

# NMMM: Radioaktivni Raspad

Josip Gregorić<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Fizički odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu

10. lipnja 2024.

## Sažetak

Pod pretpostavkom konstantne vjerojatnosti raspada u jedinici vremena  $\omega$ , razmatran je problem radioaktivnog raspada  $^{210}_{83}\text{Bi}$ , koji se dominantno raspada  $\beta^-$  raspadom u  $^{210}_{84}\text{Po}$ , koji se pak dominantno raspada emisijom  $\alpha$ -čestice. Problem je tretiran analitičkim, numeričkim (Runge Kutta 4, Newton-Raphson) i stohastičkim (Monte Carlo) metodama. Rezultati za brojeve čestica kao funkcije vremena zadovoljavajući su i međusobno se slažu. Također, određeno je kritično vrijeme  $t_{crit}$  pri kojem brzina proizvodnje  $\alpha$ -čestica postiže maksimum i napravljena usporedba numeričkog i analitičkog rezultata.

## 1. Uvod

Zakon radioaktivnog raspada postavili su još početkom 20. st. Rutherford i Soddy, pod pretpostavkom da se vjerojatnost radioaktivnog raspada (u jedinici vremena)  $\omega_X$  ne mijenja s vremenom

$$dN_X(t) = -\omega_X N_X(t)dt, \quad (1)$$

što vodi na

$$N_X(t) = N_X(0)e^{-\omega_X t}, \quad (2)$$

gdje  $N_X(0)$  predstavlja početni broj jezgara elementa  $X$ . Srednje vrijeme života jezgre tada je dano s

$$\tau_X(t) = \frac{1}{\omega_X}. \quad (3)$$

Ako pretpostavimo da se nestabilni element  $N_X$  raspada u drugi nestabilni element  $N_Y$ , dobivamo sustav vezanih diferencijalnih jednadžbi:

$$\frac{dN_X(t)}{dt} = -\omega_X N_X(t) \quad (4)$$

$$\frac{dN_Y(t)}{dt} = -\omega_Y N_Y(t) + \omega_X N_X(t). \quad (5)$$

Takav je slučaj upravo sa jezgrama  $^{210}_{83}\text{Bi}$ , koji se dominantno raspada  $\beta^-$  raspadom u  $^{210}_{84}\text{Po}$ , i samim polonijem, koji se pak dominantno raspada emisijom  $\alpha$ -čestice. Te dvije jezgre u daljnjem tekstu biti će predstavljene oznakama  $N_X$  i  $N_Y$ , respektivno.

Uz to, ne smijemo zaboraviti da postoji jednadžba koja opisuje prelazak jezgara polonija u  $\alpha$ -čestice u vremenu:

$$\frac{dN_\alpha(t)}{dt} = +\omega_Y N_Y(t). \quad (6)$$

Uz početne uvjete jezgara  $N_X(0)$ ,  $N_Y(0) = 0$  i  $\alpha$ -čestica  $N_\alpha(0) = 0$  vezani sustav rješiv je analitički i za preostale dvije veličine nosi rješenja:

$$N_Y(t) = N_X(0) \frac{\omega_X}{\omega_Y - \omega_X} (e^{-\omega_X t} - e^{-\omega_Y t}) \quad (7)$$

$$N_\alpha(t) = \frac{N_X(0)}{\omega_Y - \omega_X} (\omega_Y - \omega_X - e^{-\omega_Y t} + e^{-\omega_X t} \times (\omega_Y e^{\omega_Y t} - \omega_X e^{\omega_X t})), \quad (8)$$

pri čemu  $\omega_i$  predstavljaju pripadne frekvencije raspada za  $i$ -tu jezgru.

Zanima li nas vremenski trenutak u kojem proizvodnja  $\alpha$ -čestica dostiže svoj maksimum, zapravo nas zanima vremenski trenutak  $t_{crit}$  koji odgovara maksimumu brzine proizvodnje  $N_\alpha$ . A da bi brzina postigla maksimum, druga derivacija po vremenu mora iščezavati. Izjednačavanjem druge derivacije  $N_\alpha(t)$  iz (8) sa nulom, imamo

$$t_{crit} = \frac{\ln(\frac{\omega_X}{\omega_Y})}{\omega_X - \omega_Y}, \quad (9)$$

koje ne ovisi o početnom broju jezgara.

## 2. Numeričke i stohastičke metode

Analitičko rješenje smisleno je i zadovoljavajuće, no vrijedi iskoristiti naučeno i pristupiti problemu sa numeričke i stohastičke strane. Konkretno, rješavati ćemo već navedeni sustav diferencijalnih jednadžbi pomoću Runge-Kutta 4 i Monte Carlo metoda.

### 2.1. Numerička metoda: Runge-Kutta 4

Runge-Kutta 4 (RK4) metoda jedna je od najpoznatijih numeričkih metoda za rješavanje sustava diferencijalnih jednačbi. U suštini, radi se o spoju Taylorovog razvoja analitičke funkcije u red i Eulerove metode. Dok kompletan izvod same metode preskačemo, navodimo gotov "recept" za njezinu provedbu:

$$\begin{aligned}\frac{dy}{dt} &= f(y, t) \\ h &= \frac{t_{max} - t_{min}}{N} \\ k_1 &= hf(t_n, y_n) \\ k_2 &= hf\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2}\right) \\ k_3 &= hf\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_2}{2}\right) \\ k_4 &= hf(t_n + h, y_n + k_3) \\ y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4),\end{aligned}\quad (10)$$

pri čemu je  $h$  numerički vremenski interval,  $t_{max} - t_{min}$  promatrani vremenski interval, a  $N$  broj koraka koji je promjenjiv parametar. Globalna greška odsijecanja ide kao  $h^4$ . Bitno je spomenuti da se ova metoda odlikuje optimalnim omjerom preciznosti i kompleksnosti i pruža stabilno rješenje.

Identificiranjem pripadnih funkcija s desnih strana jednačbi (4) i (5), metoda se provodi za  $N_X(t)$  i  $N_Y(t)$  i daje traženo numeričko rješenje. Dio priloženog koda koji se tiče ove metode može se naći unutar funkcija **calculateRK4Decay**, **calculate\_f\_Nx**, i **calculate\_f\_Ny**.

### 2.2. Numerička metoda: Newton-Raphson

Newton-Raphson metoda numerička je metoda za pronalaženja nultočke funkcije. Temelji se na razvoju analitičke funkcije u Taylorov red oko pretpostavljenje nultočke, a geometrijski se interpretira kao povlačenje uzastopnih tangenti dok vrijednosti nultočke ne konvergira do željene preciznosti. Iterativne je prirode i rekurzija za nultočku glasi

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \quad (11)$$

gdje je  $f'(x_n)$  derivacija razmatrane funkcije u točki  $x_n$ . Tražena preciznost postavljena je na  $10^{-6}$ , a maksimalni dozvoljeni broj iteracija je 1000. Također, konvergencija metode ovisi o početnoj probnoj nultočki  $x_0$ , koja u našem slučaju, kako će biti rečeno u sekciji 3.4., iznosi  $x_0 = 5$ . Ponešto izmijenjeni dio računalnog koda koji se tiče ove metode preuzet je iz repozitorija kolegija *Numeričke Metode i Matematičko Modeliranje* (autor doc. dr.

sc. Petar Marević) i mogu se naći u C++ datoteci pod naslovom **newtonraphson.cpp**, uz pripadnu **newtonraphson.h** header datoteku.

### 2.3. Stohastička metoda: Monte Carlo

Monte Carlo metoda vjerojatno je najpoznatija matematička metoda stohastičke prirode. Konkretna provedba metode ovisi o konačnom cilju, ali uvijek podrazumijeva generaciju nasumičnih brojeva po zakonu neke distribucije. Naravno, prešutna pretpostavka je da promatrani sustav posjeduje asociranu *funkciju raspodjele vjerojatnosti*.

U kontekstu našeg problema (vezane diferencijalne jednačbe za tri jezgre u kontekstu radioaktivnog raspada), Monte Carlo metoda svodi se na sljedeći algoritam:

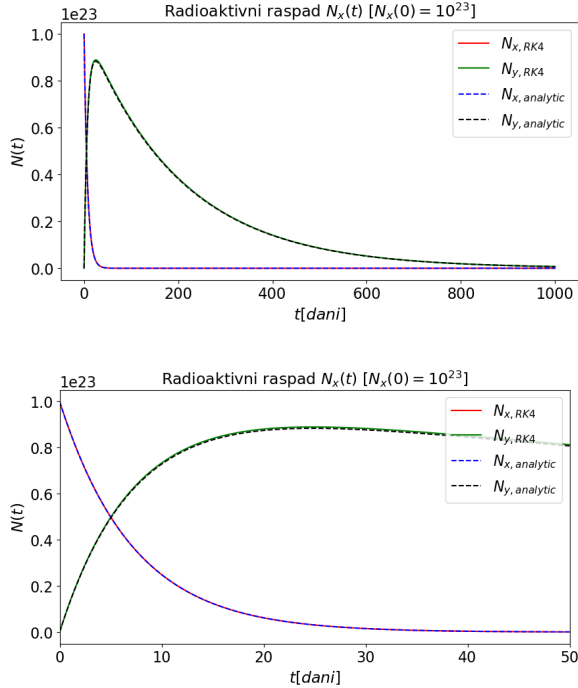
1. Napraviti petlju  $A$  koja se ponavlja unaprijed zadanih  $N_{cycles}$  puta, pri čemu svaki prolazak predstavlja jedan od ciklusa preko kojih se rezultati Monte Carlo metode uprosječuju.
2. Napraviti prvu podpetlju  $B$  unutar  $A$  koja se ponavlja unaprijed zadanih  $M$  puta, pri čemu svaki prolazak predstavlja jedan od ukupno  $M$  koraka. Broj koraka podesiv je parametar i o njemu ovisi konačna preciznost metode.
3. Unutar prve podpetlje  $B$  napraviti petlju  $C$  koja se "kreće" po svim česticama (kojih je u početku  $N_X(0)$ ). Generirati uniformno distribuirani slučajni broj u intervalu  $x \in [0, 1]$ . Ako je slučajni broj manji od vjerojatnosti raspada prve jezgre  $h\omega_X$ , smanjiti broj čestica  $N_X$  za jedan, i povećati broj čestica  $N_Y$  za jedan. Pritom je  $h = (t_{max} - t_{min})/M$ .
4. Unutar prve podpetlje  $B$  napraviti zasebnu petlju  $D$  koja je konstruirana na način analogan onom koji je opisan u 3., ali odnosi se na jezgre  $N_Y$ . Generirani slučajni broj je  $y \in [0, 1]$ , a u slučaju događaja raspada smanjujemo broj  $N_Y$ , a povećavamo broj  $\alpha$ -čestica  $N_\alpha$ .
5. Pri izlasku iz petlje po koracima kumulativnom broju svake od čestica u određenom vremenskom trenutku pridodati broj preostalih (dobivenih) čestica podijeljen sa brojem ciklusa (uprosječenje po ciklusima).
6. Nakon izlaska iz petlje  $A$ , ispisati konačne rezultate u željenom obliku.

Napomenimo još jednom da preciznost metode ovisi o veličini vremenskog koraka  $h$  koji je definiran brojem iteracija  $M$  i njemu obrnuto proporcionalan. Dio priloženog koda koji se tiče ove metode može se pronaći unutar funkcija **calculate\_MonteCarloDecay** i **calculate\_random\_number**.

### 3. Rezultati i usporedba

#### 3.1. Numerički rezultati

Na način opisan u (2.1) implementirana je RK4 metoda i sustav jednadžbi (4) i (5) numerički je izvrijednjen za  $N_X(0) = 10^{23}$  u vremenu  $t \in [0, 10^3]$ . Broj numeričkih intervala je  $N = 10^4$ , tj. vremenski korak iznosi  $h = 0.1$ . Vremenska jedinica je dan. Rezultati su uspoređeni sa analitičkim i prikazani na Slici 1.

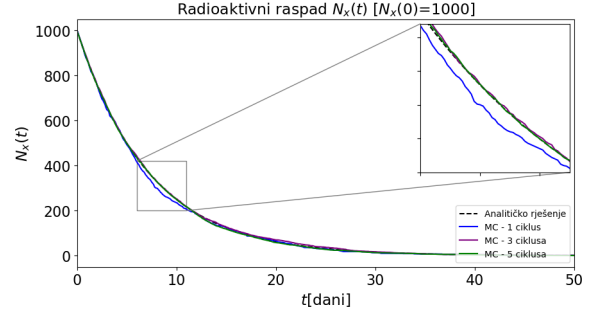


**Slika 1:** Numeričko rješenje za radioaktivni raspad jezgara  $N_X$  i  $N_Y$  u vremenu dobiveno RK4 metodom. Crtkane linije predstavljaju analitičko rješenje. Drugi graf prikazuje istu ovisnost u kraćem vremenskom intervalu.

Na grafovima je vidljivo zadovoljavajuće slaganje numeričkog i analitičkog rješenja za broj koraka  $N = 10^4$ .

#### 3.2. Stohastički rezultati

Na način opisan u (2.3) iskorišten je Monte Carlo algoritam i sustav jednadžbi (4), (5) i (6) stohastički je izvrijednjen za različite vrijednosti  $N_X(0)$  i za različit broj ciklusa. Slika 2. prikazuje usporedbu stohastičkog i analitičkog rješenja za  $N_X(t)$  pri broju ciklusa  $N_{cycles} = 1, 3, 5$ . Vidljivo je da već za  $N_{cycles} = 3$  stohastičko rješenje zamjetno konvergira prema analitičkom. Broj ciklusa u principu može se proizvoljno povećati, ali je ograničen dostupnom računalnom moći.

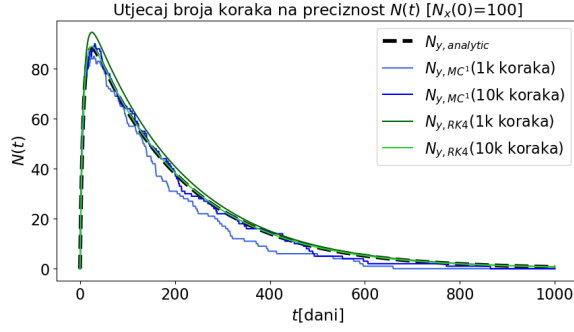


**Slika 2:** Stohastičko rješenje za  $N_X(t)$  dobiveno Monte Carlo metodom. Crtkana linija predstavlja analitičko rješenje, a linije različitih boja prosječne vrijednosti dobivene za različit broj Monte Carlo ciklusa. Vidljivo je da već za  $N_{cycles} = 3$  stohastičko rješenje zamjetno konvergira prema analitičkom. Broj ciklusa može se povećavati u skladu s tehničkim mogućnostima korištenog računala.

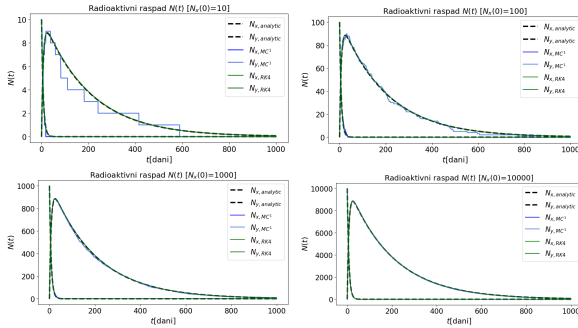
#### 3.3. Usporedba rješenja

Nakon individualnog pregleda rješenja, rezultati su međusobno uspoređeni. Prije svega, na primjeru ovisnosti  $N_Y$  o vremenu, za obje metode ispitan je utjecaj broja numeričkih koraka na preciznost konačnog rješenja. Slika 3. prikazuje različite krivulje dobivene za  $N = 10^3, 10^4$  (broj koraka u numeričkoj RK4 metodi) i  $M = 10^3, 10^4$  (broj koraka u stohastičkoj Monte Carlo metodi). Iz grafičkog prikaza razvidno je da je broj koraka, tj. uzeti vremenski interval  $h$  od velike važnosti za konačnu preciznost. Uz to, možda bi se moglo reći da on više utječe na stohastičko nego na numeričko rješenje. Bitno je napomenuti da je promatrano Monte Carlo rješenje dobiveno iz samo jednog ciklusa, jer se smatra da ono najbolje pokazuje "sirovu" moć ove metode. Daljnjim uprosječivanjem proizvoljno mnogo puta lako je dobivenu krivulju "izravnati".

Potom je ispitano međusobno slaganje različitih rješenja u ovisnosti o početnom broju čestica  $N_X(0) = 10, 10^2, 10^3, 10^4$ . Navedena usporedba prikazana je na Slici 4. Iz grafičkog prikaza vidljivo je da preciznost Monte Carlo metode (unutar jednog ciklusa) značajno raste s početnim brojem jezgara  $N_X(0)$ . To je i za očekivati, jer veći broj čestica znači veći broj iteracija u podpetljama Monte Carlo metode, odnosno veći broj provjera stohastičkog uvjeta o vjerojatnosti raspada. U suštini, to je razlog zbog kojeg je metoda preciznija u višedimenzionalnim problemima (jer više simulacija znači bolju konačnu preciznost). S druge strane, numerička RK4 metoda ne mijenja se s promjenom početnog uvjeta. To je i očekivano, jer je metoda determinističke prirode i ne uključuje nikakve simulacije.



**Slika 3:** Utjecaj broja numeričkih koraka na preciznost numeričkog (zeleno) i stohastičkog (plavo) rješenja u odnosu na analitičko (crno). Vidljivo je da broj koraka zamjetno utječe na konačnu preciznost. Eksponent 1 pri oznaci Monte Carlo metode označava rješenje dobiveno iz samo jednog ciklusa.



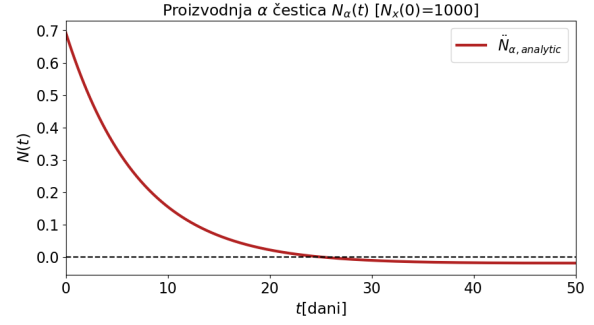
**Slika 4:** Međusobno slaganje analitičkog, numeričkog i stohastičkog rješenja za različite početne brojeve jezgara  $N_X(0) = 10, 10^2, 10^3, 10^4$ . Vidljivo je da je preciznost Monte Carlo metode proporcionalna početnom broju jezgara. Napomenimo da je broj numeričkih koraka u obje metode  $N = M = 10^4$ .

### 3.4. Maksimalna proizvodnja $\alpha$ -čestica: usporedba rješenja

Kako je opisano u teorijskom uvodu, zanima nas trenutak u kojem proizvodnja  $\alpha$ -čestica postiže maksimum. To je ekvivalentno traženju vremena  $t_{crit}$  za koje druga derivacija broja čestica bude jednaka nuli, što prikazuje Slika 5.<sup>1</sup>

U tu svrhu primijenjena je Newton-Raphsonova metoda iz odjeljka (2.2) i numerički su izvršeni rezultati  $t_{crit}$  za različite početne uvjete  $N_X(0)$ . Rezultati su izloženi u Tablici 1. Vrijednost kritičnog vremena dobivena analitičkom formulom (9) iznosi  $t_{crit}^{AN} = 24.8283$  dana, a kao početna probna nultočka uzeta je  $x_0 = 5$ .

<sup>1</sup>Trivijalna nultočka druge derivacije je pozitivna beskonačnost, ali takvo rješenje nam očito nije od interesa, jer se radi o minimumu brzine proizvodnje.



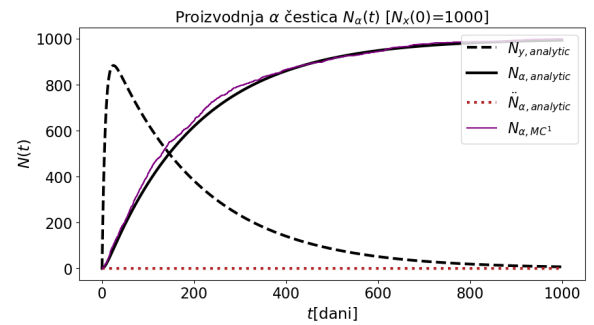
**Slika 5:** Grafički prikaz druge derivacije funkcije broja  $\alpha$ -čestica  $N_\alpha(t)$ . Skica numeričkog problema koji rješavamo dobra je ideja kako bismo mogli potvrditi dobiveni rezultat.

$N_X(0)$	$t_{crit}^{NR}$ [dani]
10	24.8148
100	24.8283
1000	24.8283
10000	24.8283

**Tablica 1:** Numerički rezultati kritičnog vremena izvršeni Newton-Raphsonovom metodom za različite početne brojeve jezgara  $N_X(0)$ .

Vidljivo je slaganje numeričkog rješenja sa analitičkim za sve slučajeve osim onog kada je  $N_X(0) = 10$ . Kako će biti rečeno u Zaključku, čini se da u tom slučaju Newton-Raphsonova metoda ne dostiže željenu granicu preciznosti.

Na Slici 6. uspoređeni su stohastički i analitički rezultat za funkciju  $N_\alpha(t)$ , a uz krivulju druge derivacije, prikazana je i funkcija  $N_Y(t)$ .



**Slika 6:** Analitički (crno) i stohastički (ljubičasto) rezultat za funkciju  $N_\alpha(t)$ . Prikazana je i njena druga derivacija (crveno), kao i funkcija  $N_Y(t)$  (crtkano crno).

## 4. Zaključak

Osvrnimo se sada kratko na dobivene rezultate. Općenito, možemo biti zadovoljni sa dobrim slaganjem analitičkog, numeričkog i stohastičkog

rješenja vezanih sustava diferencijalnih jednadžbi. Uspješno smo demonstrirali preciznost i stabilnost RK4 metode, ovisnost preciznosti Monte Carlo metode o broju ciklusa preko kojih uprosječujemo rezultat, veliki utjecaj odabranog numeričkog vremenskog koraka  $h$ , kao i činjenicu da preciznost Monte Carlo metode raste s početnim uvjetom  $N_X(0)$ .

Numerički rezultat kritičnog vremena  $t_{crit}$  generalno se slaže s analitičkim. Izuzetak je slučaj kada  $N_X(0) = 10$ , a ta anomalija može biti popravljen povećavanjem maksimalnog broja iteracija Newton-Raphsonove metode za, recimo, faktor deset.

Sve u svemu, ova vježba zorno demonstrira moć i primjenjivost numeričkih i stohastičkih metoda u kontekstu nešto praktičnijih problema.