2024-II Simulación #2

Modelo Probabilístico de Decaimiento Nuclear

Estudiantes: Andrés Felipe Pinzón Harker, apinzonh@unal.edu.co
Nicolás Coronado, ncoronado@unal.edu.co

Esta es la solución propuesta para la clase de Instrumentación Nuclear a cargo del profesor L.F. Cristancho, respecto a la segunda simulación del modelo probabilístico sobre el decaimiento nuclear. Se solucionará en 2 apartados: simulación como **distribución exponencial** y simulación como **distribución binomial**.

Parte I: Distribución Exponencial

La probabilidad de que un núcleo sobreviva sin decaer sigue una distribución exponencial, desde el instante $t = 0$ hasta el tiempo t sin unidades es 1.

$$S(t) = \exp(-\Gamma t) \tag{1}$$

con Γ la probabilidad de decaimiento por unidad de tiempo. Por lo tanto, la densidad de probabilidad $P(t)$ para que un núcleo sobreviva el tiempo t es

$$P(t) = S(t)\Gamma \tag{2}$$

Se prueba efectivamente que corresponde a una función de densidad de probabilidad integrando en todo su dominio

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty P(t)\,dt &= \int_0^\infty S(t)\Gamma\,dt = \int_0^\infty \exp(-\Gamma t)\Gamma \\
&= \Gamma \int_0^\infty \exp(-\Gamma t)\,dt = \Gamma \left[\frac{\exp(-\Gamma t)}{-\Gamma}\right]_0^\infty \\
&= \Gamma \left(0 - \frac{1}{-\Gamma}\right) == \Gamma \left(\frac{1}{\Gamma}\right) = 1
\end{aligned}$$

Utilice esta densidad de probabilidad $P(t)$ para simular el decaimiento nuclear . La primera parte se basa en esta definición de densidad de probabilidad para simular el decaimiento radiactivo.

> **Problema 1: Núcleo elegido**
>
> Decida el núcleo del cual quiere simular su decaimiento. Tal elección fija el valor de Γ, τ.

Se tomará el núcleo de Cobalto-60 (^{60}Co) debido a la importancia en aplicaciones de radio terapia en la física médica. Las propiedades del núcleo se exponen a continuación:

Tiempo semivida (Tomado de Bé et al. (2006))

$$T_{1/2} = 5.2711(8)\,\mathrm{a} \tag{3}$$

El cálculo de la constante de semidesintegración Γ y la vida media τ se determinan como (tomado de Rutherford and Soddy (1903)):

$$T_{1/2} = \tau \ln(2) \qquad\qquad \Gamma = \frac{1}{\tau} \tag{4}$$

Resultando a partir del dato 3 en los parámetros:

$$\tau = 7.6046(12)\,\mathrm{a} \qquad \Gamma = 0.131500(20)\,\mathrm{a}^{-1} \tag{5}$$
$$\tau = (2.77567(42) \times 10^{3}))\,\mathrm{d} \qquad \Gamma = (3.60272(36) \times 10^{-4})\,\mathrm{d}^{-1} \tag{6}$$
$$\tau = (2.39818(36) \times 10^{8}))\,\mathrm{s} \qquad \Gamma = (4.16982(63) \times 10^{-9})\,\mathrm{s}^{-1} \tag{7}$$

Problema 2: Periodo Δt

Una vez elegido el núcleo, podrá elegir la escala Δt de discretización del tiempo. Es decir, va a suponer que cada "toma de datos" dura cuánto tiempo Δt?

Elegimos el periodo de tiempo tal que nos de una cantidad razonable del promedio de decaimientos. Suponiendo una distribución *Poisson*, para una cantidad usual de hasta 15 g en un componente de radioterapia de radiación ∼555 TBq (tomado de **?**).

$$N = \frac{(15\,\mathrm{g})(6.022 \times 10^{23})}{60\,\mathrm{g}} = 1.5 \times 10^{23} \tag{8}$$

Donde N es el número de núcleos a considerar en esa muestra. A partir del promedio de la probabilidad dado por $\mu = Np = N\Gamma\Delta t$, buscamos un tiempo tal que quede en las miles unidades de núcleo la probabilidad de desintegración promedio. Siendo así, buscaremos $\Delta t \approx 10^{-11}\,\mathrm{s}$, es decir, pueda ser $\boldsymbol{\Delta t = 10\,\mathrm{ps}}$ tal que $\mu = 6150$ núcleos.

El criterio previo nos permite un estudio práctico en un contexto diferente de aplicación, si estudiamos el comportamiento de decaimiento a partir de la consideración de desintegración total (*tiempo significativo* discutido después), utilizando el criterio general $5\tau \approx 38\,\mathrm{a}$, luego valdría considerar una partición de este total visible en el histograma posteriormente propuesto.

Por ejemplo, en el rango en segundos estaría en el orden de $\sim 10^{9}\,\mathrm{s}$, entonces en la práctica de simulación valdría considerar un rango de división que sea computablemente eficiente de hasta $\boldsymbol{\Delta t = 100\,\mathrm{d}}$ y con ello tener del orden de $\sim 10^{6}\,\mathrm{d}$ (eventos).

Problema 3: Tiempo significativo

Decida hasta qué tiempo t_f va a considerar que todavía hay probabilidad de decaimiento significativa. Puede, por ejemplo, basado en algún criterio, decidir que el tiempo final sucede después de cierto número n de veces la vida media,

$$t_f = n\tau.$$

El tiempo final t_f se define como el tiempo en el cual la probabilidad de que un núcleo no se haya decaído es suficientemente pequeña. Usamos el criterio de la vida media para determinar este tiempo, donde típicamente se considera que después de 5τ la probabilidad de que el núcleo sobreviva es muy baja. Para Cobalto-60:

$$t_f = 5\tau = 5 \times 7.6046(12)\,\mathrm{a} = 38.0230(60)\,\mathrm{a}$$

Esto corresponde a un rango de tiempo en el que la mayor parte de los núcleos se habrán desintegrado. En términos de días, esto es:

$$t_f = (1.38784(22) \times 10^4)\,\mathrm{d}$$

Para simular el decaimiento, se puede usar la densidad de probabilidad

$$P(t) = S(t)\,dt = \Gamma e^{-\Gamma t}\,dt$$

donde $S(t)$ es la probabilidad de que un núcleo sobreviva hasta el tiempo t, y $P(t)$ es la probabilidad de que decaiga en el siguiente intervalo de tiempo. Con la discretización en Δt, se puede realizar una simulación por pasos, calculando la probabilidad de decaimiento en cada intervalo.

El número de eventos de decaimiento en cada intervalo de tiempo dependerá de la constante de decaimiento Γ y de la cantidad total de núcleos presentes. Con $N = 1.5 \times 10^{23}$ átomos de Cobalto-60 y la elección de Δt, es posible calcular la cantidad de desintegraciones promedio en cada intervalo de tiempo.

> **Problema 4: Función Acumulativa**
>
> Construya la función acumulativa. Grafíquela en forma de histograma. Use para el ancho de la barra del histograma el valor de Δt que definió en el punto 2.

La función acumulativa $F(t)$ de la función de densidad de probabilidad $P(t)$ para el tiempo en días se calcula en base a una partición de $\Delta t = 100\,\mathrm{d}$ y se normaliza a 1. Se verifica el comportamiento requerido en la gráfica a continuación

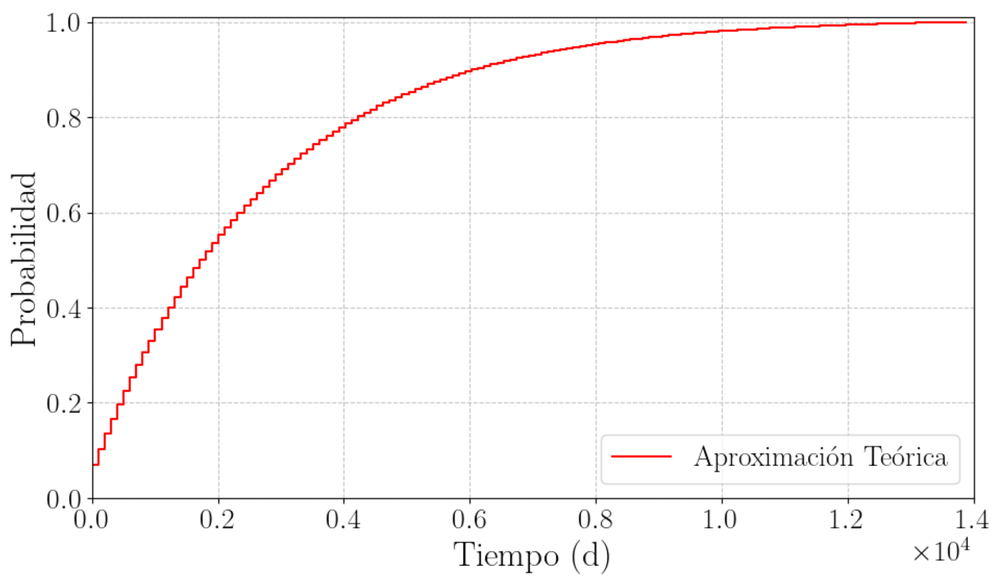


Figura 1: Función Acumulativa de Probabilidad con $\Delta t = 100\,\mathrm{d}$.

La función acumulativa permitirá encontrar el rango de valores donde la variable aleatoria del método Montecarlo se encontrará.

> **Problema 5: Histograma**
>
> Diseñe el programa con la siguiente estrategia: Para $N(t = 0)$ núcleos, decida núcleo por núcleo en qué momento decae y forme el histograma con el número de núcleos que decayeron en cada lapso de tiempo.

Para diseñar un programa que siga la estrategia de decidir núcleo por núcleo cuándo decae, debemos simular el proceso de decaimiento individual de cada núcleo, calculando el tiempo de decaimiento de cada uno y luego agrupando esos tiempos en intervalos de tiempo discretos para formar el histograma.

Pasos del Diseño

1. Decidir el momento de decaimiento de cada núcleo: Para cada núcleo $N(t = 0)$, vamos a decidir un tiempo de decaimiento aleatorio según una distribución exponencial, utilizando la fórmula:

$$t_{\text{decay}} = -\frac{\ln(U)}{\Gamma}$$

donde U es un número aleatorio entre 0 y 1, y Γ es la constante de decaimiento del núcleo (en este caso de Cobalto-60).

2. Acumular los tiempos de decaimiento: Una vez que tenemos los tiempos de decaimiento para todos los núcleos, vamos a agrupar esos tiempos en intervalos discretos (usando el valor de Δt como el tamaño del intervalo) y calcular el número de núcleos que decayeron en cada intervalo.

3. Formar el histograma: Finalmente, agrupamos los tiempos de decaimiento y generamos el histograma con el número de núcleos que decayeron en cada intervalo de tiempo.

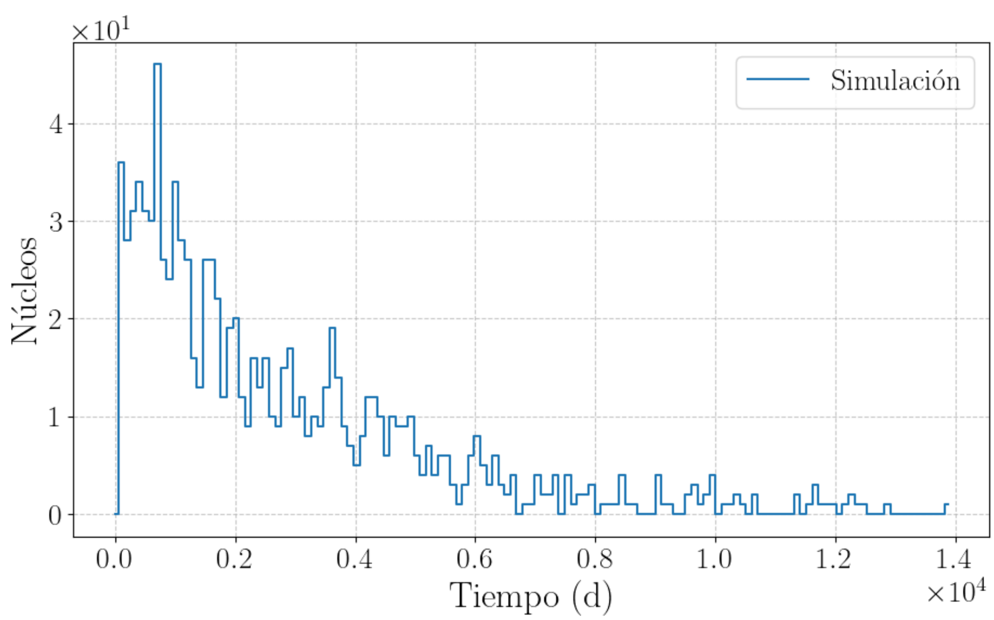


Figura 2: Histograma del número de núcleos desintegrados del resultado de la simulación con $N = 1000$ núcleos.

Problema 6: Comparación

Compare en una gráfica su histograma con la predicción teórica dada por la ley de decaimiento exponencial.

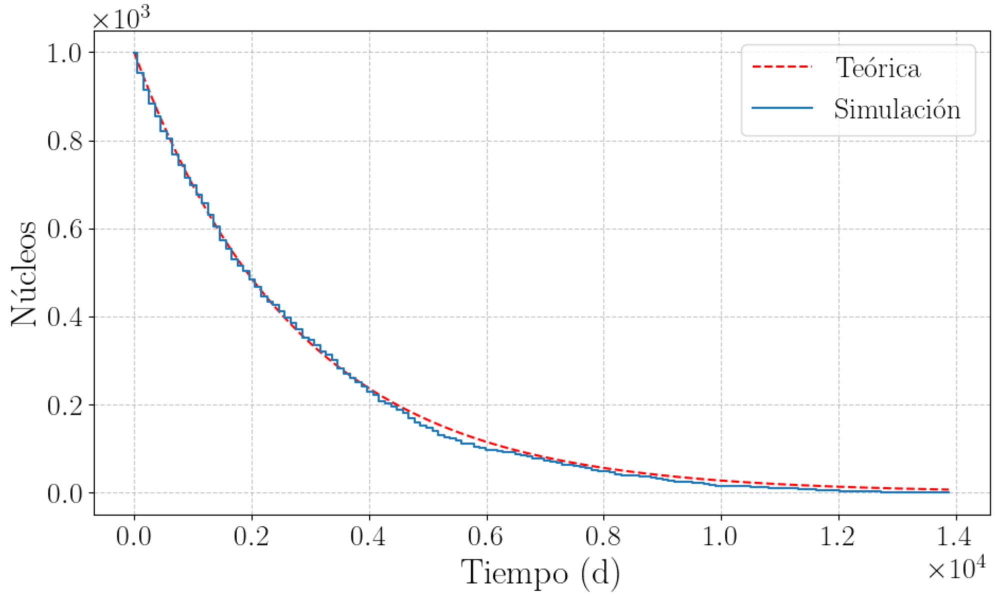


Figura 3: Simulación y aproximación teórica del decaimiento de una muestra de $N = 1000$ núcleos en el tiempo

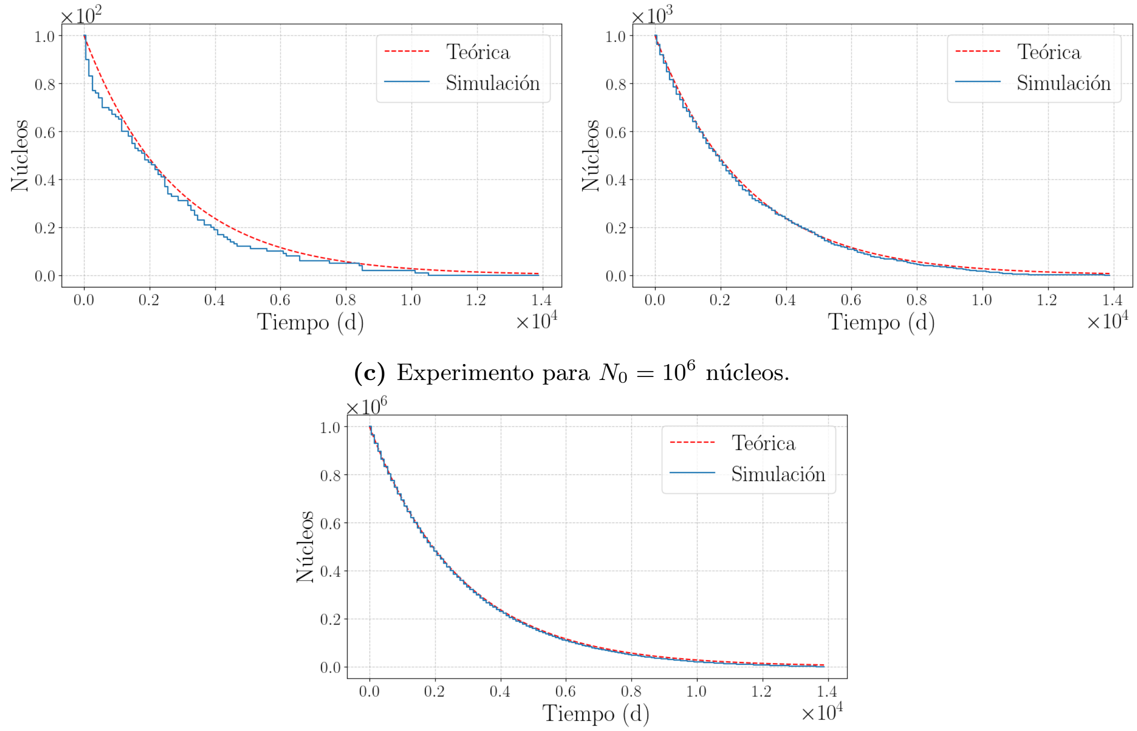
Problema 7: Experimentos

Deje decaer 10^2, 10^3, 10^6 y 10^8 núcleos y muestre la comparación del punto anterior en los cuatro casos.

Se simulan para las poblaciones iniciales N_0 respecto a la aproximación teórica con esa cantidad de núcleos dada como

$$f(t) = N_0 * S(t) \tag{9}$$

donde t es el tiempo en días, N_0 cantidad de núcleos inicial y $S(t)$ es la probabilidad de sobrevivir ya discutida anteriormente. Esta curva teórica se normaliza de esta manera para obtener la comparación equivalente en las gráficas de la fig.4.



(a) Experimento para $N_0 = 10^2$ núcleos.

(b) Experimento para $N_0 = 10^3$ núcleos.

(c) Experimento para $N_0 = 10^6$ núcleos.

Figura 4: Simulación de desintegración exponencial para variedad de número de núcleos N_0.

En este caso, no logramos con nuestros equipos simular un decaimiento de 10^8 núcleos, pero podemos deducir que la simulación se parecerá aun mas a la predicción teórica dada por la ley de decaimiento.

Parte II: Distribución Binomial Núcleo por Núcleo

En este método, se considera cada caso de desintegración, en cada instante de la discretización previa Δt, el decaimiento se simulará dada una probabilidad individual p sobrevivir al decaimiento. Por lo tanto en la densidad de probabilidad binomial

$$P_B(x) = \frac{N!}{x!(N-x)!} p^x (1-p)^{N-x} \tag{10}$$

Donde el número de intentos es

$$N = 1. \tag{11}$$

Y con un sólo intento, los únicos valores de la variable aleatoria son

$$x = \{0, 1\}. \tag{12}$$

Problema 8: Probabilidad $P_B(x)$

Muesyhtre detalladamente el cálculo que hace para verificar que

$$P_B(x) = \begin{cases} 1-p & \text{si } x = 0, \\ p & \text{si } x = 1. \end{cases} \quad (6) \tag{13}$$

Se reemplaza para el número de núcleos $N = 1$ y se deduce los valores para función de probabilidad binomial de la siguiente forma

$$P_B(x) = \frac{1}{x!(1-x)!} p^x (1-p)^{1-x} \tag{14}$$

Se estudia cada caso donde la variable aleatoria $x = 0, 1$ a continuación.

Sustituyendo $x = 0$ en la ec. 14:

$$\begin{aligned} P_B(0) &= \frac{1!}{0!(1-0)!} p^0 (1-p)^{1-0} \\ &= \frac{1}{1 \cdot 1} p \\ &= p \end{aligned}$$

Sustituimos $x = 1$ en la ec. 14:

$$\begin{aligned} P_B(0) &= \frac{1!}{1!(1-1)!} p^1 (1-p)^{1-1} \\ &= \frac{1}{1 \cdot 1} (1-p) \\ &= 1-p \end{aligned}$$

Y se comprueba entonces la ec. 13 propuesta.

Problema 9: Probabilidad decaer

Tome el mismo núcleo y la misma discretización de tiempo que usó en la Parte I. Muestre cómo obtiene el valor de la probabilidad de decaer p, en un intervalo de tiempo Δt.

En una diferencial de tiempo dt, la función $S(t) = N \exp\{-\Gamma t\}$ que determina la cantidad de núcleos N varía en una proporción tal como

$$dS(t) = -\Gamma S(t) dt \tag{15}$$

El factor Γ d^{-1}, definido en nuestro caso como como la probabilidad de decaimiento por cada día, reduce esa proporción con dependencia del estado actual infinitesimal de la cantidad de núcleos. Si tomamos ese total como divisor encontraremos la proporción que se va disminuyendo respecto el total, lo que definiría una probabilidad

$$\frac{dS(t)}{S(t)} \equiv p = -\Gamma dt \tag{16}$$

Basta discretizar la ecuación con $dt \equiv \Delta t$ en días, resultando la probabilidad individual por núcleo finalmente en $p = \Gamma \Delta t$ adimensional, como es requerido. Por último, queda la función de densidad de probabilidad de la forma

$$P_B(x) = \begin{cases} 1-\Gamma\Delta t & \text{si } x = 0, \\ \Gamma\Delta t & \text{si } x = 1. \end{cases} \quad (6) \tag{17}$$

Problema 10: Acumulativa Binomial

Construya y grafique en forma de histograma la función acumulativa. **Ojo!** En este caso la variable de la función acumulativa solamente tiene los dos valores de la igualdad y es la misma para todo instante de tiempo.

La función acumulativa $F(t)$ donde t se mide en días, se aplica a la función de densidad de probabilidad $P(t)$ de la ec. 17, la cual solo tiene 2 posibles resultados.

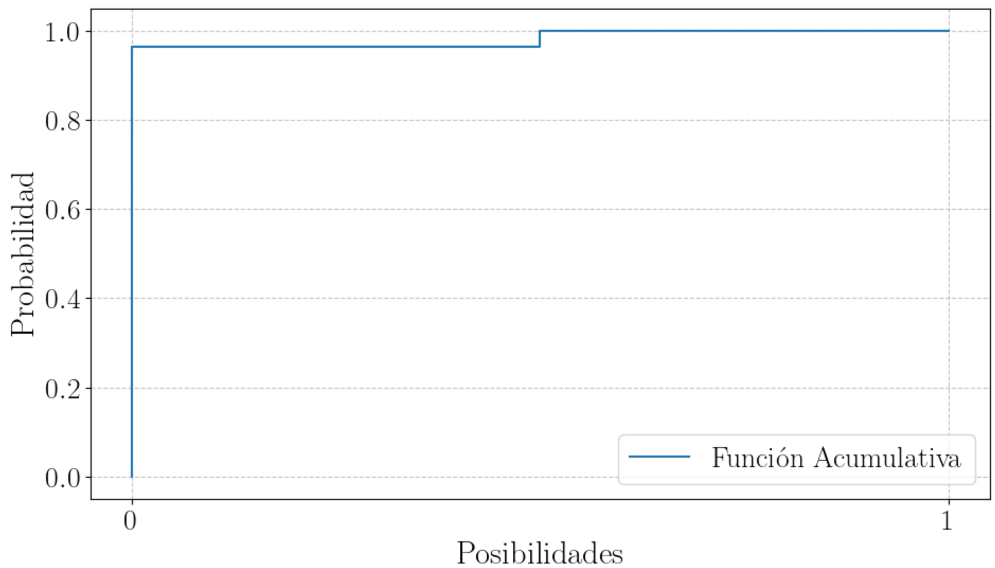


Figura 5: Función acumulativa de probabilidad para el caso binomial.

Donde $x = 0$ es que sobreviva al decaimiento, del cual evidentemente tiene mayor probabilidad y cuando $x = 1$ que decae el núcleo, alcanza a visualizarse el salto de la probabilidad en la gráfica previa 5.

Problema 11: Experimento Binomial

La estrategia: para cada instante de tiempo $t_i = i \cdot \Delta t$ decida, por Monte Carlo, **para cada núcleo**, si decae o no decae. El número de núcleos que no hayan decaído, $N(t_i)$, son examinados en el siguiente tiempo $t_{i+1} = (i+1) \cdot \Delta t$ y así sucesivamente hasta cuando $N(t_i) = 0$.

Se genera un ciclo `while` que irá corriendo los periodos de días t_i en el periodo Δt tiempo y verificará que no se quede sin núcleos. De aquí, haremos un ciclo anidado en el que se le preguntará a cada partícula si a a decaer o no con la función acumulativa previa y se cuentan los decaimientos.

Esto genera el histograma de la gráfica 6 y la función acumulativa de desintegraciones resultado del experimento Montecarlo en la gráfica 7.

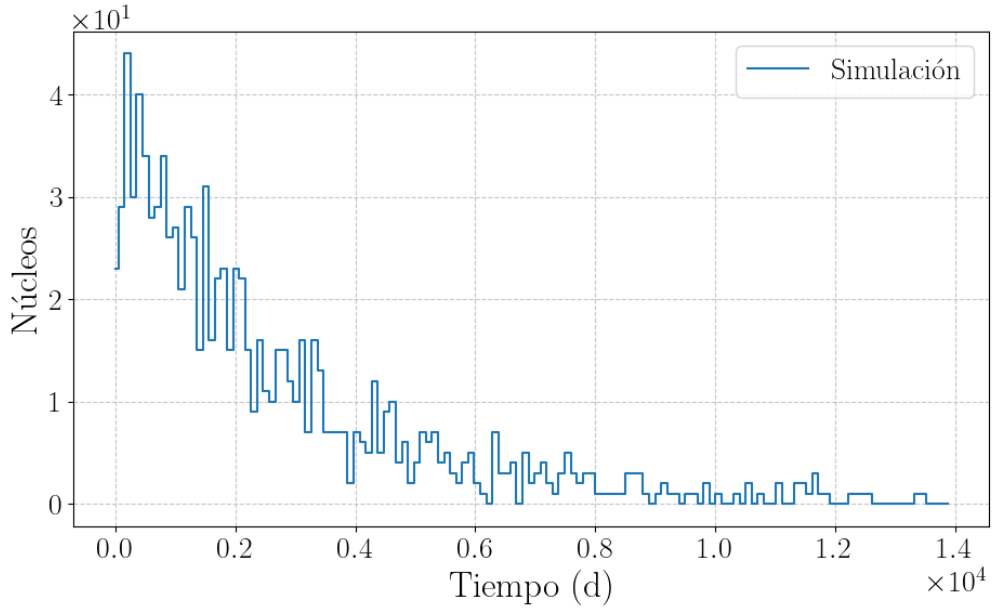


Figura 6: Núcleos desintegrados en la simulación "binomial"para cantidad inicial $N = 1000$ núcleos.

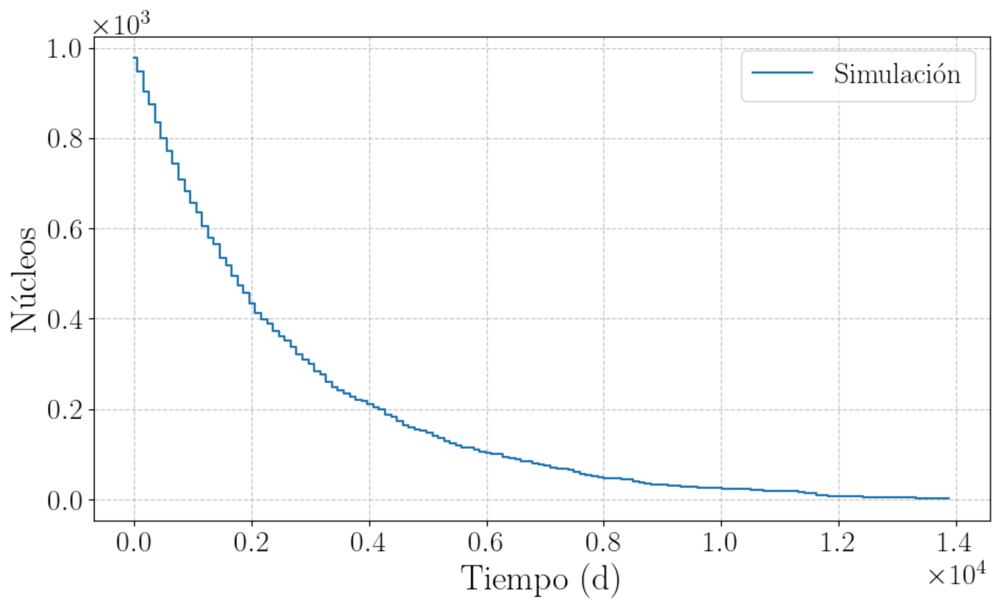


Figura 7: Función acumulativa resultado de la simulación "binomial".

> **Problema 12: Núcleos sobrevivientes**
>
> Registre el número de núcleos que no hayan decaído en cada instante, $N(t_i)$.

Se toma la diferencia y se gráfica los supervivientes como la función de desintegración general del tipo $F(t) = N * S(t)$.

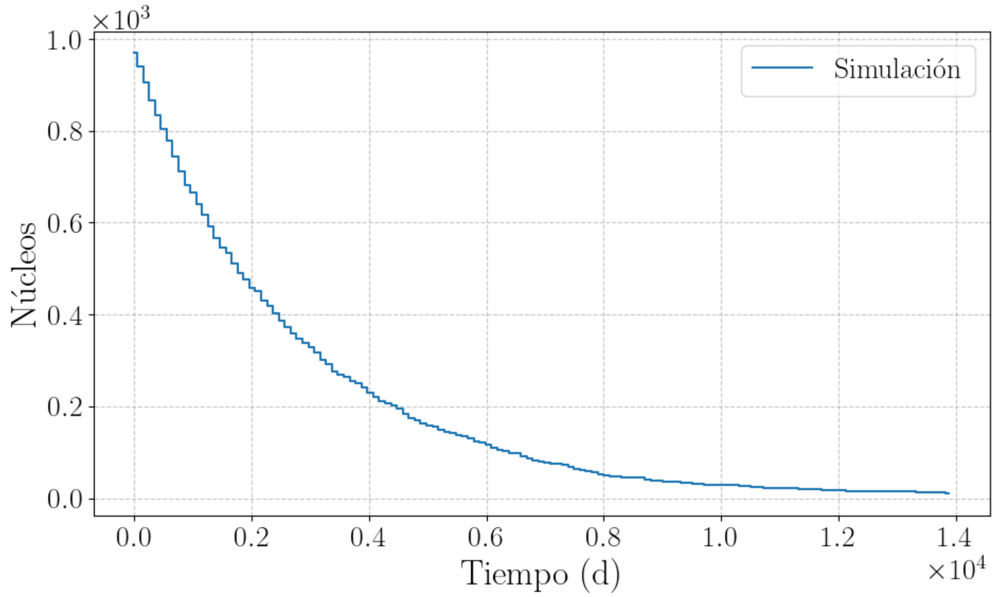


Figura 8: Decaimiento binomial a partir de $N = 1000$ núcleos.

> **Problema 13: Comparación métodos**
>
> Compare en una gráfica el resultado para cada número inicial N_0 ($10^2, 10^3, 10^6, 10^8$) la evolución en el tiempo para $N(t_i)$ dadas por las simulaciones según distribución exponencial (Parte I) y la distribución binomial.

Se comparan cada población inicial N_0 del método binomial en la gráfica a continuación

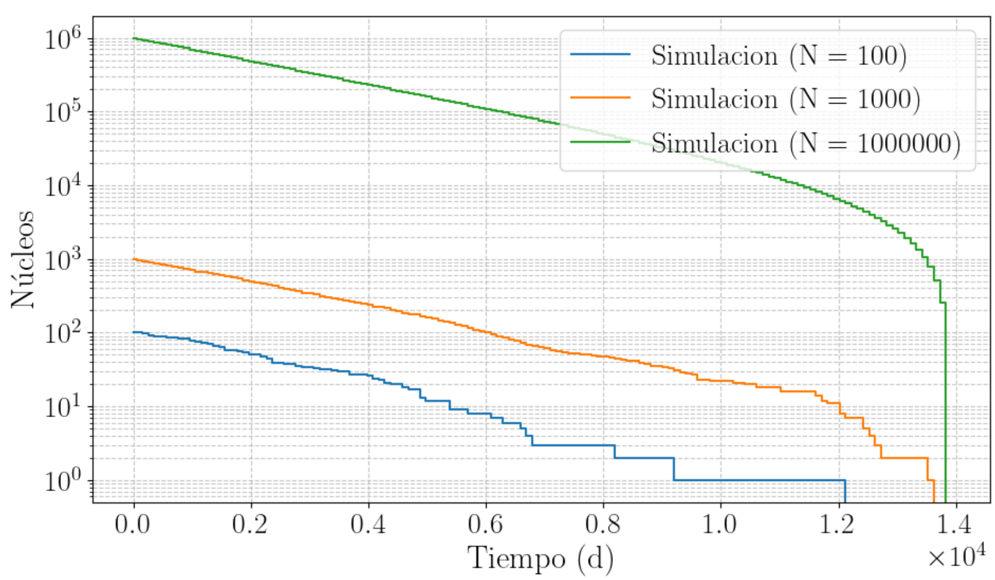


Figura 9: Comparación de cada tamaño de la población N_0.

Y se comparan los resultados del método exponencial con el actual método binomial para simulación de la desintegración nuclear a continuacion

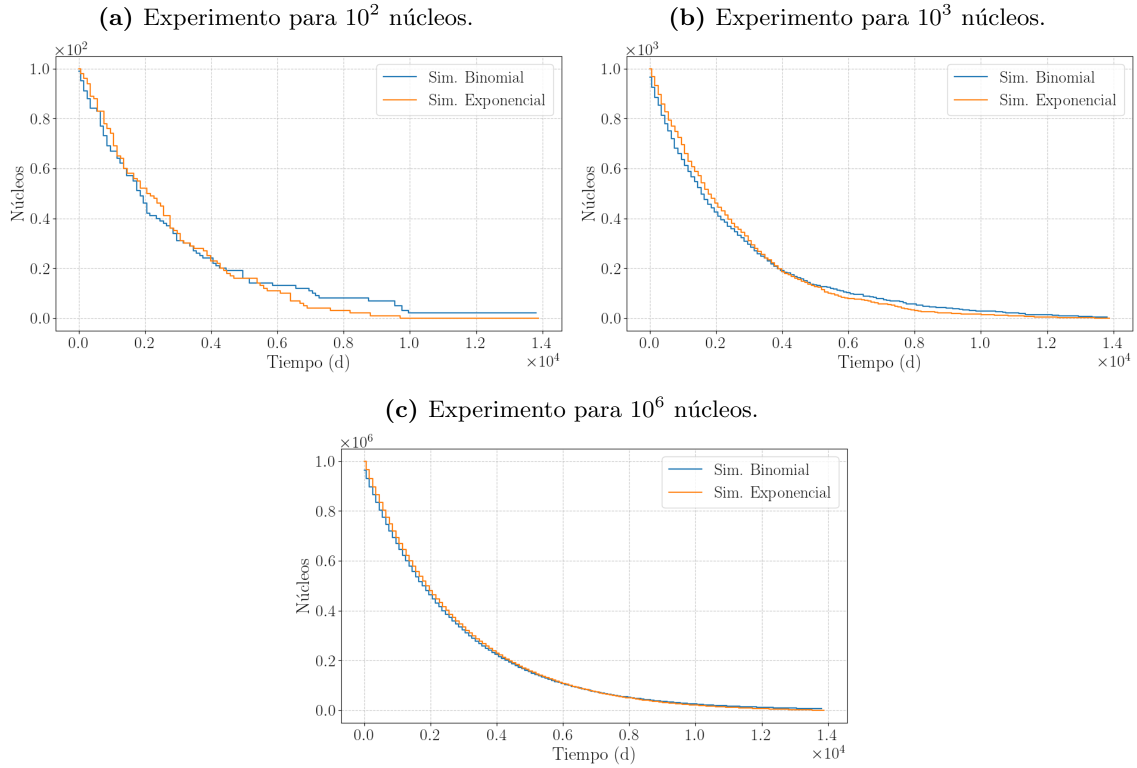
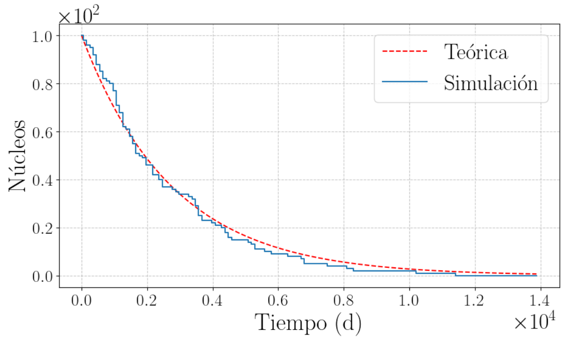


Figura 10: Comparación de métodos exponencial y binoamial en las simulaciones con poblaciones iniciales variados N_0.

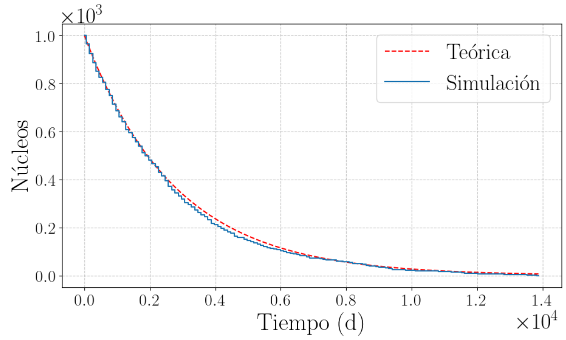
> **Problema 14: Comparación teórica**
>
> Trace en cada gráfica del punto anterior la predicción teórica de la disminución exponencial.

Se verifica con la teórica de la ec. 1 normalizada a $N = N_0$ núcleos requeridos para cada representación

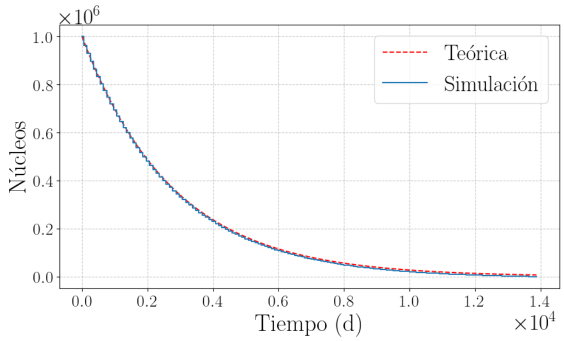
(a) Simulación para 10^2 núcleos.



(b) Simulación para 10^3 núcleos.



(c) Simulación para 10^6 núcleos.



Referencias

M.-M. Bé, V. Chisté, C. Dulieu, E. Browne, C. Baglin, V. Chechev, N. Kuzmenko, R. Helmer, F. Kondev, D. MacMahon, and K. Lee. *Table of Radionuclides*, volume 3 of *Monographie BIPM-5*. Bureau International des Poids et Mesures, Pavillon de Breteuil, F-92310 Sèvres, France, 2006. ISBN 92-822-2218-7. URL http://www.bipm.org/utils/common/pdf/monographieRI/Monographie_BIPM-5_Tables_Vol3.pdf.

E. Rutherford and F. Soddy. Lx. radioactive change. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 5(29):576–591, 1903. doi: 10.1080/14786440309462960. URL https://doi.org/10.1080/14786440309462960.