2007 International Nuclear Atlantic Conference - INAC 2007 Santos, SP, Brazil, September 30 to October 5, 2007 ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE ENERGIA NUCLEAR - ABEN

ISBN: 978-85-99141-02-1

# MODELAGEM COMPUTACIONAL DETERMINÍSTICA DO FENÔMENO DE DECAIMENTO RADIOATIVO

## **Hugo Rafael Dias<sup>1</sup> e Ricardo C. Barros<sup>2</sup>**

Departamento de Modelagem Computacional - Instituto Politécnico
Universidade do Estado do Rio de Janeiro
Rua Alberto Rangel, s/n
28630-050 Nova Friburgo, RJ

<sup>1</sup> hugorafael@oi.com.br

<sup>2</sup> rcbarros@pq.cnpq.br

#### **RESUMO**

Com base no modelo matemático determinístico, desenvolvemos uma modelagem computacional do problema da radioatividade, e entre os objetivos deste projeto de iniciação científica, enfatizamos o desenvolvimento de um aplicativo computacional, isto é, construção de algoritmos, programação e apresentação de resultados, para esta modelagem matemática. O aplicativo modela o decaimento radioativo simples ou composto usando métodos numéricos clássicos, como o implícito trapezoidal, e os métodos numéricos mais recentes, que são livres de erro de truncamento temporal, importando em mais segurança nos valores calculados, assim como mais rapidez e eficiência na obtenção dos resultados.

## 1. INTRODUÇÃO

Núcleos, em seu estado natural, podem emitir radiações. Tal fato foi descoberto há mais de um século, em 1896, por Henri Becquerel, e o entendimento do fenômeno se deve a pesquisas conduzidas pelo casal Pierre e Marie Curie. Mais tarde, Joliot e Curie verificaram que a radioatividade pode também ser artificialmente induzida. Todo e qualquer processo de emissão de radiação por parte do nuclídeo radioativo recebe o nome de desintegração nuclear ou decaimento radioativo.

Todos os processos de decaimento dependem única e exclusivamente da constante de decaimento  $\lambda$ , que é diferente para diferentes processos e é uma função das propriedades do núcleo radioativo.

#### 2. DECAIMENTO RADIOATIVO

O princípio do decaimento radioativo pode ser usado para estimar a idade cronológica de objetos sobre certas condições físicas. Uma outra aplicação importante da lei do decaimento radioativo é a núcleo-cosmocronologia, que consiste em estimar a idade do Universo, através da radioatividade de certos núcleos de vida média extremamente longa.

É um problema de valor inicial que se caracteriza por uma cadeia simples ou composta de decaimentos radioativos de acordo com a história de um núcleo-pai decair para um núcleo-filho, que é radioativamente estável ou não.

#### 2.1. Decaimento Radioativo Cadeia Simples

O decaimento radioativo simples pode ser modelado matematicamente por um problema de valor inicial que aparece como

$$\frac{dN}{dt} = -\lambda N \quad , \tag{1}$$

onde  $N_0 = N(0)$ .

A solução analítica do problema (1) é escrita como

$$N(t) = N_0 e^{-\lambda t} (2)$$

Alguns métodos numéricos clássicos, como o implícito trapezoidal [1], e métodos numéricos mais recentes, que são livres de erro de truncamento temporal, podem ser usados para resolver numericamente o problema (1), e implementados em códigos visando à modelagem computacional. A equação de diferença do convencional método numérico implícito trapezoidal é

$$N_{i+\frac{1}{2}} = \left(\frac{2 - \lambda h_i}{2 + \lambda h_i}\right) N_{i-\frac{1}{2}} . \tag{3}$$

A equação de diferença do recente método numérico implícito trapezoidal estendido é

$$N_{i+\frac{1}{2}} = \left(\frac{2 - \lambda \gamma_i h_i}{2 + \lambda \gamma_i h_i}\right) N_{i-\frac{1}{2}} ,$$
 onde  $\gamma_i = \frac{2tgh\left(\frac{\lambda h_i}{2}\right)}{\lambda h_i} .$  (4)

#### 2.2. Decaimento Radioativo em Cadeia Composta

Existem na natureza núcleos radioativos que decaem para núcleos-filhos, que por sua vez são também radioativos, e estes decaem para outro núcleo radioativo etc., até que se gere um núcleo estável, que é, o ponto terminal da cadeia de decaimentos sucessivos.

As abundâncias  $N_n$  dos núcleos da cadeia radioativa com M elementos são descritas pelo seguinte sistema de equações diferenciais ordinárias acopladas, também conhecidas por  $Equações\ de\ Bateman$ :

$$\frac{dN_1}{dt} = -\lambda_1 N_1$$

$$\frac{dN_2}{dt} = \lambda_1 N_1 - \lambda_2 N_2$$

$$\vdots$$

$$\frac{dN_n}{dt} = \lambda_{n-1} N_{n-1} - \lambda_n N_n$$

$$\vdots$$

$$\frac{dN_M}{dt} = \lambda_{M-1} N_{M-1}$$

onde  $\lambda_n$  é a constante de decaimento radioativo do núcleo n, que é um elemento arbitrário da cadeia. Note-se que o último elemento M é estável  $(\lambda_M = 0)$ .

### 3. MODELAGEM COMPUTACIONAL E RESULTADOS NUMÉRICOS

O aplicativo computacional foi desenvolvido na linguagem C++. As figuras 1 e 2 ilustram as telas principais da modelagem computacional para os casos de decaimento radioativo simples e em cadeia. O algoritmo do programa implementa os métodos numéricos desenvolvidos neste nosso projeto. A interface do programa é simples e facilitada com botões de acesso. A clareza e rapidez no procedimento de inserção de dados pelo usuário foram um dos principais objetivos da nossa modelagem computacional. Um outro objetivo foi minimizar erros provenientes de cálculos algébricos tediosos com a decorrente propagação de erros.

Na figura 1 é mostrado o ambiente do aplicativo para cálculo do decaimento em cadeia simples(tela principal), enquanto na figura é ilustrado o aplicativo no modo de decaimento em cadeia composta.

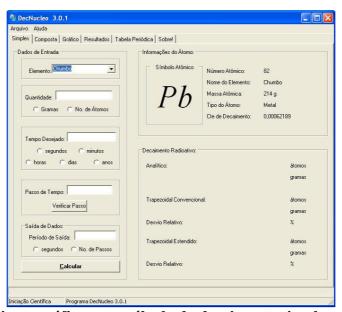


Figura 1. Ambiente gráfico para cálculo do decaimento simples. Tela principal.



Figura 2. Ambiente gráfico para cálculo do decaimento composto. Tela principal.

Nesta modelagem foi elaborado um algoritmo de controle de dados que gera em curto espaço de tempo os resultados numéricos, utilizando uma técnica conhecida como recursividade. Esta técnica calcula mais rapidamente os resultados, pois requer menos tempo de processamento, e não utiliza muito espaço da memória computacional para o processamento.

Na figura 3 temos uma tabela periódica eletrônica, implementada para facilitar o usuário quanto às características elemento químico a ser calculado, informando o isótopo que o programa calcula.

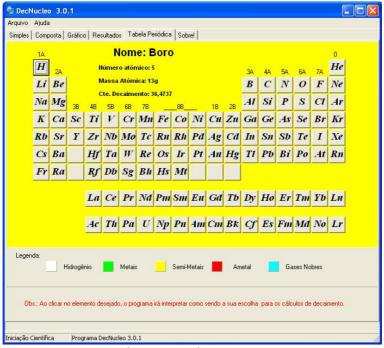


Figura 3. Tabela periódica eletrônica com dados dos elementos.

Usamos no aplicativos alguns dados, para testar a eficiência do mesmo. A tabela 1 mostra os valores obtidos para o isótopo 214 do elemento Chumbo, símbolo atômico Pb. Consideramos o número inicial de átomos ( $N_0$ ) igual a 2,813E23, utilizamos a constante de decaimento radioativo ( $\lambda$ ) do Chumbo igual a 0.0016667seg. desejamos conhecer a concentração no instante t=1200 segundos.

Tabela 1. Resultados do decaimento radioativo em cadeia simples.

Elemento: Chumbo - 214 (Pb), $N_0 = 2,813E23$ , $\lambda = 0.0016667$ , (t = 1200s)		
Método	Passo de	N(1200)
Numérico	Tempo	
Trapezoidal	0,1 s	3,80694305246753E22
Convencional		
Trapezoidal	0,1 s	3,80694307009332E22
Estendido		
Trapezoidal	10 s	3,80676680888974E22
Convencional		
Trapezoidal	10 s	3,80694307009332E22
Estendido		

#### 4. CONCLUSÕES

Foi alcançado o objetivo inicialmente proposto neste projeto; isto é, desenvolver um aplicativo seguro, rápido e que minimize erros. A próxima etapa do projeto será as atualizações no programa para que o mesmo possa fazer cálculos através dos métodos probabilísticos em cadeia simples e composta, futuramente numa versão do programa ele dirá qual o isótopo que está sendo calculado.

#### **AGRADECIMENTOS**

Agradecemos à UERJ, fonte financiadora, ao Professor e orientador Ricardo Barros, aos amigos Francisco de Assis, Filipe Caldas e as Bibliotecárias do IPRJ.

#### REFERÊNCIAS

- 1. BURDEN, R. L. AND FAIRES, D. J. *Numerical Analysis*. Brooks/Cole Publishing Company, California, USA, 1987
- 2. ENGE, H., Introduction to Nuclear Physics, Addison-Wesley Publishing Company, (1972).
- 3. ULTIMARA, T. Y., Química, FTD, São Paulo-Brasil (1998).
- 4. de Almeida, Waldir Martins, C++ Builder 6, Visual Books, Santa Catarina Brasil (2003).
- 5. Chung, K. C., *Introdução à Física Nuclear*, EdUERJ, Rio de Janeiro Brasil (2001).