



Universidade Estadual de Maringá  
Centro de Ciências Exatas  
Departamento de Física

Trabalho de Conclusão de Curso

**Métodos computacionais e analíticos para solução  
do número de decaimentos nucleares em função do  
tempo**

Acadêmico: Mariana Ferrareze Casaroto

Orientador: Prof. Breno Ferraz de Oliveira

Maringá, 2018



Universidade Estadual de Maringá  
Centro de Ciências Exatas  
Departamento de Física

Trabalho de Conclusão de Curso

**Métodos computacionais e analíticos para solução  
do número de decaimentos nucleares em função do  
tempo**

Trabalho de Conclusão de Curso submetido à Universidade Estadual de Maringá, como parte dos pré-requisitos necessários para a obtenção do Grau de Bacharel em Física sob a orientação do Prof. Breno Ferraz de Oliveira.

Acadêmico: Mariana Ferrareze Casaroto

Orientador: Prof. Breno Ferraz de Oliveira

Maringá, 2018

# Sumário

<b>Lista de Figuras</b>	<b>1</b>
<b>Lista de Tabelas</b>	<b>3</b>
<b>Agradecimentos</b>	<b>3</b>
<b>Resumo</b>	<b>5</b>
<b>Introdução</b>	<b>6</b>
<b>1 Física Nuclear</b>	<b>8</b>
1.1 Composição do núcleo atômico . . . . .	8
1.2 Anti-matéria . . . . .	9
1.3 Radioatividade . . . . .	10
1.3.1 Decaimentos Radioativos . . . . .	12
<b>2 Método Analítico</b>	<b>17</b>
2.1 Método de fator integrante . . . . .	17
2.2 Problema do decaimento radioativo . . . . .	18
<b>3 Métodos de Cálculo Numérico</b>	<b>21</b>
3.1 Método de Runge-Kutta . . . . .	21
3.2 Método de Monte Carlo . . . . .	25
<b>4 Resultados</b>	<b>27</b>
<b>Considerações Finais</b>	<b>31</b>
<b>A Código em Linguagem C</b>	<b>32</b>
A.1 Método de Runge-Kutta . . . . .	32
A.2 Método de Monte Carlo . . . . .	34

# Lista de Figuras

1.1	Representação esquemática do modelo atômico de J. J. Thomson. As cargas negativas (em verde) estão distribuídas uniformemente pela esfera de carga positiva (em rosa).	8
1.2	Representação esquemática do modelo atômico de Rutherford. Os elétrons (em verde) estão orbitando o núcleo.	9
1.3	Mais de 3000 nuclídeos teoricamente previstos e catalogados de acordo com o decaimento radioativo que eles sofrem [1].	11
1.4	Representação do decaimento $\alpha$ . O núcleo pai excitado emite um núcleo de Hélio para diminuir sua energia, resultando em um núcleo filho mais estável e uma partícula alfa. Em rosa estão representados os prótons e em azul os nêutrons.	13
1.5	Representação do decaimento $\beta^-$ . O núcleo pai excitado emite um elétron e um anti-neutrino. Esse processo transforma um nêutron em um próton. Em rosa estão representados os prótons, em azul os nêutrons, em verde as partículas $\beta^-$ e em roxo os anti-neutrinos.	14
1.6	Representação do decaimento $\beta^+$ . O núcleo pai excitado emite um pósitron e um neutrino. Esse processo transforma um próton em um nêutron. Em rosa estão representados os prótons, em azul os nêutrons, em verde os neutrinos e em laranja as partículas $\beta^+$ .	15
1.7	Representação da captura eletrônica. O núcleo pai excitado captura um elétron e emite um neutrino. Esse processo transforma um próton em um nêutron. Em rosa estão representados os prótons, em azul os nêutrons, em verde os elétrons e em verde claro os neutrinos.	15
1.8	Representação do decaimento $\gamma$ . O núcleo excitado decai em um núcleo mais estável emitindo radiação $\gamma$ . Em rosa estão representados os prótons e em azul os nêutrons.	16
3.1	Representação esquemática do método de Euler. Na Figura $h$ é o passo no eixo $t$ , e $f(t_n, y_n)$ é a reta tangente à solução em vermelho.	22
3.2	Representação gráfica do método de Runge-Kutta após o primeiro passo intermediário. Em roxo está representada a solução da E.D.O. e em azul a reta tangente $k_1$ .	23
3.3	Representação gráfica do método de Runge-Kutta após o segundo intermediário. Em roxo está representada a solução da E.D.O. e em tom alaranjado a reta tangente $k_2$ .	23
3.4	Representação gráfica do método de Runge-Kutta após o terceiro passo intermediário. Em roxo está representada a solução da E.D.O., em tom alaranjado tracejado a reta tangente $k_2$ e em tom alaranjado contínuo a reta tangente $k_2$ transladada.	24

3.5	Representação gráfica do método de Runge-Kutta (a) após o terceiro passo intermediário, (b) após transladar a reta tangente $k_3$ , (c) após o passo final, (d) após transladar o passo final. . . . .	24
4.1	Mostra a dependência da densidade de átomos em função do tempo em segundos encontrada pelo método analítico. As condições iniciais utilizadas foram: $N_{Bi}(0) = 1000$ , $N_{Po}(0) = 500$ e $N_{Pb}(0) = 0$ . As constante de decaimento de cada espécie é $\omega_{Bi} = 5,776 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ e $\omega_{Po} = 2,093 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ . Gráfico confeccionado utilizando o <i>software Gnuplot</i> . . . . .	27
4.2	Mostra a dependência da densidade de átomos em função do tempo em segundos encontrada pelo método numérico de Runge-Kutta de 4ª ordem. As condições iniciais utilizadas foram: $N_{Bi}(0) = 1000$ , $N_{Po}(0) = 500$ e $N_{Pb}(0) = 0$ . O passo temporal utilizado no método foi $dt = 0.00001 \text{ s}$ . As constantes de decaimento de cada espécie são $\omega_{Bi} = 5,776 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ e $\omega_{Po} = 2,093 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ . Gráfico confeccionado utilizando o <i>software Gnuplot</i> . . . . .	28
4.3	Mostra a dependência da densidade de átomos em função do tempo em segundos encontrada pelo método numérico de Monte Carlo. As condições iniciais utilizadas foram: $N_{Bi}(0) = 100000$ , $N_{Po}(0) = 50000$ e $N_{Pb}(0) = 0$ . As constantes de decaimento de cada espécie são $\omega_{Bi} = 5,776 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ e $\omega_{Po} = 2,093 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ . Gráfico confeccionado utilizando o <i>software Gnuplot</i> . . . . .	29
4.4	Mostra a dependência da densidade de átomos em função do tempo em segundos encontrada pelos diferentes métodos. No gráfico os pontos com formato triangular representam o método de Monte Carlo, os de formato circular representam o método de Runge-Kutta e a linha contínua representa a solução analítica. As curvas com cores em tons de vermelho representam a densidade de Bismuto, as com cores em tons de azul representam a densidade de Polônio e as com cores em tons de verde representam a densidade de Chumbo. Gráfico confeccionado utilizando o <i>software Gnuplot</i> . . . . .	30

# Agradecimentos

À Universidade Estadual de Maringá pela oportunidade de fazer o curso e a todo o corpo docente que fez parte da minha vida acadêmica.

Ao meu orientador Breno Ferraz de Oliveira, pelo suporte no pouco tempo que lhe coube, pelas suas correções e incentivos, não só na realização deste trabalho mas também pelo suporte na jornada acadêmica e pelo conhecimento compartilhado dentro e fora de sala de aula.

Aos meus pais, Maria Angela Ferrareze Casaroto e Luis Antônio Casaroto, pelo amor, incentivo, apoio incondicional e por me dar oportunidade de me dedicar exclusivamente a minha formação. Agradeço também a todos os familiares que me apoiaram.

Meus agradecimentos aos meus amigos e companheiros de trabalho que fizeram parte da minha formação. Em especial, agradeço à Rebecca Domingues Sales Cândido pelo apoio emocional e por todo o carinho durante os momentos de tristeza e alegria deste último ano da graduação.

Agradeço também, as minhas amigas Ana Flávia Freitas, Isabela Papke, Juliana Kois, Letícia Mirelle Freitas, Letícia Cavallini e Maria Paula Schreiner, que desde o ensino fundamental fazem parte da minha vida e me incentivam todos os dias a alcançar meus objetivos.

A todos que direta ou indiretamente fizeram parte da minha formação, o meu muito obrigada.

# Resumo

Muitos dos princípios e leis da física que descrevem a natureza envolvem equações diferenciais. Muitas vezes, resolver essas equações diferenciais e encontrar uma solução analítica não é fácil. Fatores como esses fazem com que, a física computacional seja uma área da física que vem sendo muito utilizada. Por meio de métodos numéricos e computacionais, mesmo as equações mais complicadas, podem ser resolvidas de maneira relativamente simples. A equação diferencial estudada envolve radioatividade, em que o átomo de Bismuto ( $^{210}\text{Bi}$ ) sofre um decaimento  $\beta$  se transformando em um átomo de Polônio ( $^{210}\text{Po}$ ), o qual também sofre esse tipo de decaimento, transformando-se em um átomo de Chumbo ( $^{210}\text{Pb}$ ). O problema do decaimento radioativo consiste em encontrar o número de decaimentos nucleares em função do tempo. Assim, além do estudo sobre radioatividade, foi implementado o método numérico de Runge-Kutta de quarta ordem e o método de computacional de Monte Carlo por meio da linguagem C. Além dos métodos computacionais, foi encontrada uma solução analítica a fim de comparar todos os resultados obtidos pelos diferentes métodos.

**Palavras-chave:** radioatividade, decaimentos radioativos, métodos numéricos, física computacional.

# Introdução

O físico francês Henri Becquerel, no início de 1896 motivado pelas fotografias produzidas pelo físico alemão Wilhelm Conrad Röntgen, em 1895 após a descoberta dos raios X<sup>1</sup>, as quais revelavam os ossos no interior do corpo humano sem precisar abri-lo, testava a hipótese de que as substâncias fosforescentes<sup>2</sup> e fluorescentes<sup>3</sup> emitiriam raios X [2].

Becquerel colocou amostras de um minério de Urânio, que ao ser exposto à luz solar exibe fosforescência, em contato com uma chapa fotográfica. Essa chapa foi envolvida em duas folhas de papel preto grosso, o papel protegia a chapa de forma que se ela fosse deixada exposta o dia todo ao Sol não ficaria manchada. Essa configuração foi exposta ao Sol por várias horas e, ao se revelar a chapa, foi percebido a silhueta da substância sobre o negativo. Ele concluiu que a substância em questão emite radiações que penetram o papel opaco à luz. Becquerel pensava que essa radiação era a emissão de raios X [3].

Um certo dia, Becquerel estava fazendo o experimento novamente, mas devido à chuva da região que impediu a iluminação solar por vários dias, viu-se obrigado a guardar suas amostras em uma gaveta escura juntamente das chapas fotográficas virgens por vários dias, interrompendo a realização do experimento. Ao revelar as chapas fotográficas, Becquerel esperava encontrar imagens muito deficientes, mas ele encontrou silhuetas muito nítidas, ou seja, não era necessário o uso da luz para realizar o experimento, pois o Urânio emitia uma radiação que escurece as chapas fotográficas. Becquerel tinha descoberto a radioatividade [3].

Dois anos depois, Pierre e Marie Curie começaram a realizar estudos na área. Eles pesquisaram os “raios de Becquerel” em outros elementos, descobrindo o Polônio e o Rádium, introduzindo o termo *radioatividade*. As descobertas mostraram que essa radiação tinha origem nuclear, e não era a resultante da colisão de elétrons, como se pensava. Essas descobertas exigiram novas propostas de modelos atômicos, não podendo mais considerar os átomos indivisíveis [3].

Mais tarde, em 1900 Rutherford descobre que a taxa de emissão da radiação de uma substância não é constante, diminui exponencialmente com o tempo. Além disso, ele classifica os raios emitidos pelo núcleo radioativo de acordo com a habilidade de penetrar a matéria e ionizar o ar, sendo:  $\alpha$  a menos penetrante e a mais ionizante,  $\gamma$  a mais penetrante e menos ionizante, e  $\beta$  uma radiação intermediária entre as outras duas. Em seus experimentos, Rutherford também descobriu que as partículas  $\alpha$  são núcleos de Hélio, que as partículas  $\beta$  são elétrons e que os raios  $\gamma$  são ondas-eletromagnéticas com comprimento de onda bem pequeno. Os experimentos de Geiger e Marsden sobre o espalhamento da partícula alfa e o sucesso do modelo atômico de Bohr, levaram à visão moderna que temos do átomo: um núcleo pequeno e massivo com uma nuvem de elétrons em volta [4].

---

<sup>1</sup>Radiação eletromagnética de comprimento de onda da ordem de  $10^{-9}$  m (pouco menor que a radiação ultravioleta) resultante da colisão de elétrons produzidos em um cátodo aquecido contra elétrons de ânodo metálico. Todos os materiais são transparentes à esses raios até certo ponto, e essa transparência diminui com o aumento da densidade.

<sup>2</sup>Substâncias que absorvem energia da luz e emitem radiação visível mesmo após a fonte de energia ser cessada.

<sup>3</sup>Substâncias que absorvem energia da luz e emitem radiação visível até que seja fornecida energia.

Em 1928, a correta explicação para a radiação  $\alpha$  foi dada utilizando a mecânica quântica. Em 1932, o nêutron e o pósitron foram descobertos e a primeira reação artificial usando um acelerador de partículas foi observada [4].

Nesse trabalho pretendemos estudar os decaimentos radioativos por meio de métodos numéricos e simulações. Entre os métodos numéricos que faremos uso, estão os métodos de Runge-Kutta que foram desenvolvidos por volta de 1900 pelos matemáticos C. Runge e M.W. Kutta. A partir de uma equação diferencial dependente do tempo é possível determinar sua solução dando passos temporais para “caminhar” sobre a função em questão.

Outro método utilizado foi o de Monte Carlo. Esse método foi desenvolvido por Stanislaw Ulam em 1945 para criar armas termonucleares [5]. A vantagem do método é que não são necessárias equações diferenciais para descrever o sistema, apenas uma função de densidade de probabilidade. O problema deste trabalho pode ser solucionado sorteando um número aleatório para cada átomo de Bismuto a cada passo temporal e verificando se este é maior ou menor que probabilidade dele decair, permitindo o decaimento ou não. O mesmo procedimento foi feito para o decaimento do Polônio em Chumbo.

O trabalho está organizado da seguinte maneira: Capítulo 1 foi destinado a uma apresentação mais aprofundada de conceitos de física nuclear e de radioatividade. A solução analítica para o problema de decaimento radioativo se encontra no Capítulo 2. Além da solução analítica, foram utilizados métodos numéricos e computacionais (em linguagem C), os quais estão descritos no Capítulo 3. Os resultados obtidos a partir dos métodos numéricos e da solução analítica se encontram no Capítulo 4. Em seguida encontram-se as Considerações Finais. Os códigos, em linguagem C, estão no Apêndice.

# Capítulo 1

## Física Nuclear

Neste capítulo foi feita uma abordagem sobre a composição do núcleo atômico, nessa apresentação foi discutido, além de alguns modelos atômicos, do que são feitos os prótons e os nêutrons, e brevemente sobre anti-partículas. Mais adiante, foi feito um estudo sobre decaimentos radioativos.

### 1.1 Composição do núcleo atômico

O primeiro cientista a propor a existência de um núcleo no átomo foi Rutherford. O modelo anterior a Rutherford foi proposto por J. J. Thomson, nesse modelo o átomo era composto por uma distribuição contínua de cargas positivas com elétrons uniformemente distribuídos na esfera de carga positiva. Esse modelo ficou conhecido como o “pudim de passas” (Figura 1.1) [6].

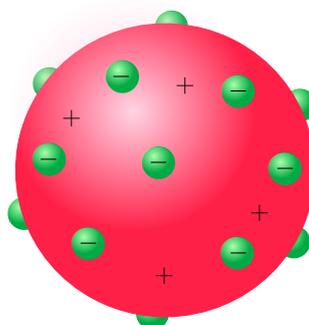


Figura 1.1: Representação esquemática do modelo atômico de J. J. Thomson. As cargas negativas (em verde) estão distribuídas uniformemente pela esfera de carga positiva (em rosa).

Em 1911, Rutherford mostrou que o modelo de Thomson era inadequado. A partir de experimentos de espalhamento de partículas  $\alpha$  pelos átomos, descobriu-se que toda a carga positiva se concentra em uma região bem pequena no centro do átomo, chamado de núcleo [4], como representado na Figura 1.2.

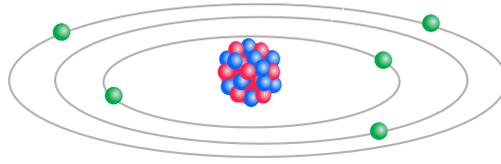


Figura 1.2: Representação esquemática do modelo atômico de Rutherford. Os elétrons (em verde) estão orbitando o núcleo.

Mas existiam diversas dúvidas sobre a estabilidade do modelo atômico de Rutherford, principalmente sobre a órbita do elétron em torno no núcleo. Bohr propôs alguns postulados que trouxeram a estabilidade ao modelo proposto por Rutherford.

O modelo atômico atual é um modelo quântico, o qual propõe um núcleo formado por prótons e nêutrons com uma nuvem de probabilidade de encontrar o elétron em torno do núcleo: os orbitais. Em cada orbital só pode conter dois elétrons, os quais devem ter *spin* opostos. Cada núcleon, isto é, prótons e nêutrons, é formado de *quarks*.

Os quarks são partículas subatômicas. Existem seis tipos de quarks: *up*, *down*, *bottom*, *strange*, *top* e *charm*. Neste caso, podemos focar nos quarks *up* e *down*. Os quarks *up* tem carga elétrica  $\frac{2}{3}e$  e os quarks *down* tem carga elétrica  $-\frac{1}{3}e$ , onde  $e$  é a carga elementar e tem módulo de  $1,6 \times 10^{-19}$  C [7].

Os núcleons são formados de quarks *up* e *down*. O próton é formado por dois quarks *up* e um quark *down*, tendo uma carga elétrica resultante  $+e$ . O nêutron é formado por dois quarks *down* e um quark *up*, tendo uma carga resultante nula.

Os quarks são responsáveis por criar a força nuclear forte. Essa força tem uma atração muito maior que a repulsão da força eletrostática, mantendo os núcleons unidos e é uma força de curto alcance [4].

## 1.2 Anti-matéria

Praticamente tudo no universo é feito de matéria, a matéria é feita de partículas como elétrons, quarks, entre outras.

Para cada tipo de partícula existe uma anti-partícula correspondente, a qual tem exatamente as mesmas propriedades daquela partícula, exceto a carga, a qual é oposta a da partícula correspondente. Por exemplo, a antipartícula do elétron, o pósitron, tem mesma massa que o elétron mas carga de sinal oposto. Algumas partículas são suas próprias antipartículas, como por exemplo o fóton e o nêutron, cujas cargas são nulas [8].

Quando uma partícula e uma antipartícula se encontram, anulam-se e se aniquilam. Toda sua energia é liberada em forma de outras partículas [9].

Como as partículas de antimatéria são essencialmente iguais às partículas de matéria regular, a não ser pela carga oposta, elas podem se combinar para formar antiprótons, anti-átomos, anti-moléculas e etc [8].

A energia de uma partícula relativística é dada pela equação,

$$E^2 = (pc)^2 + (mc^2)^2, \quad (1.1)$$

a qual podemos escrever como,

$$E = \pm[(pc)^2 + (mc^2)^2]^{1/2}. \quad (1.2)$$

Normalmente se escolhe o sinal positivo e ignora-se o sinal negativo por “argumentos físicos”, mas a matemática da equação de Dirac requer a existência de uma função de onda correspondente a esse estado de energia negativa [10].

Com o desenvolvimento do eletromagnetismo quântico por Feynmann, essa energia negativa foi expressa de maneira mais conveniente. A energia negativa da solução da equação de Dirac foi expressa como uma solução de energia positiva para uma nova partícula, a anti-partícula [4].

## 1.3 Radioatividade

A instabilidade energética dos núcleos dos elementos é muito comum na natureza. Apenas 266 dos 3000 núclídeos<sup>1</sup> são estáveis. Todos os outros são radioativos [4].

Os radioisótopos decaem por pelo menos 9 meios diferentes, entretanto a maioria dos decaimentos ocorrem por meio de um ou dois decaimentos mais comuns: decaimento  $\alpha$ , decaimento  $\beta$  e decaimento  $\gamma$ . Outros ocorrem por meios não usuais, como uma emissão de um próton ou nêutron ou fissão espontânea. Alguns núcleos podem decair de modo ainda mais raro, como decaimento beta duplo [4].

O estudo de núclídeos radioativos é importante para obter informações sobre a estrutura nuclear, sobre a natureza da força nuclear forte e sobre as propriedades de partículas elementares.

Os decaimentos ocorrem sempre que o núcleo se encontra em um estado em que a energia não é a mais baixa possível com um certo número de núcleons. A instabilidade é ocasionada por uma diferença entre o número de prótons e nêutrons no núcleo do átomo [6].

O núcleo é quase sempre levado a um estado instável por uma reação nuclear. Em alguns casos essa reação nuclear é gerada nos aceleradores de partículas, mas em outros casos foi ocasionado por fenômenos naturais que ocorreram há bilhões de anos, quando o universo estava sendo gerado [6].

A Figura 1.3 mostra os mais de 5000 núclídeos teoricamente previstos catalogados de acordo com o decaimento radioativo que eles sofrem.

---

<sup>1</sup>Espécie atômica caracterizada pelo número de prótons, nêutrons e estado energético do núcleo.

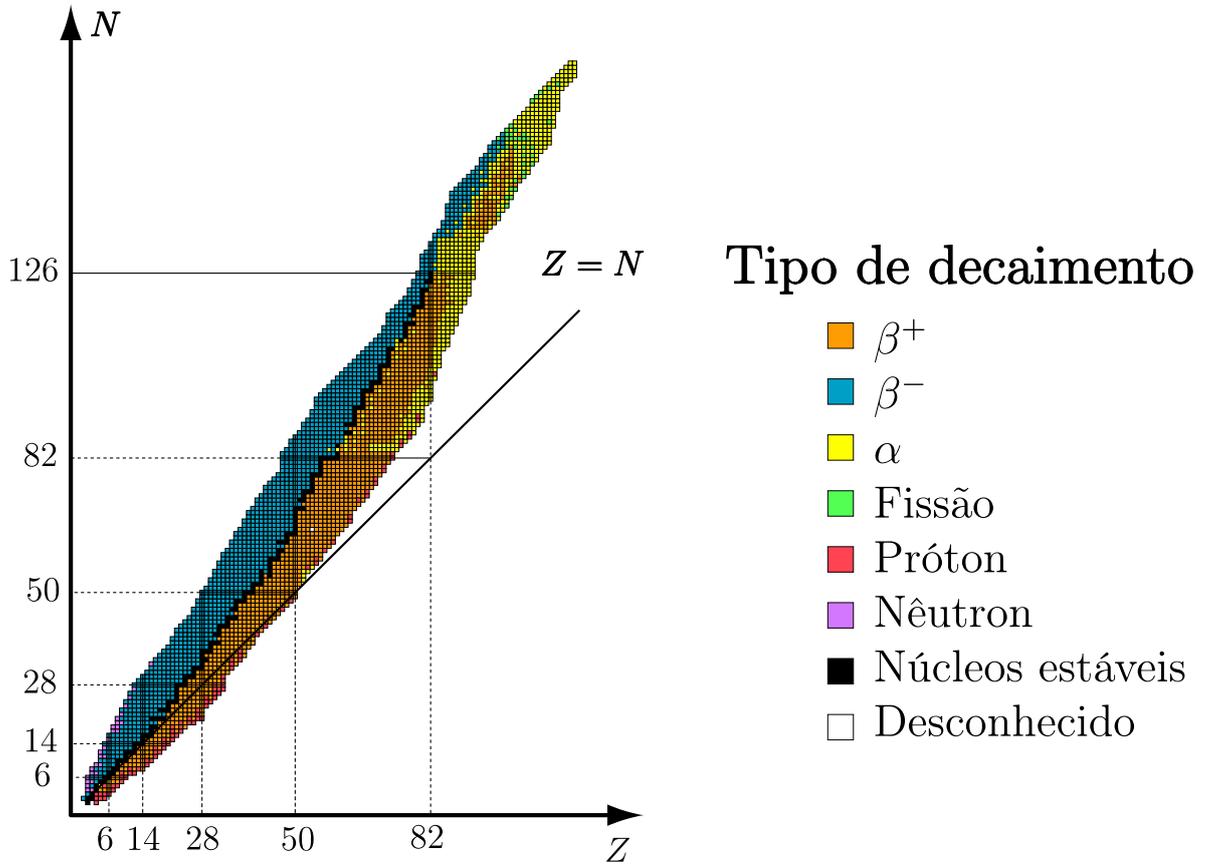


Figura 1.3: Mais de 3000 nuclídeos teoricamente previstos e catalogados de acordo com o decaimento radioativo que eles sofrem [1].

Os decaimentos radioativos procedem conforme as leis de conservação da física. Em particular: massa, energia relativística, carga elétrica, momento linear, momento angular, número de núcleons e número de léptons<sup>2</sup> são todas quantidades conservadas [4].

Vamos considerar um sistema com vários núcleos de mesma espécie os quais sofrem decaimento  $\alpha$ ,  $\beta$  ou  $\gamma$ . Em um instante inicial tem  $N$  núcleos que não decaíram, após um intervalo de tempo  $dt$ ,  $dN$  núcleos irão decair. Assim, podemos escrever o número médio de núcleos que se desexcitam como

$$dN = -N \omega dt. \quad (1.3)$$

em que  $\omega$  é uma constante de proporcionalidade, chamada *constante de decaimento*. A probabilidade do átomo decair em um intervalo  $t$  e  $t + dt$  é  $\omega dt$ . O sinal de menos é necessário, pois o número de núcleos excitados diminui com o tempo. Podemos reescrever a expressão como,

$$\frac{dN}{N} = -\omega dt. \quad (1.4)$$

Integrando, obtemos,

$$\int_{N_0}^{N(t)} \frac{dN}{N} = -\omega \int_0^t dt, \quad (1.5)$$

$$\ln N(t) - \ln N_0 = \ln \frac{N(t)}{N_0} = -\omega t, \quad (1.6)$$

<sup>2</sup>O número de léptons é um número quântico conservado que representa a diferença entre número de léptons e número de anti-léptons em uma reação de partícula elementar [11].

logo,

$$N(t) = N_0 e^{-\omega t}. \quad (1.7)$$

Essa expressão é chamada de *lei do decaimento exponencial*, em que  $N_0$  é o número de núcleos que não haviam decaído no instante inicial e  $N(t)$  é o número de núcleos que ainda não decaíram no instante  $t$  [12]. A taxa de decaimento,  $R$ , é dada pela razão entre o número de núcleos que irão decair neste intervalo de tempo,

$$R = -\frac{dN}{dt}. \quad (1.8)$$

Substituindo (1.4)

$$R = \omega N(t) = \omega N_0 e^{-\omega t} = R_0 e^{-\omega t} \quad (1.9)$$

Tanto o número de núcleos quanto a taxa de decaimento diminuem exponencialmente.

Podemos determinar o tempo médio que o núcleo sobrevive antes de decair, a *vida-média*  $\tau$  [12]. O número de núcleos, com tempo de vida entre  $t$  e  $t + dt$ , é o número que decai em  $dt$ , o qual é  $\omega N dt$ . Assim, tem-se a função distribuição  $f(t)$ :

$$f(t)dt = \frac{\omega N dt}{N_0} = \omega e^{-\omega t} dt \quad (1.10)$$

Quando usamos essa função de distribuição, a vida-média é

$$\tau = \int_0^{\infty} t f(t) dt = \int_0^{\infty} t \omega e^{-\omega t} dt = \frac{1}{\omega} \quad (1.11)$$

O *tempo de meia vida* é definido como o tempo para o número de núcleos radioativos diminuir pela metade [12]. Portanto,

$$\frac{1}{2} N_0 = N_0 e^{-\omega t_{1/2}}, \quad (1.12)$$

$$e^{\omega t_{1/2}} = 2, \quad (1.13)$$

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{\omega} = \ln 2 \tau = 0.693 \tau \quad (1.14)$$

Dada uma quantidade de núcleos que não decaíram, após alguns decaimentos, haverá a mistura de vários núcleos radioativos correlacionados decaindo sucessivamente uns nos outros. Por exemplo, o  ${}^{234}_{92}\text{U}$  decai por emissão  $\alpha$  no  ${}^{230}_{90}\text{Th}$ , que decai no  ${}^{226}_{88}\text{Ra}$ , etc. Assim, um sistema com apenas um tipo de núcleo eventualmente terá uma mistura de vários núcleos.

Um série de equações diferenciais regem esse sistema e elas podem ser resolvidas de maneira relativamente simples [4].

O objetivo deste trabalho é resolver um problema parecido com o citado. Inicialmente tem-se uma certa quantidade de  ${}^{210}\text{Bi}$  e de  ${}^{210}\text{Po}$ , o Bismuto irá decair em Polônio e o Polônio em Chumbo. Por meio de dois métodos computacionais e de um método analítico foi encontrado a densidade de átomos para cada espécie em função do tempo.

### 1.3.1 Decaimentos Radioativos

#### Decaimento Alfa

Os decaimentos alfa ocorrem em núcleos instáveis cujo número atômico é maior que  $Z = 82$ . O núcleo pai instável decai em um núcleo filho de menor energia e emite uma partícula  $\alpha$  (Figura 1.4). A partícula  $\alpha$  é um núcleo de Hélio,  $\text{He}_2^4$ , dois prótons e dois nêutrons [6].

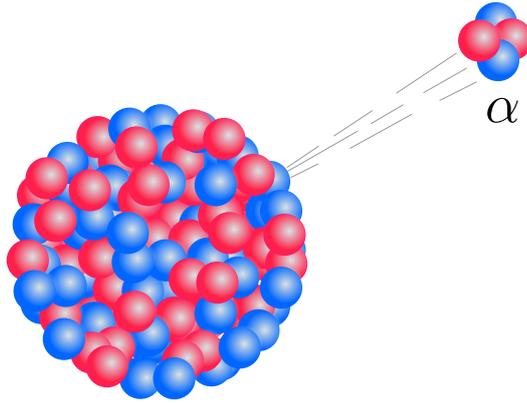


Figura 1.4: Representação do decaimento  $\alpha$ . O núcleo pai excitado emite um núcleo de Hélio para diminuir sua energia, resultando em um núcleo filho mais estável e uma partícula alfa. Em rosa estão representados os prótons e em azul os nêutrons.

A energia do decaimento  $\alpha$  pode ser escrito como,

$$E = [M_{Z,A} - (M_{Z-2,A-4} + M_{2,4})] c^2 \quad (1.15)$$

em que,  $M_{Z,A}$  é a massa atômica do núcleo pai,  $M_{Z-2,A-4}$  é a massa do núcleo filho, e  $M_{2,4}$  a massa da partícula  $\alpha$ .

Nas regiões do átomo a partícula sofre a ação de um potencial efetivo, que é a soma do potencial Coulombiano e do potencial nuclear. Na região interna do núcleo, isto é, para distâncias menores que  $r'$ , em que  $r'$  é a soma dos raios das distribuições uniformes de cargas do núcleo filho e do núcleo de Hélio, o potencial nuclear é extremamente forte e predomina na atração da partícula. Esse potencial é de curto alcance e é devido à força nuclear forte. No ponto  $r'$  o potencial assume seu valor máximo  $V_0$  e a partir deste ponto, o potencial Coulombiano é predominante e a partícula é repelida do átomo [6].

No geral, a partícula  $\alpha$  não tem energia suficiente para escapar da região de atração. Classicamente a partícula ficaria confinada nesse poço de potencial e nunca escaparia do átomo. Quanticamente, a partícula sofre o efeito de “tunelamento”, no qual a partícula atravessa a barreira de potencial maior que sua energia [12].

A taxa de decaimento radioativo  $R$  depende da espessura da barreira. Se ela for fina, a partícula tem maior probabilidade de tunelar, assim o efeito ocorre rapidamente. Se a barreira for espessa, a partícula leva mais tempo para atravessar, pois a probabilidade dela tunelar é menor.

Para o decaimento  $\alpha$ , a constante de decaimento pode ser escrita como,

$$\omega = \frac{T\nu}{2R} \quad (1.16)$$

em que,  $T$  é o coeficiente de transmissão, o qual determina a probabilidade da partícula tunelar, e  $\nu$  é a velocidade da partícula  $\alpha$  [4].

Um exemplo de decaimento alfa é o núcleo pai de Urânio, ( $^{92}\text{U}^{238}$ ), emite um núcleo de Hélio e decai em Tório, ( $^{90}\text{Th}^{234}$ ) [13].

### Decaimento Beta

Existem três tipos de decaimentos radioativos que não alteram o número de massa  $A$ , os decaimentos  $\beta^+$ ,  $\beta^-$  e a captura eletrônica [6].

No decaimento  $\beta^-$  um quark *down* de um dos nêutrons do núcleo se transforma em um quark *up* mais uma partícula de carga  $-e$ , conservando a carga total. Assim, temos um nêutron  $n$  se transformando em próton  $p$  e emitindo uma partícula  $\beta^-$ , o elétron.

Além da conservação de carga, devemos levar em consideração também, a conservação do momento linear. Para que isso ocorra, é emitido um anti-neutrino<sup>3</sup>  $\bar{\nu}_e$  junto ao elétron (Figura 1.5).

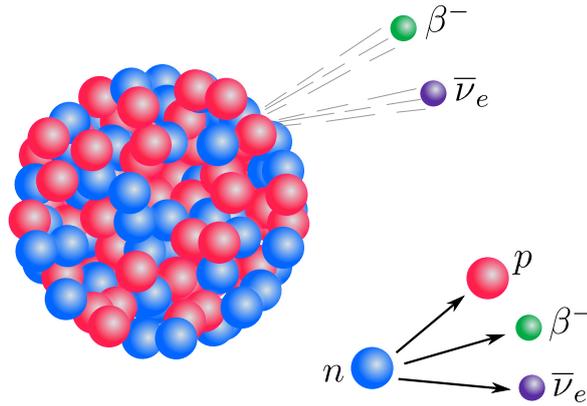


Figura 1.5: Representação do decaimento  $\beta^-$ . O núcleo pai excitado emite um elétron e um anti-neutrino. Esse processo transforma um nêutron em um próton. Em rosa estão representados os prótons, em azul os nêutrons, em verde as partículas  $\beta^-$  e em roxo os anti-neutrinos.

Neste processo, a massa atômica permanece inalterada e o número atômico aumenta em uma unidade, já que um nêutron é substituído por um próton. A energia do decaimento  $Q$  é dada por,

$$Q = [M_Z - (M_{Z+1} + 2m_e)] c^2 \quad (1.18)$$

em que,  $M_Z$  é a massa atômica do núcleo pai,  $M_{Z+1}$  é a massa atômica do núcleo filho e  $m_e$  é a massa do elétron.

Um exemplo de decaimento  $\beta^-$  é o núcleo pai de Iodo, ( $^{131}\text{I}^{53}$ ), emite um elétron e decai em Xenônio, ( $^{131}\text{Xe}^{54}$ ) [13].

No decaimento  $\beta^+$  um quark *up* de um dos prótons do núcleo se transforma em um quark *down* mais uma partícula de carga  $e$ . Assim, temos um próton  $p$  se transformando em nêutron  $n$  e emitindo uma partícula  $\beta^+$ , o pósitron, e um neutrino  $\nu_e$  (Figura 1.6).



<sup>3</sup>O anti-neutrino é a subpartícula do neutrino. O neutrino é uma partícula que interage muito pouco com a matéria, tem uma massa muito pequena e carga neutra.

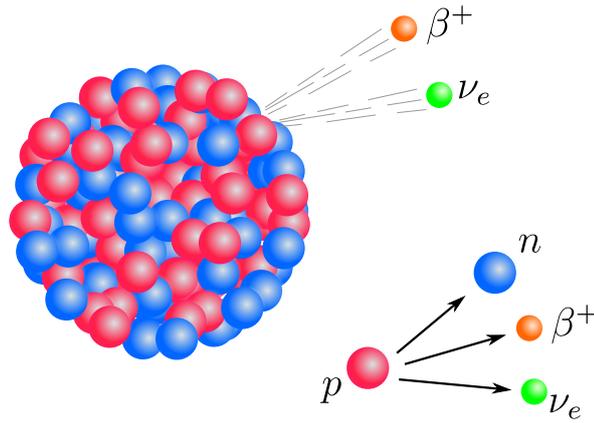


Figura 1.6: Representação do decaimento  $\beta^+$ . O núcleo pai excitado emite um pósitron e um neutrino. Esse processo transforma um próton em um nêutron. Em rosa estão representados os prótons, em azul os nêutrons, em verde os neutrinos e em laranja as partículas  $\beta^+$ .

Neste processo, a massa atômica também permanece inalterada e o número atômico diminui em uma unidade, já que um próton é substituído por um nêutron. A energia do decaimento  $Q$  é dada por,

$$Q = [M_Z - (M_{Z-1} + 2m_e)]c^2 \quad (1.20)$$

em que,  $M_Z$  é a massa atômica do núcleo pai,  $M_{Z+1}$  é a massa atômica do núcleo filho e  $m_e$  é a massa do pósitron.

Um exemplo de decaimento  $\beta^+$  é o núcleo pai de Carbono, ( $^{11}\text{C}^6$ ), emite um pósitron e decai em Boro, ( $^{11}\text{B}^5$ ) [13].

Na captura eletrônica, o átomo captura um elétron e transforma um quark *up* do próton em quark *down*. Assim, o próton com um elétron vira um nêutron e é emitido um neutrino para conservar o momento linear (Figura 1.7).

$$p + e^- \longrightarrow n + \nu_e \quad (1.21)$$

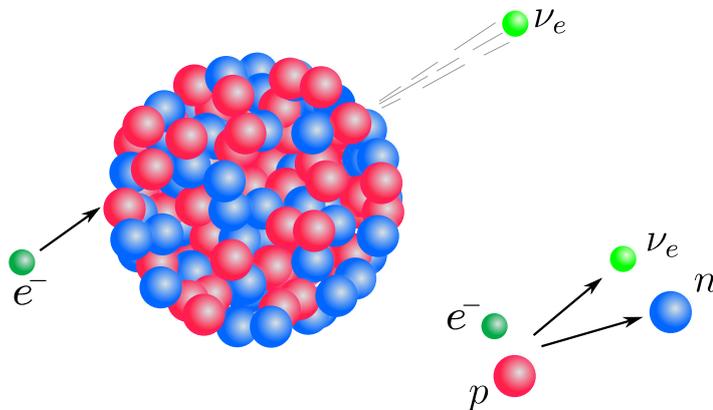


Figura 1.7: Representação da captura eletrônica. O núcleo pai excitado captura um elétron e emite um neutrino. Esse processo transforma um próton em um nêutron. Em rosa estão representados os prótons, em azul os nêutrons, em verde os elétrons e em verde claro os neutrinos.

A energia do decaimento  $Q$  é dada por,

$$Q = [(M_Z + m_e) - (M_{Z-1} + m_e)] c^2 \quad (1.22)$$

em que,  $M_Z$  é a massa atômica do núcleo pai,  $M_{Z+1}$  é a massa atômica do núcleo filho e  $m_e$  é a massa do elétron [6].

Um exemplo de captura eletrônica é o núcleo pai de Rubídio, ( $^{81}\text{Rb}^{37}$ ), captura um elétron e se transforma em Criptônio, ( $^{81}\text{Kr}_{36}$ ) [13].

### **Decaimento Gama**

No decaimento  $\gamma$  o núcleo muda de um estado excitado para um de energia mais baixa do mesmo isótopo por emissão de um fóton de alta energia (Figura 1.8). Esse decaimento normalmente ocorre após um decaimento  $\alpha$  ou  $\beta$  onde o núcleo filho não está no estado de energia mais favorecido possível [4].

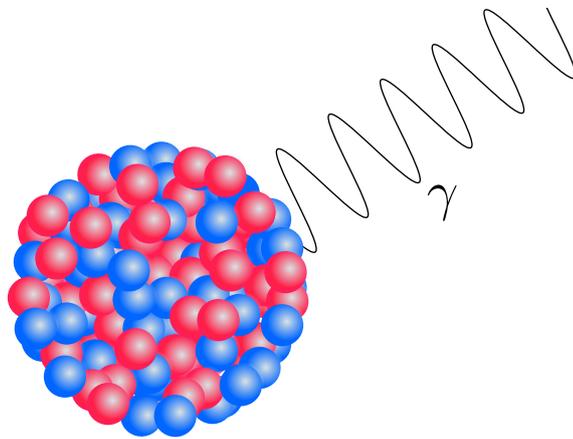


Figura 1.8: Representação do decaimento  $\gamma$ . O núcleo excitado decai em um núcleo mais estável emitindo radiação  $\gamma$ . Em rosa estão representados os prótons e em azul os nêutrons.

A energia  $hf$  do fóton do raio gama é

$$hf = E_1 - E_2 \quad (1.23)$$

em que  $E_1$  é a energia do estado mais alto e  $E_2$  é a energia do estado mais baixo.

No próximo Capítulo foi discutido o problema do decaimento radiativo em que existe uma certa quantidade inicial de Bismuto e de Polônio, o Bismuto decai em Polônio que decai em Chumbo, desejou-se encontrar a densidade de átomos de cada espécie em função do tempo de forma analítica.

# Capítulo 2

## Método Analítico

Neste Capítulo foi estudado o método de fator integrante para resolução da equação diferencial que rege o sistema, a qual foi resolvida logo em seguida.

### 2.1 Método de fator integrante

Estudaremos equações diferenciais da forma

$$\frac{dy}{dt} = f(t,y), \quad (2.1)$$

cuja solução  $y = \Phi$  pode ser qualquer função diferenciável que satisfaz à equação para todo  $t$  dentro de algum intervalo [14].

Para utilizar o método de fatores integrantes, a equação diferencial em questão deve ser de primeira ordem e linear, isto é,  $f(y,t)$  deve depender linearmente da variável  $y$ . Vamos considerar a forma mais geral para uma equação diferencial de primeira ordem linear, ou seja,

$$\frac{dy}{dt} + p(t)y = g(t), \quad (2.2)$$

em que  $p$  e  $g$  são funções da variável independente  $t$ .

Às vezes é possível resolver a equação diferencial integrando diretamente, como foi o caso da equação (1.3). Na maioria das vezes as equações diferenciais de primeira ordem e lineares não podem ser resolvida desta maneira [14].

Para resolve-las podemos multiplicar a equação por uma função  $\mu(t)$ , chamada de fator integrante. Consideraremos que  $p(t) = a$ , em que  $a$  é uma constante [14]. Então,

$$\frac{dy}{dt} + ay = g(t), \quad (2.3)$$

Multiplicando pelo fator integrante obtemos,

$$\mu(t) \frac{dy}{dt} + \mu(t)ay = \mu(t)g(t). \quad (2.4)$$

A questão agora é: qual é a função que escolhemos para que o lado direito seja a derivada de um produto? Para encontrar a resposta para essa pergunta derivaremos o produto  $\mu(t)y$  e compararemos os termos,

$$\frac{d}{dt}[\mu(t)y] = \frac{d\mu(t)}{dt}y + \mu(t)\frac{dy}{dt}. \quad (2.5)$$

Comparando a equação (2.5) com a (2.4), podemos ver que

$$\frac{d\mu(t)}{dt} = \mu(t)a. \quad (2.6)$$

Assim,

$$\frac{d\mu(t)}{\mu(t)} = a dt. \quad (2.7)$$

Integrando dos dois lados e isolando  $\mu(t)$  obtemos a função procurada,

$$\mu(t) = e^{at}. \quad (2.8)$$

Substituindo na equação (2.4) obtemos,

$$e^{at} \frac{dy}{dt} + e^{at} ay = e^{at} g(t). \quad (2.9)$$

Reescrevendo, verificamos que

$$\frac{d}{dt}[e^{at}y] = e^{at}g(t). \quad (2.10)$$

Integrando ambos os lados da equação obtemos,

$$e^{at}y = c + \int e^{at}g(t)dt, \quad (2.11)$$

em que  $c$  é uma constante a ser determinada partindo do problema de valor inicial [14]. Logo a solução de maneira mais geral pode ser escrita como,

$$y = ce^{-at} + e^{-at} \int e^{at}g(t)dt. \quad (2.12)$$

## 2.2 Problema do decaimento radioativo

Estamos interessando, como já dito, em resolver o problema do decaimento radioativo. Inicialmente tem-se uma certa quantidade de átomos de Bismuto,  $N_{Bi}(0)$  e de Polônio  $N_{Po}(0)$ . O Bismuto sofre um decaimento  $\beta$  decaindo em Polônio, o qual sofre o mesmo decaimento se transformando em Chumbo.

Assim, a taxa de variação de átomos de Bismuto pode ser escrita como,

$$\frac{dN_{Bi}(t)}{dt} = -\omega_{Bi}N_{Bi}(t) \quad (2.13)$$

A solução desta equação já foi estudada no Capítulo 1, e é dada pela equação (1.7),

$$N_{Bi}(t) = N_{Bi}(0)e^{-\omega_{Bi}t} \quad (2.14)$$

em que  $\omega_{Bi}$  é a constante de decaimento do Bismuto e é equivalente à

$$\omega_{Bi} = \frac{\ln 2}{t_{1/2Bi}} \quad (2.15)$$

em que,  $t_{1/2Bi}$  é o tempo de meia vida do Bismuto.

O caso do Polônio é um pouco mais complicado, pois ao mesmo tempo em que átomos de Polônio estão sendo formados pelos átomos de Bismuto, também há átomos de Polônio decaindo em Chumbo, assim podemos escrever,

$$\frac{dN_{Po}(t)}{dt} = -\omega_{Po}N_{Po}(t) + \omega_{Bi}N_{Bi}(t). \quad (2.16)$$

em que  $\omega_{Po}$  é a contante de decaimento do Polônio,

$$\omega_{Po} = \frac{\ln 2}{t_{1/2Po}} \quad (2.17)$$

e  $t_{1/2Po}$  é o tempo de meia vida do Polônio. Podemos observar que o primeiro termo do lado direito da equação é equivalente à taxa de átomos de Polônio que decaem no tempo e o segundo termo é a taxa de átomos de Bismuto se transformam em Polônio. A resolução desta E.D.O. não é tão óbvia quanto a outra, mas pode ser resolvida de maneira simples utilizando o método de fatores integrantes discutido anteriormente.

Para resolver, substituiremos a solução (2.14) na equação 2.17 e multiplicar o resultado por  $\mu(t)$ , assim,

$$\frac{dN_{Po}(t)}{dt}\mu(t) = -\omega_{Po}N_{Po}(t)\mu(t) + \omega_{Bi}N_{Bi}(0)e^{-\omega_{Bi}t}\mu(t), \quad (2.18)$$

$$\frac{dN_{Po}(t)}{dt}\mu(t) + \omega_{Po}N_{Po}(t)\mu(t) = \omega_{Bi}N_{Bi}(0)e^{-\omega_{Bi}t}\mu(t). \quad (2.19)$$

Do mesmo modo que feito anteriormente, derivaremos o produto  $\mu(t)y$  e compararemos os termos,

$$\frac{d}{dt}[\mu(t)y] = \frac{d\mu(t)}{dt}y + \mu(t)\frac{dy}{dt}. \quad (2.20)$$

Comparando a equação (2.20) com a (2.19) podemos ver que,

$$\frac{d\mu(t)}{dt} = \omega_{Po}\mu(t), \quad (2.21)$$

integrando e isolando  $\mu(t)$  obtemos,

$$\mu(t) = e^{\omega_{Po}t}. \quad (2.22)$$

Substituindo na equação (2.19), constatamos que,

$$\frac{dN_{Po}(t)}{dt}e^{\omega_{Po}t} + \omega_{Po}N_{Po}(t)e^{\omega_{Po}t} = \omega_{Bi}N_{Bi}(0)e^{-\omega_{Bi}t}e^{\omega_{Po}t}. \quad (2.23)$$

O lado esquerdo, como esperado, é a derivada de  $e^{\omega_{Po}t}N_{Po}(t)$ . Então,

$$\frac{d}{dt}[N_{Po}(t)e^{\omega_{Po}t}] = \omega_{Bi}N_{Bi}(0)e^{(-\omega_{Bi}+\omega_{Po})t}. \quad (2.24)$$

Integrando dos dois lados, obtemos,

$$N_{Po}(t)e^{\omega_{Po}t} = \frac{\omega_{Bi}N_{Bi}(0)e^{(-\omega_{Bi}+\omega_{Po})t}}{-\omega_{Bi} + \omega_{Po}} + C', \quad (2.25)$$

em que  $C'$  é uma constante. Isolando  $N_{Po}(t)$  obtemos,

$$N_{Po}(t) = \frac{\omega_{Bi}N_{Bi}(0)e^{-\omega_{Bi}t}}{-\omega_{Bi} + \omega_{Po}} + C'e^{-\omega_{Po}t}. \quad (2.26)$$

Chamando de  $C = C'(-\omega_{Bi} + \omega_{Po})$ , em que  $C$  é outra constante, averiguamos que

$$N_{Po}(t) = \frac{\omega_{Bi}N_{Bi}(0)e^{-\omega_{Bi}t} + Ce^{-\omega_{Po}t}}{-\omega_{Bi} + \omega_{Po}}. \quad (2.27)$$

Agora devemos utilizar as condições iniciais do problema para determinar a contante  $C$ . Sabemos que no tempo  $t = 0$  o número de átomos de Polônio é  $N_{Po}(t) = N_{Po}(0)$ . Substituindo na equação obtida temos,

$$N_{Po}(0) = \frac{\omega_{Bi}N_{Bi}(0) + C}{-\omega_{Bi} + \omega_{Po}}. \quad (2.28)$$

Isolando a constante obtemos,

$$C = (-\omega_{Bi} + \omega_{Po})N_{Po}(0) - \omega_{Bi}N_{Bi}(0). \quad (2.29)$$

Por fim, a solução para o número de átomos de Polônio em função do tempo é,

$$N_{Po}(t) = \frac{\omega_{Bi}N_{Bi}(0)e^{-\omega_{Bi}t} + [(-\omega_{Bi} + \omega_{Po})N_{Po}(0) - \omega_{Bi}N_{Bi}(0)]e^{-\omega_{Po}t}}{-\omega_{Bi} + \omega_{Po}}. \quad (2.30)$$

O número de átomo de Chumbo é simplesmente o número de átomos inicial menos o número de Bismuto e o número de Polônio, isto é,

$$N_{Pb}(t) = (N_{Bi}(0) + N_{Po}(0)) - (N_{Bi}(t) + N_{Po}(t)) \quad (2.31)$$

Isso significa que dos átomos presentes na amostra, os que não são Polônio nem Bismuto, são obviamente Chumbo, conservando o número total de átomos.

Para uma melhor análise, podemos expressar os resultados obtidos em termos das densidades de átomos de cada espécie. Para que isso seja possível, basta dividir o número de átomos de determinada espécie pelo número total de átomos, obtendo finalmente,

$$D_{Bi}(t) = \frac{N_{Bi}(0)}{(N_{Bi}(0) + N_{Po}(0))} e^{-\omega_{Bi}t}, \quad (2.32)$$

$$D_{Po}(t) = \frac{\omega_{Bi}N_{Bi}(0)e^{-\omega_{Bi}t} + [(-\omega_{Bi} + \omega_{Po})N_{Po}(0) - \omega_{Bi}N_{Bi}(0)]e^{-\omega_{Po}t}}{(-\omega_{Bi} + \omega_{Po})(N_{Bi}(0) + N_{Po}(0))}, \quad (2.33)$$

$$D_{Pb}(t) = 1 - (D_{Bi}(t) + D_{Po}(t)), \quad (2.34)$$

em que  $D_i(t) = N_i(t)/(N_{Bi}(0) + N_{Po}(0))$  e  $i$  pode ser Bi, Po ou Pb.

As equações (2.32), (2.33) e (2.34) são as soluções analíticas do problema para cada espécie. Visando revisar esse problema, no próximo Capítulo foi discutido dois métodos numéricos, o de Runge-Kutta e o de Monte Carlo. Os dois métodos são apresentados como alternativa para encontrar as soluções para as equações diferenciais acopladas do problema discutido.

# Capítulo 3

## Métodos de Cálculo Numérico

Os métodos numéricos estão cada vez mais sendo utilizados na física devido a complexidade dos problemas. Assim, neste Capítulo foram discutidos dois métodos numéricos, o método de Runge-Kutta e o de Monte Carlo.

### 3.1 Método de Runge-Kutta

Os métodos de Runge-Kutta são uma família de métodos numéricos para resolver equações diferenciais de forma aproximada. Esses métodos são uma versão melhorada do método de Euler.

O método de Euler é um procedimento de primeira ordem para resolver as E.D.O.s a partir de um valor inicial. É o método mais simples dos métodos de Runge-Kutta [14].

O problema central a ser resolvido consiste a equação diferencial

$$\frac{dy}{dt} = f[t, y(t)], \quad (3.1)$$

com a condição inicial

$$y(t_0) = y_0. \quad (3.2)$$

Vamos supor que a função é contínua no plano  $ty$  contendo o ponto  $(t_0, y_0)$ . Existe uma solução única  $y = \phi(t)$  [15].

Podemos escrever a equação diferencial (3.1) no ponto  $t = t_n$  na forma

$$\frac{d\phi(t_n)}{dt} = f[t_n, \phi(t_n)]. \quad (3.3)$$

Assim, podemos aproximar a derivada para a diferença do ponto da frente pelo ponto de trás, dividido pela diferença temporal,

$$\frac{\phi(t_{n+1}) - \phi(t_n)}{t_{n+1} - t_n} \cong f[t_n, \phi(t_n)]. \quad (3.4)$$

Chamando,  $y_{n+1} = \phi(t_{n+1})$  e  $y_n = \phi(t_n)$ , obtemos,

$$y_{n+1} = y_n + f(t_n, y_n)(t_{n+1} - t_n), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.5)$$

Se o tamanho do passo  $t_{n+1} - t_n$  tem um valor uniforme  $h$  para todo  $n$  e denotando  $f(t_n, y_n)$  por  $f_n$ , chegamos a

$$y_{n+1} = y_n + hf_n, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.6)$$

O método de Euler consiste em repetir a equação (3.6) usando o resultado de cada passo para executar o próximo passo. Assim, obtemos a sequência de valores  $y_0, y_1, y_2, \dots, y_n, \dots$  que aproxima os valores da solução  $\phi(t)$  nos pontos  $t_0, t_1, t_2, \dots, t_n, \dots$  [15]. A Figura 3.1 representa graficamente o método.

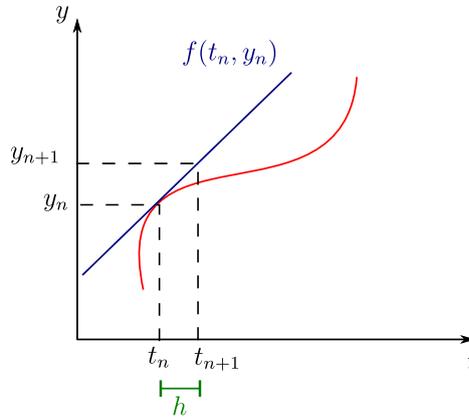


Figura 3.1: Representação esquemática do método de Euler. Na Figura  $h$  é o passo no eixo  $t$ , e  $f(t_n, y_n)$  é a reta tangente à solução em vermelho.

O algoritmo de Euler usa pequenas linhas retas para encontrar uma aproximação para a solução da E.D.O.. Exceto para o primeiro ponto, os dados utilizados para os cálculos são apenas aproximações para o valor da solução nos pontos específicos [14].

Nos métodos computacionais, não é possível tender o passo à zero (o que seria correto pela definição de derivada), assim, a cada passo apenas números com dígitos finitos são utilizados, tendo um erro envolvido. Quanto menor for o passo, menor será o erro [16].

O método de Runge-Kutta segue a mesma lógica do método de Euler mas utilizando uma média das retas tangentes em diversos pontos do intervalo  $t_n \leq t \leq t_{n+1}$ . Para o método de Runge-Kutta de segunda ordem são dados dois passos, um intermediário e um final. Para o de quarta ordem são dados quatro passos intermediários e um final [14]. Deste modo,

$$y_{n+1} = y_n + h \left( \frac{k_{n1} + 2k_{n2} + 2k_{n3} + k_{n4}}{6} \right), \quad (3.7)$$

em que,

$$k_{n1} = f(t_n, y_n) \quad (3.8)$$

$$k_{n2} = f\left(t_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hk_{n1}\right)$$

$$k_{n3} = f\left(t_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hk_{n2}\right) \quad (3.9)$$

$$k_{n4} = f(t_n + h, y_n + hk_{n1})$$

A soma  $(k_{n1} + 2k_{n2} + 2k_{n3} + k_{n4})/6$  pode ser interpretada como uma inclinação média.  $k_{n1}$  pode ser interpretada como a inclinação à esquerda do intervalo,  $k_{n2}$  é a inclinação no ponto médio,  $k_{n3}$  é uma segunda aproximação para a inclinação no ponto médio e  $k_{n4}$  é a inclinação no ponto  $t_n + h$ . Os coeficientes multiplicando cada inclinação são os pesos estatísticos que minimizam o erro [14].

Para exemplificar, vamos realizar o primeiro passo graficamente. Primeiramente aplicamos o método de Euler para estimar o valor da função no ponto médio (Figura 3.2).

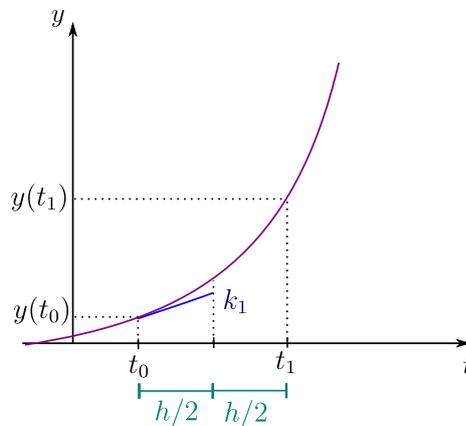


Figura 3.2: Representação gráfica do método de Runge-Kutta após o primeiro passo intermediário. Em roxo está representada a solução da E.D.O. e em azul a reta tangente  $k_1$ .

Por meio deste ponto estimado, calculamos a inclinação na metade do intervalo,  $k_2$  (Figura 3.3).

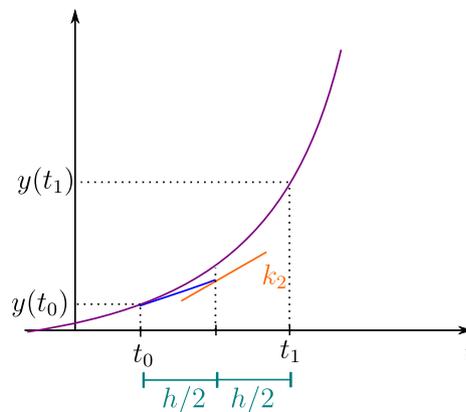


Figura 3.3: Representação gráfica do método de Runge-Kutta após o segundo intermediário. Em roxo está representada a solução da E.D.O. e em tom alaranjado a reta tangente  $k_2$ .

Utilizamos a nova inclinação para estimar um novo valor para a função no ponto médio. Para isso, transladamos a reta para o ponto  $t_0$  e utilizamos o valor dela no ponto médio como novo valor para  $y$  (Figura 3.4).

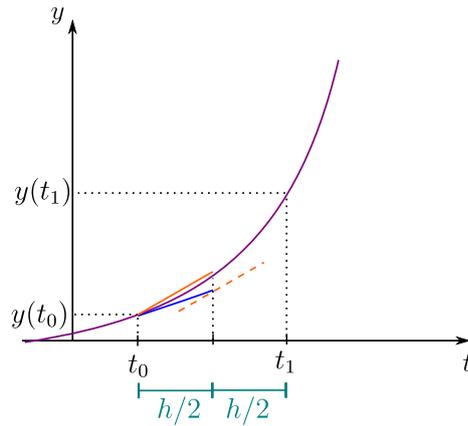


Figura 3.4: Representação gráfica do método de Runge-Kutta após o terceiro passo intermediário. Em roxo está representada a solução da E.D.O., em tom alaranjado tracejado a reta tangente  $k_2$  e em tom alaranjado contínuo a reta tangente  $k_2$  transladada.

Neste novo ponto, calculamos novamente a inclinação da reta, obtendo  $k_3$ , e repetimos o procedimento (Figuras 3.5a, 3.5b e 3.5c) anterior até realizar o passo final (Figura 3.5d) [17].

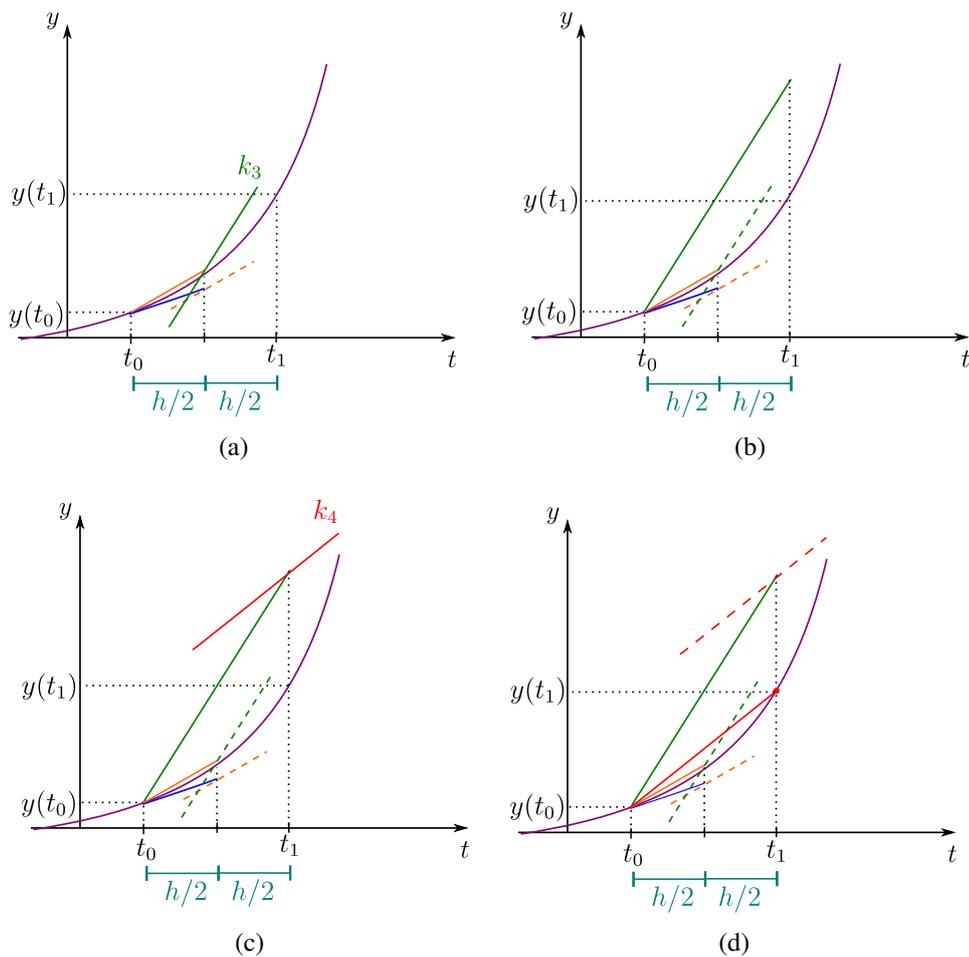


Figura 3.5: Representação gráfica do método de Runge-Kutta (a) após o terceiro passo intermediário, (b) após transladar a reta tangente  $k_3$ , (c) após o passo final, (d) após transladar o passo final.

O método de Runge-Kutta de 4ª ordem é muito mais preciso que o de Euler, e foi utilizado neste trabalho para encontrar a solução do decaimento radioativo do Bismuto em Polônio e do Polônio em Chumbo em função do tempo. O código em Linguagem C se encontra no Apêndice A

## 3.2 Método de Monte Carlo

O Método de Monte Carlo é um método estatístico, e genericamente falando, ele proporciona a solução de problemas que descrevem algum tipo de evolução temporal. O método consiste em utilizar números aleatórios para aplicar as leis que regem o sistema repetidas vezes, de modo que o resultado final converge para o comportamento do sistema [5].

Entretanto, o que exatamente é aleatoriedade? A noção de aleatoriedade está fortemente ligada à dois conceitos: determinismo e não determinismo. O determinismo tem por definição: “negação do livre-arbítrio” [18]. Isto é, regido por leis e regras, todo evento é consequência de uma causa. Em contraste o não determinismo diz que uma causa pode ter diversas consequências e nenhuma regra diz qual delas irá ocorrer, não há como prever as consequências.

A definição de aleatório é: "incerto", isto é, acontece sem previsibilidade [18]. Demócrito dizia que:

*Aleatoriedade é o desconhecido.*

A fala de Demócrito é justificada com o exemplo: dois homens concordam em mandar seus escravos para buscar água no mesmo momento de modo a fazer os escravos se encontrarem. Então os escravos se encontram na fonte e um deles diz: “Oh, que aleatório nos encontramos aqui” [19].

Em contraste à Demócrito, Epicuro disse:

*Aleatoriedade é objetiva, é propriedade natural dos eventos.*

Epicuro diz que existe sim uma aleatoriedade que é independente do nosso conhecimento [19].

Um exemplo é o rolar de um dado, cada face tem a mesma probabilidade de ser jogada e é impossível de prever o resultado. Para Demócrito essa imprevisibilidade está associada ao sistema ser muito complexo para nosso cérebro compreender (se analisarmos a velocidade, rotação, posição, etc, talvez conseguiríamos prever o resultado). Para Epicuro, os resultados são imprevisíveis por natureza.

A física utiliza constantemente modelos aleatórios para descrever e analisar processos físicos que não são necessariamente aleatórios, mas podem ser muito complicados para serem completamente analisados de forma determinística [19].

O computador não compreende a ideia de aleatoriedade de Epicuro visto que as ações tomadas são completamente determinísticas e calculadas. Desta forma, na simulação de Monte Carlo foi utilizada a biblioteca *GSL: GNU Scientific Library*.

Essa biblioteca utiliza uma função que recebe um parâmetro, conhecido como *semente*, e a partir disso, o programa gera uma sequência de números que chamamos de: pseudo-aleatórios. Sempre que a mesma semente for utilizada para rodar o programa, a mesma sequência de número será gerada. Essa sequência de números respeita todas as propriedades estatísticas de um número aleatório.

Os números pseudo-aleatórios são vantajosos. Por exemplo: suponha que utilizamos essa biblioteca para gerar as condições iniciais de uma simulação, após iniciado e finalizado o programa, obtemos um resultado. Então, decidimos acrescentar outro parâmetro ao problema a

fim de encontrar quais as mudanças que esse parâmetro gera no resultado final. Se utilizarmos a mesma semente para gerar as condições iniciais podemos comparar os resultados obtidos antes e depois da inserção do parâmetro. As condições iniciais vão continuar respeitando as propriedades de números aleatórios.

Apesar do nome “Monte Carlo” ter sido inserido apenas em 1947, as amostras estocásticas<sup>1</sup> eram conhecidas muito tempo antes do advento dos computadores. O naturalista, matemático e escritor francês Georges-Louis Leclerc, conde de Buffon, em 1777 encontrou que a probabilidade de uma agulha de comprimento  $L$  jogada em um plano com duas linhas paralelas de separação  $d > L$  atravessar uma das linhas é:

$$p = \frac{2L}{\pi d}. \quad (3.10)$$

Seu experimento foi jogar a agulha diversas vezes nesse plano e anotar quantas vezes ela ultrapassava uma das linhas [19].

O método de Monte Carlo tem inúmeras aplicações e é de extrema importância para diversas áreas da ciência, principalmente para a medicina e para a radioatividade. Por exemplo, ele pode ser utilizado para simular a evolução temporal de uma reação do tipo  $A + B \rightleftharpoons C$  até que condição de equilíbrio termodinâmico seja atingida. A equação que rege esse sistema é da forma:

$$\frac{d[A]}{dt} = -2k[A]^2 \quad (3.11)$$

em que  $[A]$  é a concentração do reagente  $A$  e  $k$  a constante de velocidade.

Para resolver esse problema da química podemos utilizar a mesma lógica aplicada ao problema deste trabalho que foi descrita a seguir [20].

Neste trabalho, o método de Monte Carlo foi utilizado para calcular o número de átomos de cada elemento em função do tempo. É um método simples que segue o seguinte algoritmo: o programa sorteia um número aleatório,  $n$ , no intervalo  $0 \leq n < 1$ . Se esse número for menor que a probabilidade do átomo decair, ele decai, se não, ele não decai. Cada vez que um número é sorteado, o número de átomos de cada elemento é gravado [21].

O código em Linguagem C para a solução do decaimento radioativo por meio do método de Monte Carlo está no Apêndice A.

Os métodos numéricos são extremamente importantes para a física, principalmente quando a equação diferencial estudada não possui solução analítica ou quando é muito complicado de encontrá-la. Neste trabalho o problema possui uma solução analítica. Assim, podemos validar os métodos numéricos comparando os resultados com a solução encontrada. Isso foi feito no próximo Capítulo.

---

<sup>1</sup>Estocásticos: origem em eventos aleatórios.

# Capítulo 4

## Resultados

Neste capítulo iremos mostrar os resultados obtidos para o problema de decaimento radiativo discutido. Uma determinada amostra tem 1000 átomos de Bismuto e 500 de Polônio. O Bismuto sofre um decaimento beta e se transforma em Polônio, o Polônio sofre o mesmo decaimento se transformando em Chumbo. O  $^{210}\text{Bi}$  tem um tempo de meia vida de 120 horas e o  $^{210}\text{Po}$  tem um tempo de meia vida de 3312 horas. O objetivo foi encontrar a densidade de átomos de cada espécie em função do tempo em segundos.

Levando em consideração o tempo de meia vida do  $^{210}\text{Bi}$  e do  $^{210}\text{Po}$  podemos encontrar a constante de decaimento de cada espécie por meio da equação (1.14) obtendo:  $\omega_{Bi} = 5,776 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$  e  $\omega_{Po} = 2,093 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ .

A Figura 4.1 mostra um gráfico confeccionado utilizando o *software Gnuplot*. Ela exibe a dependência da densidade de átomos em função do tempo em segundos obtida pelo método analítico apresentado no Capítulo 2.

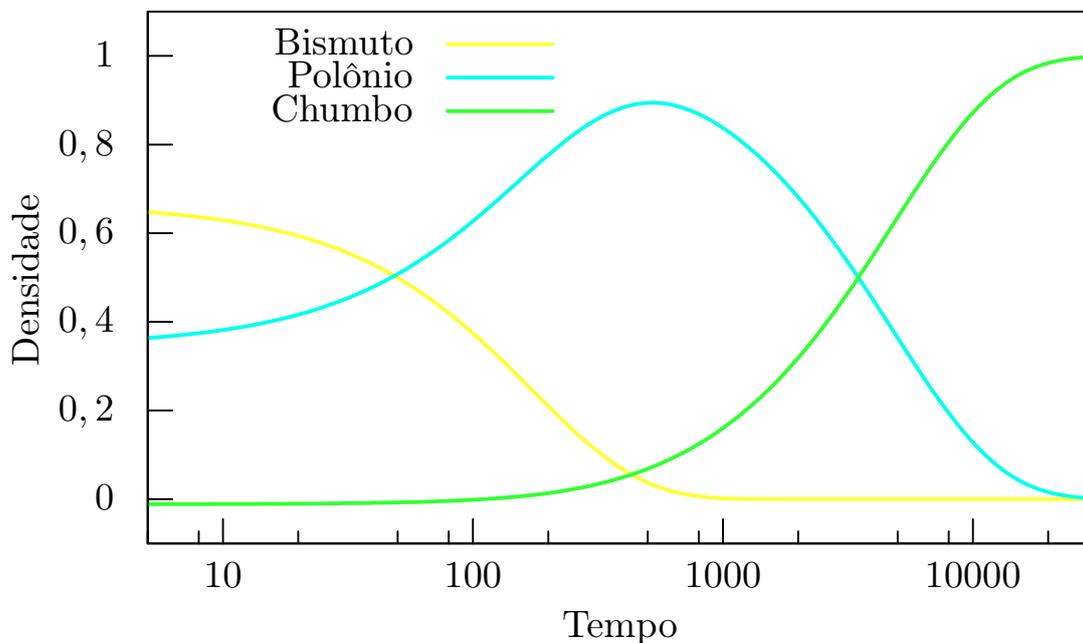


Figura 4.1: Mostra a dependência da densidade de átomos em função do tempo em segundos encontrada pelo método analítico. As condições iniciais utilizadas foram:  $N_{Bi}(0) = 1000$ ,  $N_{Po}(0) = 500$  e  $N_{Pb}(0) = 0$ . As constantes de decaimento de cada espécie é  $\omega_{Bi} = 5,776 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$  e  $\omega_{Po} = 2,093 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ . Gráfico confeccionado utilizando o *software Gnuplot*.

Além do método analítico, foram utilizados dois métodos numéricos, o de Runge-Kutta de 4ª ordem e o de Monte Carlo.

A Figura 4.2 mostra um gráfico confeccionado utilizando o *software Gnuplot*. Ela exibe a dependência da densidade de átomos em função do tempo em segundos obtida pelo método numérico de Runge-kutta discutido no Capítulo 3.

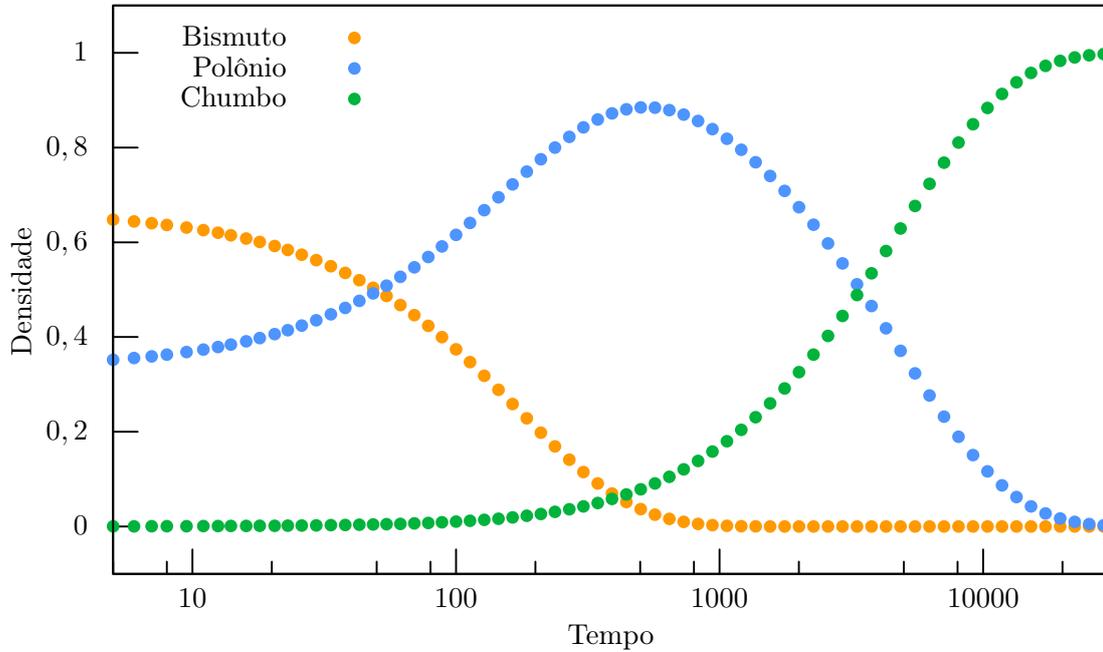


Figura 4.2: Mostra a dependência da densidade de átomos em função do tempo em segundos encontrada pelo método numérico de Runge-Kutta de 4ª ordem. As condições iniciais utilizadas foram:  $N_{Bi}(0) = 1000$ ,  $N_{Po}(0) = 500$  e  $N_{Pb}(0) = 0$ . O passo temporal utilizado no método foi  $dt = 0.00001$  s. As constantes de decaimento de cada espécie são  $\omega_{Bi} = 5,776 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$  e  $\omega_{Po} = 2,093 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ . Gráfico confeccionado utilizando o *software Gnuplot*.

A Figura 4.3 mostra um gráfico confeccionado utilizando o *software Gnuplot*. Ela apresenta a dependência da densidade de átomos em função do tempo em segundos obtida pelo método numérico de Monte Carlo discutido no Capítulo 3.

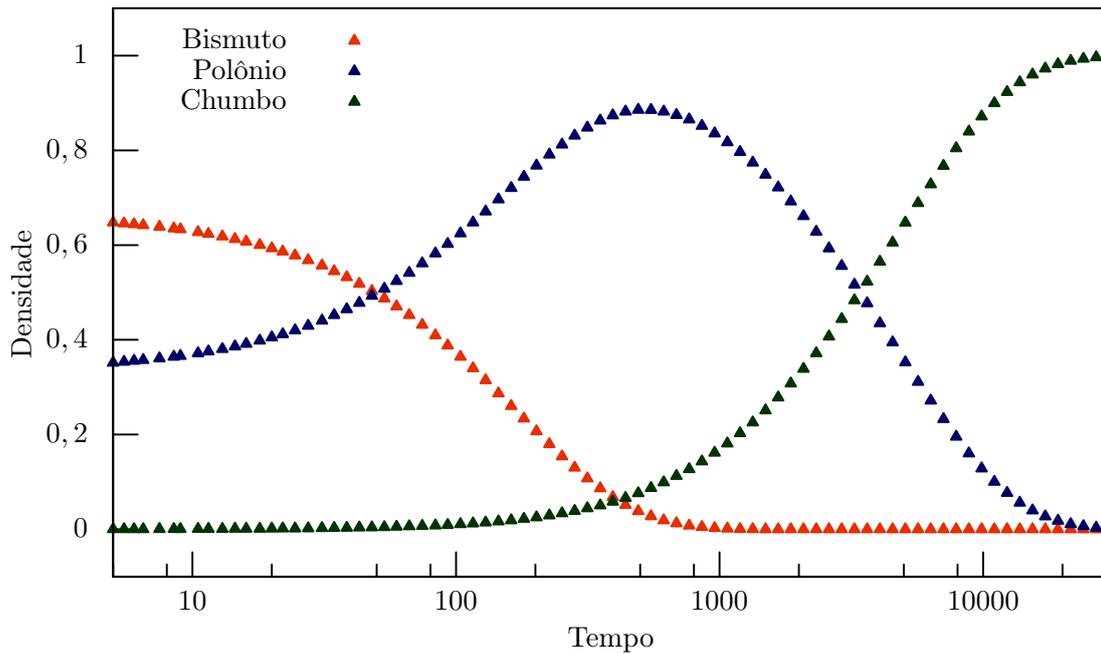


Figura 4.3: Mostra a dependência da densidade de átomos em função do tempo em segundos encontrada pelo método numérico de Monte Carlo. As condições iniciais utilizadas foram:  $N_{Bi}(0) = 100000$ ,  $N_{Po}(0) = 50000$  e  $N_{Pb}(0) = 0$ . As constantes de decaimento de cada espécie são  $\omega_{Bi} = 5,776 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$  e  $\omega_{Po} = 2,093 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ . Gráfico confeccionado utilizando o software *Gnuplot*.

Neste método numérico as condições iniciais foram ligeiramente diferentes, como é possível observar no programa em C criado. Utilizou-se 100000 átomos de Bismuto e 50000 de Polônio. Como os gráficos confeccionados utilizam a densidade de átomos de cada espécie e a proporção entre eles não mudou, o resultado obtido deve ser o mesmo. Neste caso utilizou-se um número maior de átomos para aumentar a precisão do resultado.

Para melhor analisar os métodos, foram plotados todos gráficos anteriores em um só, este se encontra na Figura 4.4.

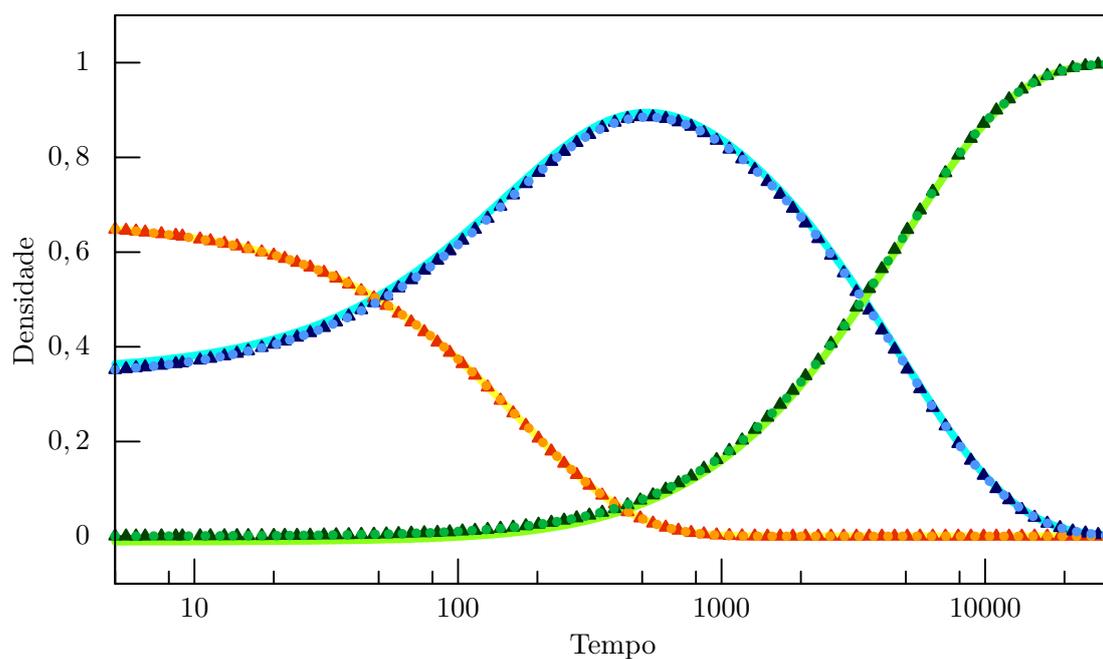


Figura 4.4: Mostra a dependência da densidade de átomos em função do tempo em segundos encontrada pelos diferentes métodos. No gráfico os pontos com formato triangular representam o método de Monte Carlo, os de formato circular representam o método de Runge-Kutta e a linha contínua representa a solução analítica. As curvas com cores em tons de vermelho representam a densidade de Bismuto, as com cores em tons de azul representam a densidade de Polônio e as com cores em tons de verde representam a densidade de Chumbo. Gráfico confeccionado utilizando o *software Gnuplot*.

# Considerações Finais

Neste trabalho foi apresentado solução analítica e soluções numéricas para o problema do decaimento radioativo.

No Capítulo 1 foi discutido os principais pontos da teoria dos decaimentos radioativos e da composição dos núcleos atômicos.

O Bismuto ( $^{210}\text{Bi}$ ) decai em Polônio ( $^{210}\text{Po}$ ) por meio da emissão de uma partícula  $\beta$ . O Polônio sofre o mesmo decaimento se transformando em Chumbo ( $^{210}\text{Pb}$ ). Esses decaimentos são regidos por equações diferenciais, que foram resolvidas por 3 métodos, um analítico e dois numéricos. O analítico foi discutido no Capítulo 2 e os numéricos no Capítulo 3. Os resultados encontrados para o decaimento radioativo foram expressos no Capítulo 4.

Neste trabalho, a equação diferencial estudada possui uma solução analítica (a qual nem sempre é possível obter para outras EDOs). Os métodos numéricos estudados trazem soluções numéricas de forma simples e coerente para qualquer equação diferencial. Quando associados com os métodos computacionais, que otimizam o processo, tornam-se ferramentas extremamente úteis na Física. Assim, podemos aplicar os métodos discutidos em outras equações diferenciais, obtendo um resultado satisfatório.

# Apêndice A

## Código em Linguagem C

### A.1 Método de Runge-Kutta

```
1 //Compilacao: gcc (nome do programa) -lm
2 //Execucao : ./a.out > data.dat
3
4 #include <stdio.h>
5 #include <stdlib.h>
6 #include <math.h>
7
8 /* Numero inicial de atomos */
9 #define N_Bi_O 1000.0
10 #define N_Po_O 500.0
11 #define N_Pb_O 0.0
12
13 /* Densidade de atomos */
14 #define D_Bi_O N_Bi_O/(N_Bi_O+N_Po_O+N_Pb_O)
15 #define D_Po_O N_Po_O/(N_Bi_O+N_Po_O+N_Pb_O)
16 #define D_Pb_O N_Pb_O/(N_Bi_O+N_Po_O+N_Pb_O)
17
18 /* Tempo de meia vida do Bismuto e do Polonio em horas */
19 #define T_Bi_2 120
20 #define T_Po_2 3312
21
22 /* Probabilidade do Bismuto e do Polonio em horas */
23 #define P_Bi (log(2)/T_Bi_2)
24 #define P_Po (log(2)/T_Po_2)
25
26 #define to 0.0 // Tempo inicial
27 #define dt 0.00001 // Intervalo de tempo
28 #define tf 1e4 // Tempo final
29 #define np 79 // Numero de pontos
30 /* Passo em escala logaritmica */
31 #define q pow((tf/dt), (1.0/(np-1)))
32
33 double f(double x, double y, double t){
```

```

34 // dN_Bi/dt= -P_Bi*N_Bi
35 // dx/dt = f(x, t)
36 // x-> atomos de bismuto
37 return -(P_Bi)*x;
38 }
39
40 double g(double x, double y, double t){
41 // dN_Po/dt= -P_Po*N_Po + P_Bi*N_Bi
42 // dy/dt = f(x, y, t)
43 // y-> atomos de Polonio
44 return -(P_Po)*y+(P_Bi)*x;
45 }
46
47 int main(int argc, char **argv){
48 int i, j;
49 double x, y, z, t;
50 double k1, k2, k3, k4, c1, c2, c3, c4;
51 double a=dt;
52
53 /* Condicoes iniciais */
54 x= D_Bi;
55 y= D_Po;
56 z= D_Pb;
57 t= to;
58 FILE *file= fopen("rk4.dat", "w");
59 fprintf(file, "%e %e %e %e\n", t, x, y, z);
60
61 /* Evolucao do sistema */
62 for(i= 0; i< np; i++){
63 for(j= 0; j< a; j++){
64 /* k-> passo RK4 para os atomos de Bismuto */
65 /* c-> passo RK4 para os atomos de Polonio */
66 k1= f(x, y, t);
67 c1= g(x, y, t);
68
69 k2= f(x+0.5*dt*k1, y+0.5*dt*c1, t+0.5*dt);
70 c2= g(x+0.5*dt*k1, y+0.5*dt*c1, t+0.5*dt);
71
72 k3= f(x+0.5*dt*k2, y+0.5*dt*c2, t+0.5*dt);
73 c3= g(x+0.5*dt*k2, y+0.5*dt*c2, t+0.5*dt);
74
75 k4= f(x+dt*k3, y+dt*c3, t+dt);
76 c4= g(x+dt*k3, y+dt*c3, t+dt);
77
78 x+= dt*(k1+2.0*k2+2.0*k3+k4)/6.0;
79 y+= dt*(c1+2.0*c2+2.0*c3+c4)/6.0;
80 t+= dt;
81 }

```

```

82 z= 1-(x+y);
83 /* Impressao dos dados com espacamento em escala log */
84 if(t>=a){
85 fprintf(file , "%e %e %e %e\n", t, x, y, z);
86 a*=q;
87 }
88 }
89 fclose(file);
90 return

```

## A.2 Método de Monte Carlo

```

1 // Compilacao: gcc (nome do programa) -lgsl -lgslcblas -lm
2 // Execucao: ./a.out
3 #include <stdio.h>
4 #include <stdlib.h>
5 #include <math.h>
6 #include <gsl/gsl_rng.h>
7 #include <time.h>
8
9 /* Numero inicial de atomos de Bismuto, Polonio e Chumbo */
10 #define N_Bi_O 100000
11 #define N_Po_O 50000
12 #define N_Pb_O 0
13
14 /* Tempo de meia vida do Bismuto e do Polonio em horas */
15 #define T_Bi_2 120
16 #define T_Po_2 3312
17
18 /* Probabilidade do Bismuto e do Polonio decair */
19 #define P_Bi (log(2)/T_Bi_2)*0.5
20 #define P_Po (log(2)/T_Po_2)*0.5
21
22 #define to 0.0 // Tempo inicial
23 #define dt 0.5 // Intervalo de tempo
24 #define tf 3e4 // Tempo final
25
26 /* Passo em escala logaritmica */
27 #define q pow((tf/dt), (1.0/(100-1)))
28
29
30 int main(int argc, char **argv){
31 int i, N_Bi, N_Po, N_Pb, N;
32 double t= to;
33 double a=dt;
34
35 while(a*q-a < dt){
36 a*=q;

```

```

37 }
38
39 /* Gerador de semente */
40 gsl_rng_default_seed= (argc == 2 ) ? atoi(argv[1]) : time(NULL)
    ;
41
42 gsl_rng *w= gsl_rng_alloc(gsl_rng_taus);
43
44
45 /* Condições iniciais */
46 N_Bi= N_Bi_O;
47 N_Po= N_Po_O;
48 N_Pb= N_Pb_O;
49
50 /* Evolução do sistema */
51 while(t < tf){
52 N= N_Bi;
53 for(i= 0; i< N; i++){
54 if(gsl_rng_uniform(w) < P_Bi){
55 N_Bi--;
56 N_Po++;
57 }
58 }
59 N= N_Po;
60 for(i= 0; i< N; i++){
61 if(gsl_rng_uniform(w) < P_Po){
62 N_Po--;
63 N_Pb++;
64 }
65 }
66 t+= dt;
67 /* Impressão dos dados com espaçamento em escala logaritmica */
68 if(t>= a){
69 printf("%e %e %e %e\n",t, 1.0*N_Bi/(N_Bi_O+N_Po_O+N_Pb_O),
70 1.0*N_Po/(N_Bi_O+N_Po_O+N_Pb_O),
71 1.0*N_Pb/(N_Bi_O+N_Po_O+N_Pb_O));
72 a*=q;
73 }
74 }
75 gsl_rng_free(w);
76 return 0;
77 }

```

# Bibliografia

- [1] Disponível em: <https://www.radioaktive-strahlung.org/radioaktivitaet/zerfall.htm>, página visitada em 09 de Junho de 2018. Acesso às 17:08.
- [2] Disponível em: <https://www.nobelprize.org/prizes/physics/1903/becquerel/biographical/>, página visitada em 16 de Setembro de 2018. Acesso às 17:47.
- [3] A. Chassot, *QUÍMICA NOVA NA ESCOLA- Raios X e Radioatividade*. 1995.
- [4] P. A. Tipler and R. A. Llewellyn, *Modern Physics*. W. H. Freeman and Company, 5th ed., 2008.
- [5] W. R. Hendee, *Monte Carlo Techniques in Radiation Therapy*. Taylor & Francis, 1<sup>a</sup> ed., 2013.
- [6] R. Eisberg and R. Resnick, *Física Quântica- Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos e Partículas*. Elsevier, 23<sup>a</sup> ed.
- [7] R. A. Serway, C. J. Moses, and C. A. Moyer, *Modern Physics*. 3<sup>a</sup> ed.
- [8] Disponível em: <https://www.youtube.com/watch?v=Lo8NmoDL9T8>, página visitada em 1 de Junho de 2018. Acesso às 23:34.
- [9] Disponível em: <https://www.youtube.com/watch?v=XWLVZjWon1Y>, página visitada em 27 de Maio de 2018. Acesso às 01:56.
- [10] P. A. M. Dirac, “The quantum theory of the electron,” *The Royal Society*, vol. 117, no. 778, pp. 610–625, 1928.
- [11] D. J. Griffiths, *Introduction to Elementary Particles*. Wiley, 2<sup>a</sup> ed., 1987.
- [12] S. T. Thornton and A. Rex, *Modern Physics for Scientists and Engineers*. 4<sup>a</sup> ed.
- [13] T. L. Brown, H. E. Lemay, B. E. Bursten, C. J. Murphy, and P. M. Woodward, *Chemistry, the Central Science*. Pearson, 4<sup>a</sup> ed., 2012.
- [14] W. E. Boyce and R. C. DiPrima, *Elementary Differential Equations and Boundary Value Problems*. Wiley, 10<sup>a</sup> ed., 2012.
- [15] G. E. Forsythe, M. A. Malcolm, and C. B. Moler, *Computer Methods for Mathematical Computations*. Prentice-Hall, 1<sup>a</sup> ed., 1977.
- [16] E. Hairer, S. P. Norsett, and G. Wanner, *Solving Ordinary Differential Equations I*. Springer, 2<sup>a</sup> ed., 2008.

- [17] PMR3401, *Mecânica Computacional para Mecatrônica*. Notas de aula.
- [18] S. Bueno, *Minidicionário da Língua Portuguesa*. FTD, 2007.
- [19] J. Kromkovic, *Algorithmic Adventures, from Knowledge to Magic*. Springer, 1<sup>a</sup> ed., 2009.
- [20] A. López-Castillo and J. C. de Souza Filho, *QUÍMICA NOVA*. 2007.
- [21] B. F. de Oliveira, *Métodos de Aproximação em Física*. 4 Março de 2018, 18 Julho de 2018. Notas de aula não disponibilizadas para cópia.