantes para uma faixa de erro de 3% em linhas de concentração para tempos pequenos quando comparado à solução analítica. O resultado para o CD foi de 0,43 mm²/h, sendo este valor, dentro do parâmetro estabelecido para géis dosimétricos: 0,3-2,0 mm²/h. Portanto, a aplicação de simulação computacional apoiada na metodologia MDF pode ser empregada na determinação do coeficiente de difusão no dosímetro FXG.

Palavras-chave: Diferenças finitas, Coeficiente de difusão, Simulação, Géis dosimétricos, Fricke Xilenol Gel.

Semi-empirical determination of the diffusion coefficient of the Fricke Xylenol Gel dosimeter through Finite Difference methods.

Partial Differential Equations (PDE) can model natural phenomena, such as related to physics, chemistry and engineering. For these classes of equations, analytical solutions are difficult to be obtained, so a computational approach is indicated. In this context, the Finite Difference Method (FDM) can provide useful tools for the field of Medical Physics. In this study, is described the implementation of a computational mesh, in order to be used in determining the Diffusion Coefficient (DC) of the Fricke Xylenol Gel dosimeter (FXG). The initial and boundary conditions both referred by experimental factors are modelled in FDM, thus making a semi-empirical study in determining the DC. Together, the method of Reflection and Superposition (SRM) and the analysis of experimental data, served as first validation for the simulation. Such methodologies interface generated concordant results for a range of error of 3% in concentration lines for small times when compared to the analytical solution. The result for the DC was 0.43 mm²/h. This value is in concordance with measures parameters range found in polymer gels dosimeters: 0.3-2.0 mm²/h. Therefore, the application of computer simulation methodology supported by the FDM may be used in determining the diffusion coefficient in FXG dosimeter.

Keywords: Finite difference, Diffusion coefficient, Simulation, Gel dosimeters, Fricke Xylenol Gel.

1. INTRODUÇÃO

O dosímetro Fricke Xilenol Gel (FXG) tem sido estudado durante os últimos anos [1], suas aplicações em Física Médica são importantes como: campos pequenos usados em radiocirurgia [2], braquiterapia [3], campos blindados utilizando cunhas físicas [4], fotoacústica [5], parâmetros dosimétricos [6] entre outros. Por ser um dosímetro químico fundamentado na oxidação de íons Fe⁺² em Fe⁺³, que após ser irradiado ou pela oxidação natural, a concentração dos íons férricos (Fe⁺³) é proporcional a dose absorvida. Um controle sobre a oxidação natural pode ser útil na utilização desde dosímetro, o qual pode ser realizado com a determinação do coeficiente de difusão [7]. Pesquisas para a determinação do coeficiente de difusão (CD) em géis dosimétricos podem ser vistos na literatura [8], os quais trazem métodos como Gaussiana e

Função Quadrática (ISQR) [9]. Vale ressaltar, que aplicações de métodos numéricos que tragam eficiência e condições de contorno apropriadas ao problema da difusão devem ser pesquisadas para a área de Física das Radiações. Dessa maneira, tem-se metodologias que podem ser empregadas computacionalmente na solução da difusão, como mencionados a seguir.

O Método das Diferenças Finitas (MDF) é um método numérico aplicado para se solucionar de maneira aproximada EDP's junto as suas condições, sejam elas de valor inicial, contorno ou mistas [10]. Este baseia-se na aproximação das derivadas de uma equação diferencial por um correspondente quociente de diferenças ou equações de diferenças divididas obtidas através do Teorema de Taylor para uma função dada [11]. A partir de condições iniciais definidas desenvolve-se a modelagem de uma malha no (MDF) que simulará a concentração do FXG na cubeta de ensaio.

O Método de Reflexão e Superposição (MRS) é uma técnica analítica de resolução de EDP's com condições de contorno estacionárias [12] assim a solução proveniente desse método é utilizada como a função interpoladora junto aos dados iniciais de oxidação do FXG objetivando-se a plotagem posterior para a validação da simulação numérica.

Neste trabalho, pela primeira vez, o método de Diferenças Finitas (MDF) é aplicado na determinação dos coeficientes de difusão do dosímetro FXG.

2. MATERIAIS E MÉTODOS

A difusão de íons de Fe^{+3} na solução Fricke Xylenol Gel (FXG) foi realizada numa cubeta com dimensões de $12,5 \times 12,5 \times 45,0 \text{ mm}^3$, irradiada com feixes de fótons de 6 MV LINAC (Siemens/Mevatron/6MD), com uma dose absorvida de 10 Gy, distância fonte superfície de 100 cm, tendo a metade do campo formado pelo colimador de $10 \times 10 \text{ cm}^2$ bloqueada, formando-se assim uma região irradiada e a outra não irradiada (Figura 1), a penumbra pode ser estudada com maiores detalhes principalmente nos parâmetros dosimétricos [6] e no coeficiente de difusão [9]. O gradiente formado na cubeta de FXG, devido a irradiação ionizante, foi medido num espectrofotômetro (Vary-Varian/Ultra-pec2100/79500) e a resposta obtida experimentalmente foi analisada com os métodos MDF e MRS, os quais foram implementados em simulação com intuito de determinar o coeficiente de difusão.

Para a análise, deve-se resolver a equação da difusão, a qual é regida pela Lei de Fick [13] no estado estacionário, levando-se em conta somente uma variável espacial, como apresentado a seguir:

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2} \quad (1)$$

As condições iniciais e de contorno desenvolvidas na simulação são apresentadas abaixo:

$$t = 0: \begin{cases} C = C_0 & \text{se } -h < x < 0 \\ C = 0 & \text{se } 0 < x < h \end{cases} \quad (2)$$

$$\frac{\partial C}{\partial x} = 0: \begin{cases} x = h \\ x = -h \end{cases} \quad (3)$$

em que C é a concentração em um ponto no espaço pertencente à cubeta, C_0 representa a concentração inicial da amostra que foi irradiada, h representa a metade do comprimento da cubeta, x indica a dimensão espacial e D o coeficiente de difusão.

Para a determinação do coeficiente de difusão da Eq.(1) utilizou-se os resultados obtidos das medições das absorvâncias do FXG e estes foram analisados num espaço tridimensional com um plano de solução bidimensional, ou seja, a solução estará em um plano que conterá a malha discreta que percorrerá o domínio $\partial\Omega$, o qual é representado como um plano no interior da cubeta.

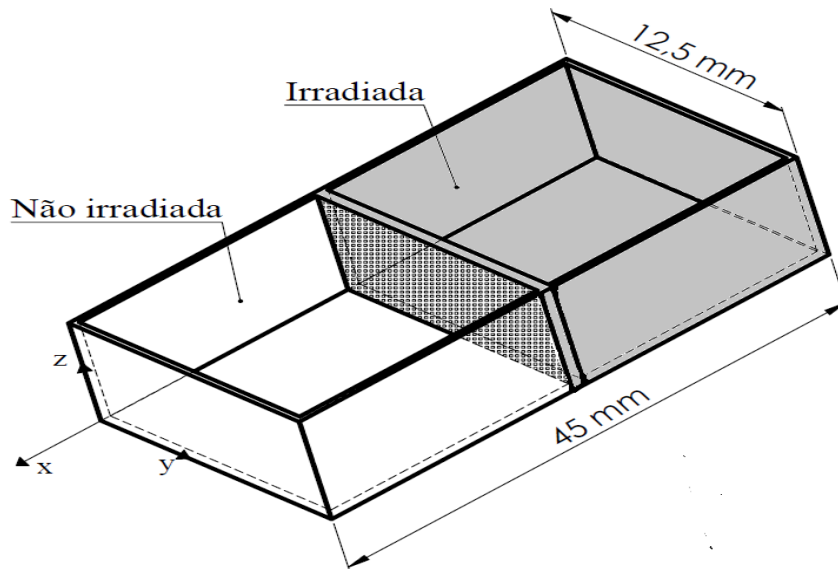


Figura 1: Modelo esquemático da cubeta contendo o dosímetro Fricke Xilenol Gel, com duas zonas distintas uma irradiada com fótons de 6 MV e a outra não.

Assim, com este formato desenvolvem-se algoritmos que maximizam o processo de aquisição de dados na cubeta irradiada, pois utiliza-se somente uma coordenada espacial. Se comparado à modelagem, que utiliza como parâmetros elementos de controle volumétricos ter-se-ia três coordenadas espaciais e uma temporal impossibilitando-se simplificações do modelo.

O MRS representa uma das técnicas analíticas [10], o qual é utilizado para se modelar os fenômenos de difusão em diferentes condições de contorno, com intuito de se obter uma provável solução ou expressão matemática representada na classe das EDP's, enquanto, o MDF é uma técnica numérica de simulação que tem como objetivo solucionar de maneira aproximada EDP's. Dessa maneira, o MDF depende de uma EDP para ser aplicado, ou seja, as duas metodologias inter-relacionadas são descritas abaixo:

Métodos Reflexão e Superposição (MRS)

Segundo Crank [12], pode-se aplicar em problemas de difusão, o Método da Reflexão e Superposição para solucionar a Eq (1). Para a aplicabilidade desse método há a necessidade de se encontrar um função que solucione a equação da Difusão, logo, diferenciando-se a Eq. (4), verifica-se que ela é uma solução da equação da Difusão ou seja da Eq. (1).

$$C(x, t) = \frac{A}{\sqrt{t}} \exp\left(-x^2/4Dt\right) \quad (4)$$

onde A é uma constante em $t = 0$, x representa a posição, D e t são o coeficiente de difusão e o tempo respectivamente. Pode-se, obter soluções com diferentes configurações de valores iniciais e de contorno partindo-se de uma função similar à Eq(4), portanto considera-se a seguinte distribuição inicial e de contorno como um plano semi-infinito [14]:

$$t = 0: \begin{cases} C = C_0 & \text{se } x < 0 \\ C = 0 & \text{se } x > 0 \end{cases} \quad (5)$$

$$\frac{\partial C}{\partial x}(x = +\infty, t) = 0 \quad (6)$$

A distribuição inicial de concentração pode ser simulada através de retas, pontos ou planos ao longo de $x > 0$, logo cada ponto contribuirá com um elemento infinitesimal para a difusão, assim o resultado será dado pela integração na reta x posicionada ao longo do comprimento da cubeta visualizado na Figura 2, tendo-se como origem do sistema o ponto central da cubeta. Deve-se constatar que dadas às condições iniciais Eq.(5) e de contorno Eq.(6) referem-se à situação física na qual o comprimento da cubeta foi modelado no infinito e para grandes distâncias da origem a taxa de difusão é desprezível.

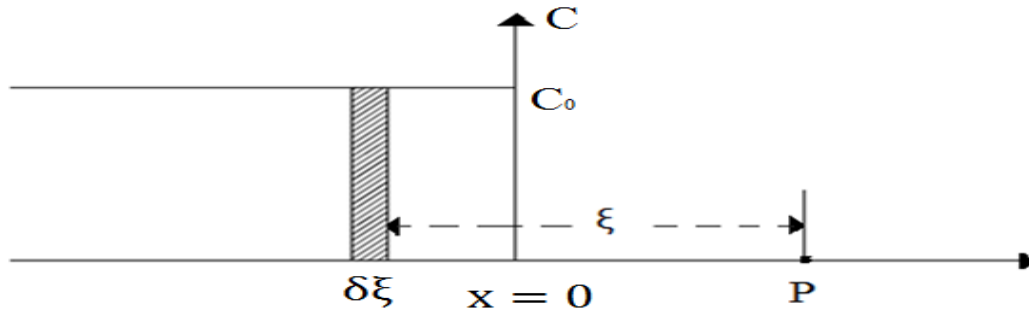


Figura 2 - Distribuição inicial de concentração do FXG para o sistema semi-infinito.

Portanto, considerando-se a contribuição para uma posição genérica da difusão do FXG num elemento diferencial, $c_0 d\xi$, com espessura de $d\xi$ e altura c_0 a uma distância ξ da distribuição inicial de concentração do FXG irradiado conforme [12], encontra-se a função similar a Eq.(4) sendo representada na forma da Eq.(7):

$$C_\xi(x, t) = \frac{c_0 d\xi}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp(-\xi^2 / 4Dt) \tag{7}$$

Esta pode ser interpretada, como a taxa de variação do fluxo difuso através da membrana em um determinado tempo e posição do elemento de controle planar [14], pertencente ao interior da cubeta. A solução corresponde a Eq.(7), referentes às condições impostas nas Eqs.(5) e (6) serão dadas pela integração ao longo do eixo x positivo, como apresentado a seguir:

$$C(x, t) = \frac{c_0}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_0^\infty \exp(-\xi^2 / 4Dt) d\xi \tag{8}$$

Na Figura 3, apresenta-se a interface entre o método numérico, solução analítica e por sua vez o aparato experimental que é obtido por meio direto onde cada abordagem se relaciona com as demais formando um conjunto solução para a simulação.

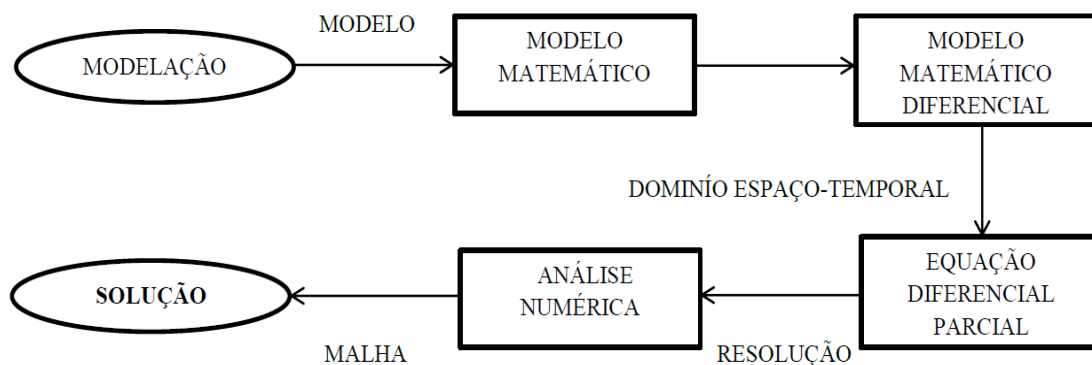


Figura 3: Estrutura hierárquica das relações entre as modelagens aplicadas no problema da difusão.

Segue o desenvolvimento para integrar a Eq.(8), aplica-se a mudança de variável:

$$\eta = \xi / 2\sqrt{Dt}, \quad d\eta = \frac{d\xi}{2\sqrt{Dt}}, \quad (9)$$

Integrando:

$$C(x,t) = \frac{C_0}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_0^\infty \exp(-\xi^2 / 4Dt) d\xi = \frac{C_0}{\sqrt{\pi}} \int_{x/2\sqrt{Dt}}^\infty \exp(-\eta^2) d\eta \quad (10)$$

pode-se calcular o valor da última integral com o auxílio da função erro de Gauss, definida da seguinte forma:

$$\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z \exp(-\eta^2) d\eta \quad (11)$$

Logo aplicando-se as seguintes propriedades dessa função:

$$\operatorname{erf}(-z) = -\operatorname{erf}(z), \quad \operatorname{erf}(0) = 0, \quad \operatorname{erf}(\infty) = 1, \quad (12)$$

Tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z \exp(-\eta^2) d\eta &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \exp(-\eta^2) d\eta - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z \exp(-\eta^2) d\eta \\ &= 1 - \operatorname{erf}(z) \Leftrightarrow \operatorname{erfc}(z) \end{aligned} \quad (13)$$

Na Eq.(10), aplica-se as propriedades acima, nota-se que a solução para as condições iniciais e de contorno como sendo uma placa semi-infinita, dado por:

$$C(x,t) = \frac{1}{2} C_0 \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) \quad (14)$$

Em sistemas de modelagem com dimensões finitas, podem-se aplicar as mesmas propriedades para a resolução da Eq.(1) como apresentado anteriormente com as condições das Eqs. (5) e (6), nota-se que os limites de integração da Eq.(13), devem ser alterados para as condições de contorno do novo domínio considerando-se um domínio unidimensional. A seguir apresenta-se a modelagem para sistemas finitos para a difusão ocorrendo no domínio de $-h < x < +h$ e com $\frac{\partial C}{\partial x} \neq 0$. Integrando a Eq.(13), nos limites de $x-h$ até $x+h$ obtém-se a seguinte expressão:

$$C(x,t) = \frac{1}{2} C_0 \left\{ \operatorname{erf}\left(\frac{h-x}{2\sqrt{Dt}}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{h+x}{2\sqrt{Dt}}\right) \right\} \quad (15)$$

Esse resultado aplica-se para uma solução confinada em uma região com dimensão finita, porém, com o fluxo de difusão ocorrendo através da fronteira ou através de uma membrana. Em domínios com condições de fronteira tais como:

$$t = 0: \begin{cases} C = C_0 & \text{se } -h < x < 0 \\ C = 0 & \text{se } 0 < x < h \end{cases} \quad (16)$$

$$\frac{\partial C}{\partial x} = 0: \begin{cases} x = h \\ x = -h \end{cases}$$

Nota-se que não ocorre difusão nos pontos extremos, que podem ser considerados como membranas não permeáveis ou como sendo a fronteira da cubeta um ente físico que não permite a difusão ocorrer, porém como há reflexão do fluxo de difusão na fronteira implica-se assim um estado de superposição para cada faixa de concentração. Logo, à medida que os estados de superposição vão ocorrendo no tempo, a concentração de determinada espécie altera-se da seguinte maneira como apresentado por [12]:

$$C(x,t) = \frac{1}{2} C_0 \left\{ \operatorname{erfc}\left(\frac{h-x}{2\sqrt{Dt}}\right) - \operatorname{erfc}\left(\frac{h+x}{2\sqrt{Dt}}\right) + \operatorname{erfc}\left(\frac{2l-h-x}{2\sqrt{Dt}}\right) - \operatorname{erfc}\left(\frac{2l+h-x}{2\sqrt{Dt}}\right) + \operatorname{erfc}\left(\frac{2l-h+x}{2\sqrt{Dt}}\right) - \operatorname{erfc}\left(\frac{2l+h+x}{2\sqrt{Dt}}\right) - \operatorname{erfc}\left(\frac{4l-h-x}{2\sqrt{Dt}}\right) - \operatorname{erfc}\left(\frac{4l-h+x}{2\sqrt{Dt}}\right) + \dots \right\} \quad (17)$$

$$= \frac{1}{2} C_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left\{ \operatorname{erf}\left(\frac{h+2nl-x}{2\sqrt{Dt}}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{h-2nl+x}{2\sqrt{Dt}}\right) \right\}. \quad (18)$$

Essa ultima expressão apresentada será utilizada como a solução analítica da Eq. (1), adequando-se com as condições de fronteira e de valores iniciais apresentadas nas Eqs. (2) e (3). Para obter-se o coeficiente de difusão do FXG, através de solução analítica da Lei de Fick solucionada pelo Método da Reflexão e Superposição adota-se a técnica de interpolação [15] por meio da Eq.(18). Com os dados experimentais da concentração da solução provenientes do espectrofotômetro, realiza-se por fim, a simulação computacional desenvolvida em ambiente de programação Matlab©.

Método de Diferenças Finitas (MDF)

A equação da difusão é uma Equação Diferencial Parcial (EDP) linear de segunda ordem, nessa simulação considera-se a EDP com coeficientes constantes. Inicia-se, de um modelo simplificado sem perda de generalidade, considerando-se as condições de contorno e de valor inicial apresentadas, para Neumann e Dirichlet [16], a solução geral da Eq.(1) no caso unidimensional é:

$$C(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{2}{L} \int_0^L f(\xi) \sin\left(\frac{\pi n}{L} \xi\right) d\xi \sin\left(\frac{\pi n}{L} x\right) \exp\left(-D \left(\frac{\pi n}{L}\right)^2 t\right) \right) \quad (19)$$

Pela solução geral analítica, nota-se a presença de uma soma infinita com termos trigonométricos, logo mesmo que exista uma solução, tem-se que garantir sua estabilidade e convergência via método numérico. A seguir apresenta-se a metodologia aplicada que discute esses pontos.

Utiliza-se o MDF, no modelo totalmente explícito com a discretização por diferenças avançadas no tempo e centradas no espaço *Forward-Time Central-Space* (FTCS) também conhecido como *Explicit Forward Euler Method* (EFEM) [17]. A estratégia será de organizar a malha em um cenário onde se garanta a convergência, consistência e tão logo a estabilidade da solução que determinará o coeficiente de difusão do FXG. Resolve-se a EDP numericamente tornando os seguintes domínios de x e t discretos com suas respectivas variações $-h \leq x \leq h$ e $0 \leq t \leq T$. Discretiza-se o domínio do tempo com o passo de $\Delta t = T/m$ e no espaço com o passo de $\Delta x = 2h/(n+1)$, toma-se $t_k = k\Delta t$ onde $0 \leq k \leq m$ e $x_j = j\Delta x$ onde $0 \leq j \leq n+1$. Defina-se a equivalência de notação $U_j^k = U(x_j, t_k)$ para denotar as derivadas parciais da Eq.(1) em termos das aproximações [18]:

$$\frac{\partial U(x_j, t_k)}{\partial t} = \frac{U_j^{k+1} - U_j^k}{\Delta t} + O(\Delta t^2) \quad (20)$$

$$\frac{\partial^2 U(x_j, t_k)}{\partial x^2} = \frac{U_{j+1}^k - 2U_j^k + U_{j-1}^k}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2) \quad (21)$$

procede-se a substituição dessas aproximações na Eq.(1) e desprezando-se os termos de ordem superior obtém-se a Equação Diferencial Parcial Discreta equivalente que será dado por:

$$\frac{U_j^{k+1} - U_j^k}{\Delta t} = \frac{D}{\Delta x^2} (U_{j+1}^k - 2U_j^k + U_{j-1}^k), \quad (22)$$

ou

$$U_j^{k+1} = s(U_{j+1}^k + U_{j-1}^k) + (1 - 2s)U_j^k \quad \text{onde } s = \frac{D \cdot \Delta t}{\Delta x^2} \quad (23)$$

A relação acima mostra que dados os valores de U , que é resultado da aplicação de um ponto do domínio interno na Eq.(1), em um determinado instante de tempo, dado “ k ”, é possível obter os valores de U para o instante “ $k+1$ ”. Consequentemente, desenvolve-se o esquema para a implementação numérica, ressalta-se que todas as suposições desenvolvidas sobre condições de contorno e de valor inicial são as mesmas apresentadas para o método analítico, porém deve-se observar as particularidades de cada tipo de condição de contorno seja ela de Dirichlet ou Neumann [16], quando aplicadas em uma simulação numérica. A seguir apresenta-se, os parâmetros numéricos para cada caso das condições desenvolvidas para a obtenção do coeficiente de difusão do FXG.

Condição inicial:

$$U_j = f(x_j) = U(x, t = 0) \quad (24)$$

Condição de Contorno de Dirichlet:

$$x = 0: U(x, t = 0) = U_0^k = g(t_k) \quad (25)$$

Condição de Contorno de Neumann:

$$\begin{aligned} x = h: \partial U(h, t) / \partial x &= \partial U_{n+1}^k / \partial x = g_2(t_k) \\ x = -h: \partial U(-h, t) / \partial x &= \partial U_{n+1}^k / \partial x = g_2(t_k) \end{aligned} \quad (26)$$

Para simular as condições de Neumann utiliza-se o modelo proposto por [18], no qual se adiciona uma etapa extra na forma de:

$$\frac{\partial^2 U_{j+1}^k}{\partial x^2} = \frac{U_{j+1}^k - U_j^k}{\Delta x} = g_2(t_k) \Rightarrow U_{j+1}^k = \Delta x g_2(t_k) + U_j^k, \quad (27)$$

Pode-se, formar a matriz-sistema que resolverá o vetor concentração do FXG, no perfil da pesquisa. Supondo-se que se modele a solução da Eq.(1), em grid, com cinco “pontos” na dimensão espacial obtêm-se um vetor “ $n+1$ ” como no exemplo a seguir para $n=3$ tem-se o vetor equivalente $\vec{v} = \{x_0, x_1, x_2, x_3, x_{4=n+1} = a\}$. Nesse caso o vetor concentração será representado em uma forma matricial utilizando como base a expressão apresentada na Eq.(23). Sendo por exemplo, para $n=3$ a matriz fica representada na Eq.(28). Por continuidade, as condições de contorno $U_0^k = g_1(t_k)$ e $U_4^k = g_2(t_k) + U_3^k$ são acopladas na Eq.(28) que provê o resultado na forma matricial $U^{k+1} = A \cdot U^k + b$ abaixo:

$$U^{k+1} = \begin{pmatrix} U_1^{k+1} \\ U_2^{k+1} \\ U_3^{k+1} \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1-2s & s & 0 \\ s & 1-2s & s \\ 0 & s & \underbrace{1-2s}_{\text{Condição de Neumann}} \end{pmatrix}}_A \begin{pmatrix} U_1^k \\ U_2^k \\ U_3^k \end{pmatrix} + \underbrace{\begin{pmatrix} \overbrace{s \cdot g_1(t_k)}^{\text{Condição de Dirichlet}} \\ 0 \\ \underbrace{s \cdot \Delta g_2(t_k)}_{\text{Condição de Neumann}} \end{pmatrix}}_b \quad (28)$$

Essa última forma matricial desenvolvida, utiliza uma malha com iterações, porém com o aumento da malha, a matriz A da Eq.(28) torna-se a forma genérica da Eq.(29), ou seja, para as condições de contorno já desenvolvidas previamente.

$$A = \begin{bmatrix} 1-2s & s & 0 & \dots & 0 \\ s & 1-2s & s & \ddots & \vdots \\ 0 & s & \ddots & s & 0 \\ \vdots & \ddots & s & 1-2s & s \\ 0 & \dots & 0 & s & 1-2s \end{bmatrix} \quad (29)$$

Em simulação com Diferenças Finitas a estabilidade convergência e consistência [17], são analisadas no parâmetro “s” introduzido na Eq.(23), também denominado em alguns casos como número de Courant [19], que utiliza como base a técnica da Análise de Fourier da convergência e o Princípio do Máximo [20]. Utilizou-se nesse trabalho como critério de estabilidade e convergência, que $s \leq 1/2$.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Na Figura 4, é apresentado a interpolação, onde os dados da concentração estão dispostos em função do comprimento lateral da cubeta. Logo, o valor obtido para o coeficiente de difusão foi de $D=0,43 \pm (0,017) \text{ mm}^2/\text{h}$, resultando em $s=0,43$, esse por sua vez satisfaz a condição necessária para a estabilidade e convergência. Na obtenção do valor numérico de Courant utiliza-se a solução analítica que interpolará uma curva para estimar o CD através dos dados provenientes do arranjo experimental. Desenvolve-se a simulação numérica até 2000 iterações e caso o sistema não atinja estabilidade ou convirja para um estado estacionário, antes desse número de iterações, supõe-se ter ocorrido erros de truncamento ou arredondamento que independente do número de Courant, fará o sistema oscilar e nunca convergirá para a solução, esse ponto deve ser considerado ao realizar a simulação para encontrar o CD para o FXG.

Na Figura 5, são mostrados os resultados das implementações os quais contém a evolução temporal do sistema. Para este resultado, montou-se a malha para a solução numérica sobre seguintes parâmetros numéricos e físicos: 20 x 20 pontos de controle cobrindo metade do domínio da cubeta no caso a parte não irradiada que possui as dimensões $6,25 \times 22,5 \text{ mm}^2$ no plano xOy e as iterações com passo temporal $\Delta t= 0,1 \text{ s}$ e passo espacial $\Delta x = 0,1 \text{ mm}$ além das condições de contorno e de valor inicial. Dada a importância, na determinação do coeficiente de difusão para géis dosimétricos, executa-se a simulação no esquema das diferenças finitas no modelo FTCS para solucionar a EDP que rege a difusão no caso homogêneo Eq.(1).

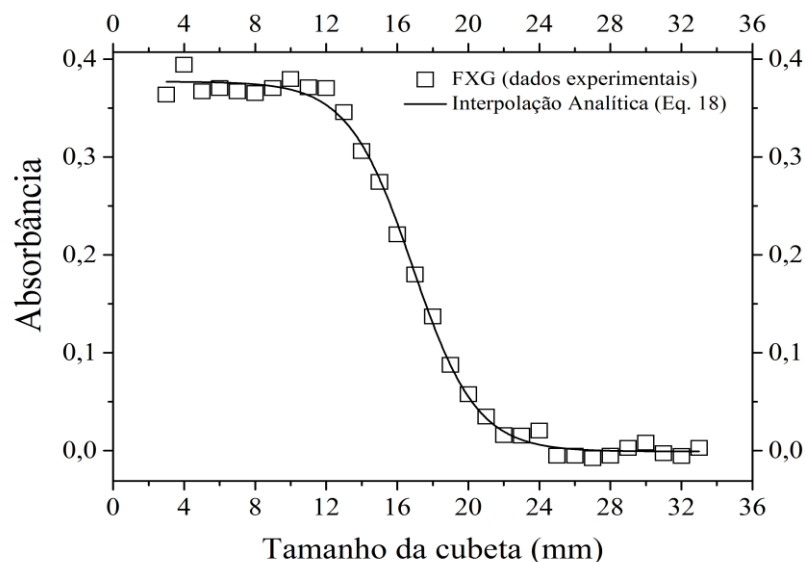


Figura 4: Representação da Interpolação via Eq.(18) para $x > 0$, essa interpolação fornece os dados sobre a condição inicial do sistema em estudo para posterior implementação no código fonte da simulação numérica.

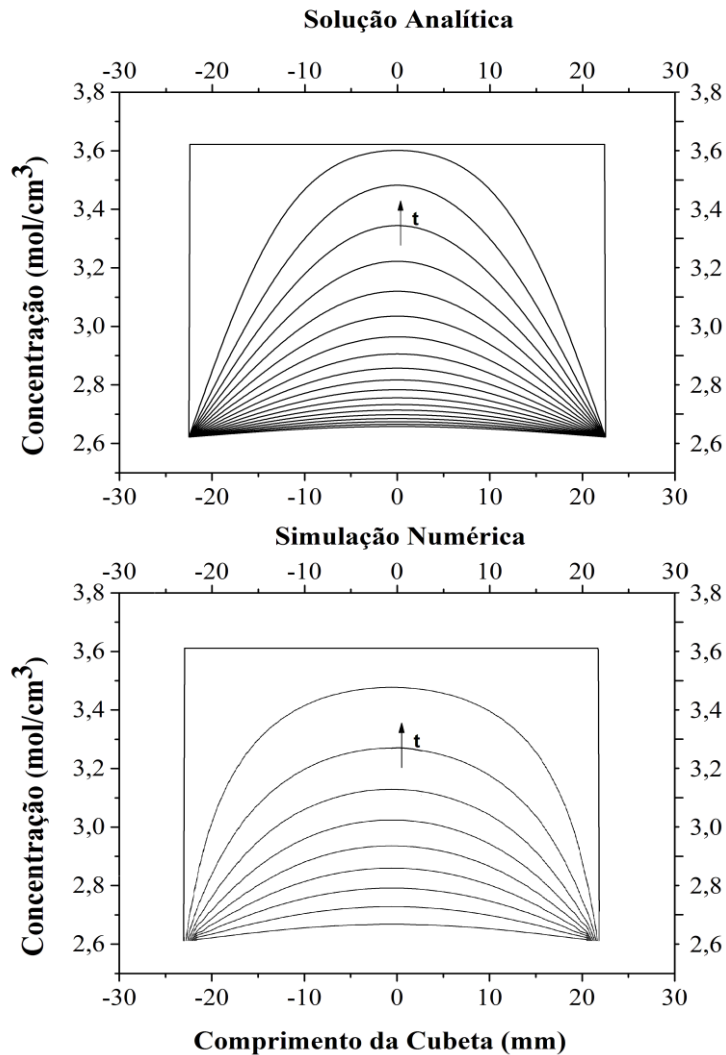


Figura 5: Concentração ao longo do comprimento no eixo “x” posicionado conforme mostrado na (Figura 1), nos gráficos é possível visualizar as faixas de concentração para determinados tempos, essa configuração foi obtida pela solução analítica e com a simulação após a solução irradiada interagir com não irradiada.

Com os dados obtidos na simulação é possível constatar que para tempos iniciais as linhas de evolução temporal apresentam concordância acentuada, verifica-se nesse ponto erros médios percentuais de cerca de 3% para uma mesma linha. Porém para tempos cada vez maiores nota-se em cada curva temporal uma grande distorção do valor referido sobre a solução analítica (Figura 5). Como apresentado, erros de truncamento podem comprometer a acurácia dos valores numéricos obtidos, mesmo pequenas flutuações algébricas alteram profundamente o resultado final. Ainda visto que para a simulação utilizou-se como um elemento auxiliar a solução analítica para fornecer os parâmetros de configuração inicial esses que por sua vez dependem dos resultados providos pelo arranjo experimental.

As metodologias apresentadas referem-se há uma modelagem para EDP's do tipo parabólico com uma variável espacial e uma variável temporal, assim a simulação numérica foi desenvolvida num cenário explícito, o que gera maior eficiência computacional em termos de velocidade de processamento e nas análises de erros que são relativamente simples se comparadas a outras discretizações de EDP's, pois utiliza-se o Princípio do Máximo ou a Análise de Fourier para uma EDP linear [20]. Logo garantindo estabilidade, convergência e consistência para a simulação [17], porém essa discretização por diferenças finitas explícitas oferece vantagem somente para geometrias bem comportadas, como retângulos. Em condições

de contorno mais generalistas, no caso em curvas acentuadas, esse método é laborioso [10], prejudicando a implementação computacional.

4. CONCLUSÃO

Conclui-se que o valor obtido pela simulação, para o coeficiente de difusão no gel dosimétrico Fricke está de acordo com os resultados obtidos para géis dosimétricos entre 0,3-2,0 mm²/h, conforme Kron [21], o que sugere que a aplicação de métodos de simulação podem ser aplicados na determinação de coeficientes de difusão.

5. AGRADECIMENTOS

Ao CNPq e a FAPEG pelo apoio financeiro.

-
1. Bero MA, Gilboy WB, Glover PM, Keddie JL. Three-dimensional radiation dose measurements with Ferrous Benzoic Acid Xylenol Orange in Gelatin gel and optical absorption tomography. *Nucl. Instr. Meth. Phys. B.* 1999; 422:617-620.
 2. Oliveira LN, Calcina CSG, Parada MA, Almeida CE, Almeida A. Ferrous Xylenol Gel Measurements for 6 and 10 MV Photons in Small Fiel Sizes. *Braz. J. Phys.* 2007; 27:1141-1146.
 3. Alva-Sánchez MS, Oliveira LN, Petchevist PC, Moreira MV, Almeida A. Beta planar source quality assurance with the Fricke xylenol gel dosimeter. *Radiat. Phys. Chem.* 2014; 96:56-59.
 4. Oliveira LN, Calcina CSG, Parada MA, Almeida CE, Almeida A. 6 MV Wedge Photon Beam Profiles with the Fricke Xylenol Gel Dosimeter. *Braz. J. Phys.* 2009; 39:615-618.
 5. Caldeira AMF, De Almeida A, Neto AM, Baesso M, Bento AC, Silva MA. Fricke Xylenol Gel characterization using a photoacoustic technique. *Nucl. Instr. Meth. Phys. A.* 2007; 582:484-488.
 6. Calcina CSG, Oliveira LN, Almeida CE, Almeida A. Dosimetric parameters for small field sizes using Fricke xylenol gel, thermoluminescent, film dosimeters and an ionization chamber. *Phys. Med. Biol.* 2007; 52:1431-1439.
 7. Davies JB, Bosi SG, Baldock C. Dosimetry aspects of a non-diffusing genipin–gelatin gel. *Radiat. Phys. Chem.* 2013; 83:19-27.
 8. Maeyama T, Fukunishi N, Ishikawa KL, Furuta T, Fukasaku K, Takagi S, Noda S, Himeno R, Fukuda S. A diffusion-free and linear-energy-transfer-independent nanocomposite Fricke gel dosimeter. *Radiat. Phys. Chem.* 2014; 96:92-96.
 9. Oliveira LN, Zimmerman RL, Moreira MV, Ila D, Almeida A. Determination of diffusion coefficient in Fricke Xylenol gel dosimeter after electron beam bombardment. *Surf. Coating. Tech.* 2009; 203:2367-2369.
 10. Iserles A. *First Course in the Numerical Analysis of Differential Equations.* 2.ed. New York:Cambridge University Press; 2009. 459 p.
 11. Ióri V. *EDP um curso de graduação “Coleção matemática universitária”.* 3.ed. Rio de Janeiro:IMPA; 2012. 275 p.
 12. Crank J. *The Mathematics of Diffusion.* 2.ed. Bristol,Inglaterra: Oxford University Press; 1975. 414 p.
 13. Feynman RP, Leighton R, Sands M. *Feynman Lectures on Physics.* Addison-Wesley Boston, 1994.
 14. Balluffi RW, Samuel MA, Craig WC. *Kinetics of Materials.* 1.ed. Hoboken,New Jersey:Wiley-Interscience; 2005. 645 p.
 15. Jaroslav Š, Václav Spěváček. New 3D radiochromic gel dosimeters with inhibited diffusion. *J. Phys.: Conf. Ser.* 2009; 164:123-125.
 16. Evans LC. *Partial Differential Equations, Vol.12: Graduate Studies in Mathematics.* Providence,Rhode Island:American Mathematical Society. 2010. 749 p.
 17. Morton KW, Mayers DF. *Numerical Solution of Partial Differential Equations.* 2.ed. New York:Cambridge University Press; 2005. 278 p.
 18. Olsen-Kettle L. *Numerical solution of partial differential equations Lectures book.* Australia:The University of Queensland,Earth Systems Science Computational Centre; 2005. 206 p.
 19. Courant R. *Methods of Mathematical Physics,Vol.2: Partial Differential Equations.* NewYork, Wiley-Interscience; 1962. 560 p.
 20. Vretblad A. *Fourier analysis and its applications. Graduate texts in Mathematics 223,* Springer; 2003. 279 p.

21. Kron TD, Jonas D, Pope JM. Fast T1 imaging of dual gel samples for diffusion measurements in NMR dosimetry gels. *Magn. Reson. Imaging.* 1997; 15:211-221.