

## Simulação 3D da Difusão de Íons Férricos em Dosímetros Fricke-Gel

**Caio Jacob Milani \***      **Joyce da Silva Bevilacqua**

Depto de Matemática Aplicada, IME-USP,  
05508-090, Cidade Universitária, São Paulo, SP  
E-mail: caio.milani@usp.br, joyce@ime.usp.br,

**Orlando Rodrigues Jr.**

Gerência de Metrologia das Radiações, IPEN-CNEN/SP  
05508-000, Cidade Universitária, São Paulo, SP  
E-mail: rodrivr@ipen.br.

### RESUMO

#### Introdução

O uso de dosímetros químicos para avaliação de doses absorvidas é uma técnica amplamente utilizada em Dosimetria das Radiações. Dosímetros compostos por soluções Fricke-Gel são obtidos a partir do dosímetro de Fricke, ao qual é adicionado um agente gelatinoso (gelatina, agarose, ágar-ágar) que podem ser moldados em diferentes geometrias apresentando equivalência ao tecido humano. Pela interação da solução com a radiação, os íons ferrosos ( $\text{Fe}^{2+}$ ) presentes no dosímetro são oxidados, formando íons férricos ( $\text{Fe}^{3+}$ ) numa quantidade proporcional à dose absorvida. Após a irradiação, a leitura pode ser feita por imagens de ressonância magnética [1].

Um dos problemas que aparecem na avaliação de doses por imagens de ressonância magnética é que os íons férricos podem se movimentar pela matriz de gel causando imprecisões nas estimativas de dose. Esta dinâmica é modelada por uma equação diferencial parcial parabólica e pode ser resolvida numericamente. Neste trabalho apresentamos a equação da difusão que modela este movimento e simulamos esta dinâmica em domínios tridimensionais utilizando o algoritmo de Douglas-Gunn [2].

#### Equação de Difusão

Pela segunda Lei de Fick, se em um meio existe um gradiente de concentração, forma-se um fluxo de difusão de mesma direção e sentido oposto ao gradiente que tende a homogeneizar o meio [3]. Definindo a concentração de íons férricos pela função  $C(t, \mathbf{x}): I \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$ ,  $I \subseteq \mathbb{R}$  o intervalo de tempo observado,  $I=[0, \tau]$ ,  $\Omega$  a região de interesse,  $D$  o coeficiente de difusão do meio, considerado constante,  $C(0, \mathbf{x})=\Omega_0$ , a distribuição inicial de íons férricos, e  $\vec{n}$  o versor normal unitário exterior à  $\partial\Omega$  e assumindo que não há fluxo através da fronteira de  $\Omega$ , a equação da difusão é dada por (1).

$$\frac{\partial C}{\partial t}(t, \mathbf{x}) = D \cdot \left( \sum_{k=1}^3 \frac{\partial^2 C}{\partial x_k^2}(t, \mathbf{x}) \right), \quad C(0, \mathbf{x}) = \Omega_0 \quad \text{e} \quad \frac{\partial C}{\partial \vec{n}}(t, \mathbf{x}) = 0 \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega \quad (1)$$

#### Simulações

Para a solução da equação (1), foi implementado o método de Douglas-Gunn (2), um método da família ADI (Alternate Direction Implicit Methods) que generaliza o método de Crank-Nicolson para domínios tridimensionais. Este método é incondicionalmente estável e possui ordem de convergência quadrática em ambos os passos, temporal e espacial [2]. Os sistemas lineares gerados a partir das equações do método são constituídos por matrizes tridiagonais e podem ser resolvidos diretamente aplicando a decomposição de Crout e substituição reversa. O coeficiente de difusão foi fixado em

\*bolsista de Mestrado CAPES

$D=0,018cm^3h^{-1}$  e foram realizadas simulações em dois casos distintos: um dosímetro cúbico homogêneo no primeiro caso e um dosímetro que apresenta uma barreira física no segundo caso.

$$\begin{aligned} \left(1 - \frac{r_x}{2} \delta_x^2\right) \Delta u^* &= (r_x \delta_x^2 + r_y \delta_y^2 + r_z \delta_z^2) u_{jkl}^n \text{ com } r_x = \frac{D \Delta t}{\Delta x^2}, r_y = \frac{D \Delta t}{\Delta y^2}, r_z = \frac{D \Delta t}{\Delta z^2} \\ \left(1 - \frac{r_y}{2} \delta_y^2\right) \Delta u^{**} &= \Delta u^* \\ \left(1 - \frac{r_z}{2} \delta_z^2\right) \Delta u &= \Delta u^{**}, \text{ sendo } \Delta u = u_{jkl}^{n+1} - u_{jkl}^n \end{aligned} \quad (2)$$

O método foi rodado em um computador com processador *intel core i5*, 2.4 GHz e 6 GB de memória RAM com precisão pré-definida de  $10^{-3}$ . Para alcançar esta precisão foi utilizada uma malha com  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0,0315$  e  $r_x = r_y = r_z = r = 0,00302$ . Como temos uma malha homogênea, a matriz gerada pelo método é armazenada e decomposta apenas uma vez.  $\Delta t$  é calculado a partir da equação (2) e caso  $\{\Delta t^2\} > \varepsilon$ , o passo temporal é redefinido. Menores valores de  $r$  garantem melhor precisão.

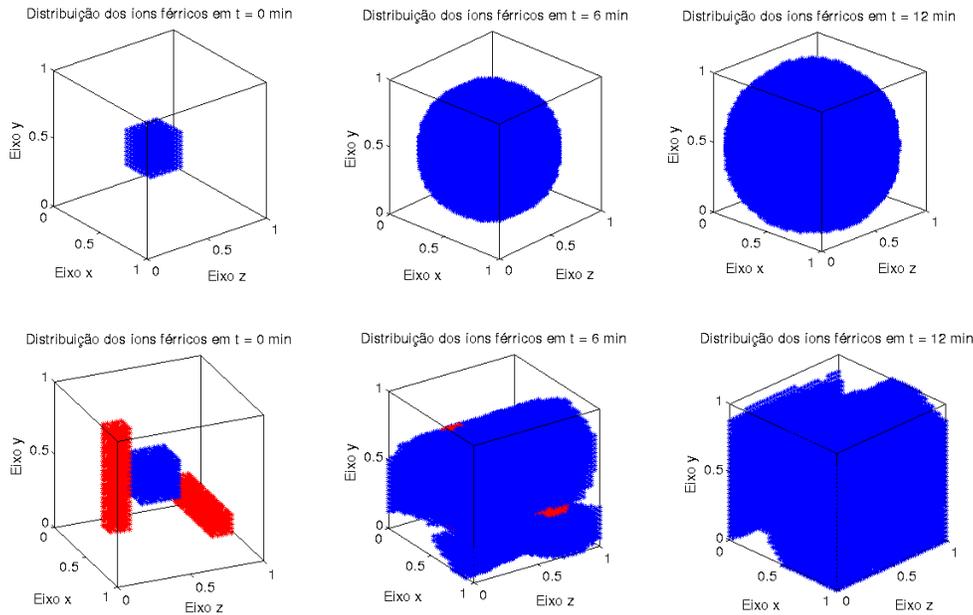


Figura 1: Imagens tridimensionais da difusão ao longo de 12 minutos

O método mostrou-se eficiente quanto ao armazenamento de matrizes e soluções dos sistemas lineares tridiagonais que são resolvidos para apresentar a solução numérica. Em trabalhos futuros, serão considerados coeficientes variáveis (com o tempo ou o espaço) e simulações numéricas em geometrias mais complexas que podem representar partes específicas do corpo humano (tais como simuladores antropomórficos [4]).

**Palavras-chave:** *Difusão, Dosimetria de Radiações, Equações Diferenciais Parciais, Métodos Numéricos*

## Referências

- [1] C. C. Cavinato, L. L. Campos, “Padronização do Método de Dosimetria Fricke-Gel e Avaliação Tridimensional de Dose Empregando a Técnica de Imageamento por Ressonância Magnética”, Dissertação de Mestrado - IPEN, 2009
- [2] J. W. Thomas, “Numerical Partial Differential Equations: Finite Difference Schemes” (texts in Applied Mathematics 22), 1st ed., Springer, New York, NY, USA (2010)
- [3] P. Barone e G. Sebastianini, Solving an Inverse Diffusion Problem for Magnetic Resonance Dosimetry by a Fast Regularization Method, *Real-Time Imaging*, vol. 7, pp. 21-29
- [4] [http://www.rsdphantoms.com/rt\\_art.htm](http://www.rsdphantoms.com/rt_art.htm) (acessado em 28/02/2014)