



**Universidade do Estado do Rio de Janeiro**

Centro de Tecnologia e Ciências  
Instituto de Matemática e Estatística

Deise Lilian de Oliveira

**Aplicação do método da Transformada de Laplace com  
representação matricial para modelagem computacional do  
fenômeno do decaimento radioativo**

Rio de Janeiro

2010

Deise Lilian de Oliveira

**Aplicação do método da Transformada de Laplace com  
representação matricial para modelagem computacional do  
fenômeno do decaimento radioativo**



Dissertação apresentada, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre, ao Programa de Pós-Graduação em Ciências Computacionais, da Universidade do Estado do Rio de Janeiro.

Orientador: Prof<sup>o</sup> Phd. Ricardo Carvalho de Barros.

Rio de Janeiro

2010

CATALOGAÇÃO NA FONTE  
UERJ / REDE SIRIUS / BIBLIOTECA CTC/A

O48 Oliveira, Deise Lílian de.

Aplicação do método da Transformada de Laplace com representação matricial para modelagem computacional do fenômeno do decaimento radioativo/ Deise Lílian de Oliveira. - 2010.

f.

Orientador: Ricardo Carvalho de Barros.

Dissertação (Mestrado) - Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto de Matemática e Estatística.

Bibliografia: f.

1. Computação – Matemática - Teses. 2. Radioatividade – Teses. 3. Laplace, Transformadas de – Teses. 3. Modelagem de dados – Teses. I. Barros, Ricardo Carvalho de. II. Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Instituto de Matemática e Estatística. III. Título.

CDU 519.6

Autorizo, apenas para fins acadêmicos e científicos, a reprodução total ou parcial desta dissertação.

---

Assinatura

---

Data

Deise Lilian de Oliveira

**Aplicação do método da Transformada de Laplace com  
representação matricial para modelagem computacional do  
fenômeno do decaimento radioativo**

Dissertação apresentada, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre, ao Programa de Pós-Graduação em Ciências Computacionais, da Universidade do Estado do Rio de Janeiro.

Aprovada em 16 de abril de 2010.

Banca Examinadora:

---

Prof<sup>o</sup> Phd. Ricardo Carvalho de Barros (Orientador)  
Instituto Politécnico (IPRJ – UERJ)

---

Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Maria de Lourdes Moreira  
Instituto de Engenharia Nuclear (CNEN)

---

Prof<sup>o</sup> Dr<sup>o</sup> Augusto Cesar de Castro Barbosa  
Instituto de Matemática e Estatística da UERJ

Rio de Janeiro

2010

## DEDICATÓRIA

Ao meu Deus.

Aos meus pais e ao meu filho. Aos professores e amigos, pela paciência, apoio e companheirismo.

## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço a Deus pelo privilégio de fazer parte de uma bela família, por me dar saúde para concluir este trabalho e de ter a oportunidade de conhecer e conviver com grandes pessoas.

A todos os meus parentes e aos amigos da turma de 2008, pelo encorajamento e apoio.

Ao professor Ricardo Carvalho de Barros pela orientação, amizade e principalmente, pela paciência, sem a qual este trabalho não se realizaria.

Aos professores do Instituto de Matemática e Estatística da UERJ por seus ensinamentos e aos funcionários do Programa de Pós-graduação em Ciências Computacionais e, em especial aos coordenadores, professores Carlos Antônio de Moura e Augusto Cesar de Castro Barbosa, pois todos eles durante esses anos de estudo e convivência contribuíram de algum modo para o nosso enriquecimento pessoal e profissional.

Aos funcionários Marcos Paulo Galdino de Lima, Sérgio Bittencourt Narcizo e Rinaldo Cavalcante Magallon, que sempre estiveram dispostos a me ajudar na realização deste trabalho.

Agradeço a meus pais por estarem sempre ao meu lado.

O que sabemos é uma gota, o que ignoramos é um oceano.

*Newton*

## RESUMO

OLIVEIRA, Deise Lilian. *Aplicação do método da Transformada de Laplace com representação matricial para modelagem computacional do fenômeno do decaimento radioativo*, 2010. 49f. Dissertação (Mestrado em Ciências Computacionais) – Instituto de Matemática e Estatística, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2010.

O decaimento radioativo é um fenômeno físico que pode ser modelado através de recursos computacionais simples, utilizando os aspectos das duas grandes escolas de modelagem matemática: a escola determinística e a escola probabilística. Neste trabalho, estaremos focados na escola determinística. A modelagem matemática caracteriza-se por um problema de valor inicial com uma cadeia simples ou composta de decaimentos radioativos de acordo com a história de um núcleo atômico-pai decair para um núcleo-filho, que é radioativamente estável ou não. Descrevemos nesta dissertação um aplicativo computacional (*um software*) que modela o decaimento radioativo simples, i.e. , decaimento para núcleos estáveis, e decaimento em cadeia diretamente acoplada. Implementamos neste aplicativo computacional um método analítico fundamentado na Transformada de Laplace usando uma plataforma computacional livre (*Scilab*). Para tanto, aplicamos uma formulação matricial e uma técnica de diagonalização por transformação de similaridade, onde propomos uma forma de construção da matriz diagonalizante e de sua inversa, que são necessárias. Apresentamos resultados numéricos para três problemas-modelos típicos.

Palavras-chave: Radioatividade. Decaimento radioativo. Transformada de Laplace. Modelagem computacional. Scilab.

## ABSTRACT

Radioactive decay is a physical phenomenon that can be modeled by simple computational techniques, using aspects of the two main schools of mathematical modeling: the deterministic school and the probabilistic school. In this work, we focus on the deterministic school. The mathematical model is characterized by an initial value problem with a single or coupled chain of radioactive decays according to the history of an atomic nucleus to decay to a daughter-atomic nucleus, that is stable or not. In this dissertation we describe a computer software modeling simple radioactive decays, i.e., decays to stable nuclei and directly coupled decay chains that we developed on a free platform. To achieve this goal, we used a matrix formulation and a diagonalization technique by means of similarity transformation, where we introduced a general form of constructing the diagonalizer matrix and its inverse, that are needed. We present numerical results for three typical problems.

Keywords: Radioactivity. Radioactive decay. Laplace Transform. Computational modeling. Scilab.

## SUMÁRIO

	<b>INTRODUÇÃO</b> .....	9
1	<b>A RADIOATIVIDADE</b> .....	11
2	<b>MODELAGEM MATEMÁTICA</b> .....	17
2.1	Constante de Decaimento Radioativo .....	17
2.2	Modelagem Matemática Probabilística .....	17
2.3	Modelagem Matemática Determinística .....	18
2.3.1	<u>Decaimento radioativo simples</u> .....	18
2.3.2	<u>Decaimento radioativo em cadeia</u> .....	22
3	<b>TÉCNICA MATRICIAL DA TRANSFORMADA DE LAPLACE</b> .....	26
4	<b>MODELAGEM COMPUTACIONAL</b> .....	33
5	<b>RESULTADOS NUMÉRICOS</b> .....	35
6	<b>CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS</b> ...	45
	<b>REFERÊNCIAS</b> .....	47

## INTRODUÇÃO

As mudanças climáticas que vêm ocorrendo em nosso planeta, que podem ser devidas em grande parte à interferência do homem, vêm acelerando um processo que levaria milhares de anos: o degelo das calotas polares. O buraco na camada de ozônio, causado pela emissão de gases poluentes, faz com que a luz do Sol chegue direto à Terra sem se transmitir pelos filtros naturais que envolvem o planeta, acelerando assim o derretimento das calotas polares. A preocupação com todo esse calor que não se dissipa da atmosfera, sendo acumulado pela espessa camada de gás carbônico, metano, etc. tem estimulado a proteção do meio-ambiente e incentivado a tecnologia de novas fontes de energia.

Até o final de 2006, a energia nuclear era responsável por 15% da energia total produzida em todo o mundo. Nos Estados Unidos havia 103 usinas operando. Na França havia cerca de 59 e, em seguida, vinha o Japão com 55 usinas nucleares. No Brasil, e em todo mundo, a energia nuclear vem crescendo significativamente e projetos nucleares vêm sendo retomados. A comunidade científica refere-se a esse período como o renascimento da energia nuclear.

Os materiais radioativos produzidos em instalações nucleares, laboratórios e hospitais, seja nas formas sólida, líquida ou gasosa, não podem ser simplesmente descartados, devido ao risco que apresentam ao meio-ambiente e à biosfera. Desta forma, é relevante considerarmos a importância do tratamento dos rejeitos radioativos tendo como base a atividade desses resíduos ao longo do tempo. Neste contexto, este trabalho de dissertação desenvolve um aplicativo computacional para modelar o fenômeno do decaimento de rejeitos radioativos. O fenômeno da radioatividade da Física Nuclear, cuja descoberta teve grande importância no século passado, e que hoje vemos que o seu entendimento tem muita relação com: (i) a geração de energia nos reatores nucleares de potência, principalmente no que diz respeito ao controle dos mesmos face às excursões descontroladas de potência; (ii) as demais aplicações que são igualmente benéficas à humanidade, e.g., a medicina, a geofísica, os ensaios não-destrutivos, etc. Ao mesmo tempo, temos a oportunidade de trabalhar nesta terceira modalidade de investigação científica, ademais das convencionais teórica e experimental, que é a modelagem computacional. Este terceiro mundo da pesquisa torna-se cada vez mais disponível para os estudiosos da atualidade, na medida em que tem havido um veloz desenvolvimento da ciência da computação. Ademais, trabalhamos com sistemas lineares de equações diferenciais ordinárias (EDO), como uma das formas concretas de se modelarem fenômenos físicos. Portanto,

apenas no contexto de um fenômeno físico simples, estaremos envolvidos com três aspectos interdisciplinares do projeto: Física Nuclear, Matemática e Ciência da Computação.

Neste contexto, entre os objetivos desta dissertação, citamos:

- desenvolvimento dos fundamentos teóricos do fenômeno físico da radioatividade;
- desenvolvimento dos fundamentos da escola de modelagem matemática determinística;
- desenvolvimento do algoritmo da modelagem computacional, i.e., programação, entrada de dados e apresentação de resultados.

Portanto, consideramos como a maior contribuição desta dissertação, para o campo interdisciplinar do conhecimento científico, a implementação de um método analítico fundamentado na Transformada de Laplace usando a plataforma computacional livre Scilab para solução dos problemas de valor inicial de decaimento radioativo. Para tanto, usamos uma formulação matricial e uma técnica de diagonalização por transformação de similaridade, onde propomos uma forma de construção da matriz diagonalizante e de sua inversa, que são necessárias.

Neste ponto apresentamos uma síntese do conteúdo desta dissertação. No Capítulo 1 descrevemos sucintamente o fenômeno físico que modelamos neste trabalho: a radioatividade. No Capítulo 2 apresentamos a modelagem matemática que é feita para o decaimento radioativo simples e em cadeia diretamente acoplada. No Capítulo 3 descrevemos a técnica da transformada de Laplace que usamos para implementação no aplicativo computacional que desenvolvemos nesta dissertação. No Capítulo 4 descrevemos o código computacional desenvolvido para as três cadeias radioativas naturais, com possibilidade de inclusão de cadeias radioativas artificiais. No Capítulo 5 apresentamos resultados numéricos de problemas modelos típicos e concluímos no Capítulo 6 apresentando uma breve discussão dos resultados e sugestões para trabalhos futuros.

## 1 A RADIOATIVIDADE



Figura 1 - Modelo Atômico

Durante muito tempo pensou-se que o átomo seria a menor porção de matéria. Hoje em dia, sabemos que o átomo é constituído por partículas menores, distribuídas numa dinâmica semelhante à do Sistema Solar.

O átomo é constituído por um núcleo e por partículas menores que giram em torno desse núcleo - os elétrons. O núcleo é constituído por partículas de carga positiva, os prótons e por partículas de aproximadamente mesmo tamanho, mas sem carga elétrica, os nêutrons, conforme ilustra a figura 1.

Como partículas de mesma carga repelem-se, comprovou-se a existência de uma energia nos núcleos dos átomos. Essa energia que mantém os prótons e nêutrons confinados no núcleo é a Energia Nuclear. Assim, são de fundamental importância as definições:

**Número atômico** ( $Z$ ) é o número de prótons presentes no núcleo de um átomo.

**Número de massa** ( $A$ ) é a soma do número de prótons ( $Z$ ) e de nêutrons ( $N$ ) presentes no núcleo de um átomo.

Portanto, o número de massa pode ser expresso matematicamente da seguinte maneira:

$$A = Z + N \quad .$$

O elemento natural mais simples, o hidrogênio, possui apenas um próton e, o mais complexo, o urânio, possui noventa e dois prótons, sendo o elemento químico natural mais pesado.

O urânio-235, por exemplo, possui 92 prótons e 143 nêutrons no núcleo. Portanto, seu número de massa ( $A$ ) é igual a  $92 + 143 = 235$ .

Além do urânio-235, existem na natureza, em maior quantidade, átomos com 92 prótons e 146 nêutrons. São também átomos do elemento urânio, porque têm 92 prótons. Trata-se do urânio-238. Esses dois átomos de um mesmo elemento químico que possuem massas diferentes são denominados isótopos de urânio. Assim, isótopos são dois ou mais átomos que possuem mesmo número atômico ( $Z$ ) e diferentes números de massa ( $A$ ).

O simples esquecimento de uma rocha de urânio sobre um filme fotográfico virgem levou à descoberta de um fenômeno interessante: o filme foi marcado por alguma coisa que saía da rocha, na época denominada raios ou radiações. O fenômeno foi denominado radioatividade [1] e os elementos que apresentam essas propriedades foram chamados elementos radioativos.

No estudo da radioatividade natural, verificou-se a existência de 3 tipos de radiação: raios ou partículas  $\alpha$ , que constituem núcleos dos átomos de hélio (gás nobre); raios ou partículas  $\beta$ , que são mais penetrantes que as partículas  $\alpha$  e raios  $\gamma$ , que são radiações eletromagnéticas emitidas pelo núcleo.

Um dos processos de estabilização de um núcleo com excesso de energia é a emissão de partículas positivas, constituídas por dois prótons e dois nêutrons: são as partículas  $\alpha$ . Outra forma de estabilização, quando existe no núcleo um excesso de nêutrons em relação a prótons, é através da emissão de uma partícula negativa, um elétron, resultante da conversão de um nêutron em um próton. Este tipo de decaimento é a emissão  $\beta^-$ . No caso de existir excesso de prótons, é emitida uma partícula  $\beta$  positiva, chamada pósitron, resultante da conversão de um próton em um nêutron. Este tipo de decaimento é o decaimento  $\beta^+$ .

No estudo da radioatividade, constatou-se que existem apenas 3 séries ou famílias radioativas naturais, conhecidas como: Série do Urânio, Série do Actínio e Série do Tório. Nas figuras 2, 3 e 4 temos representadas as 3 séries radioativas naturais. A Série do Actínio, na realidade, inicia-se com o urânio-235 e tem esse nome porque pensava-se que ela começava pelo actínio-227.

Cada elemento radioativo, seja natural ou artificial, decai a uma velocidade que lhe é característica. Quanto tempo leva para um átomo ter sua atividade reduzida à metade da atividade inicial? A resposta é uma grandeza denominada meia-vida que é o tempo necessário para a atividade de um certo elemento radioativo ser reduzida à metade da atividade inicial. Portanto, a cada meia-vida que passa, a atividade vai sendo reduzida à metade até atingir valores insignificantes, que não permitem mais distinguir suas radiações das do meio-ambiente.

Alguns elementos radioativos têm meias-vidas muito longas, como, por exemplo, os elementos iniciais de cada série radioativa natural, (veja

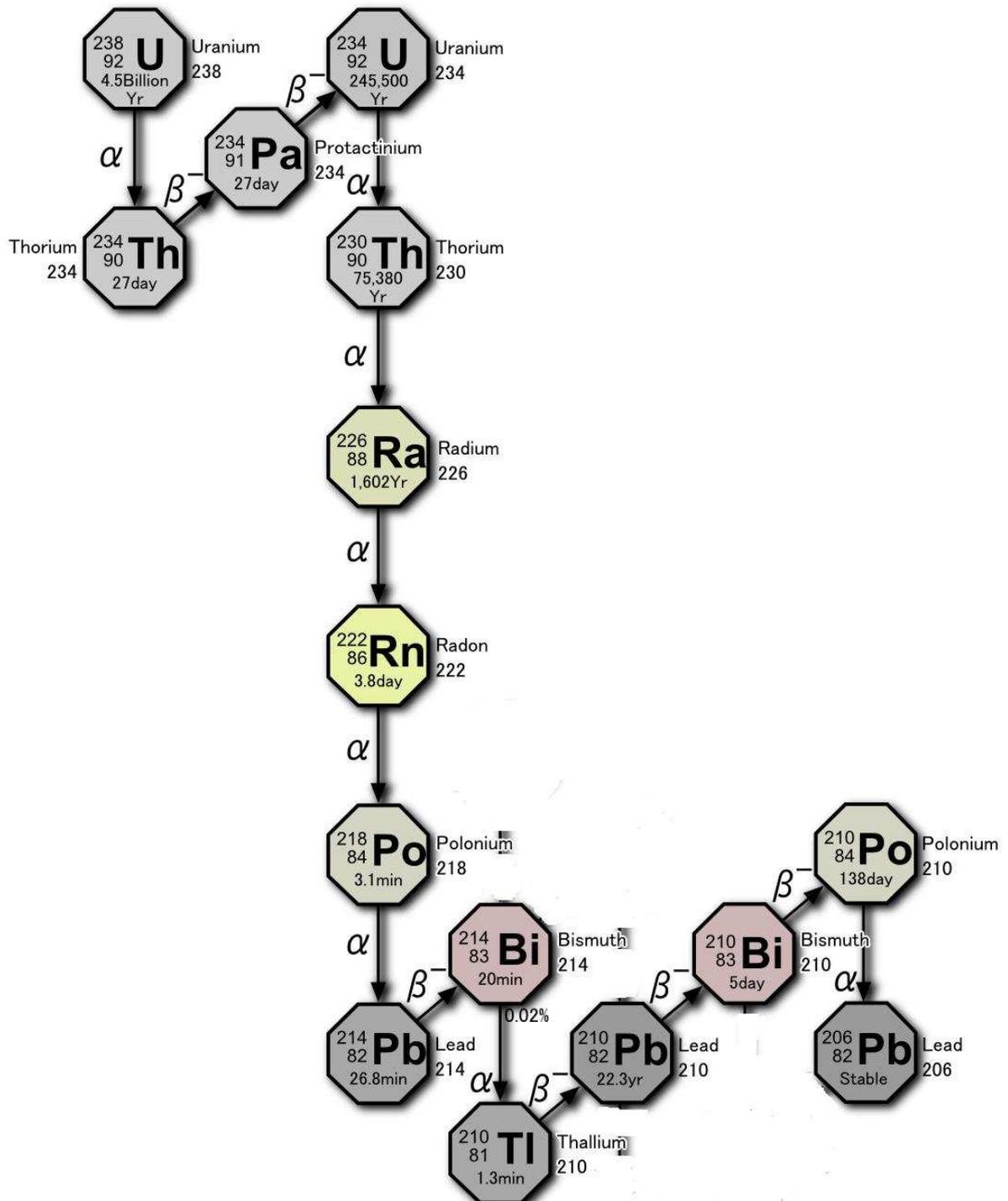


Figura 2 - Série do Urânio com meias-vidas mais longas.

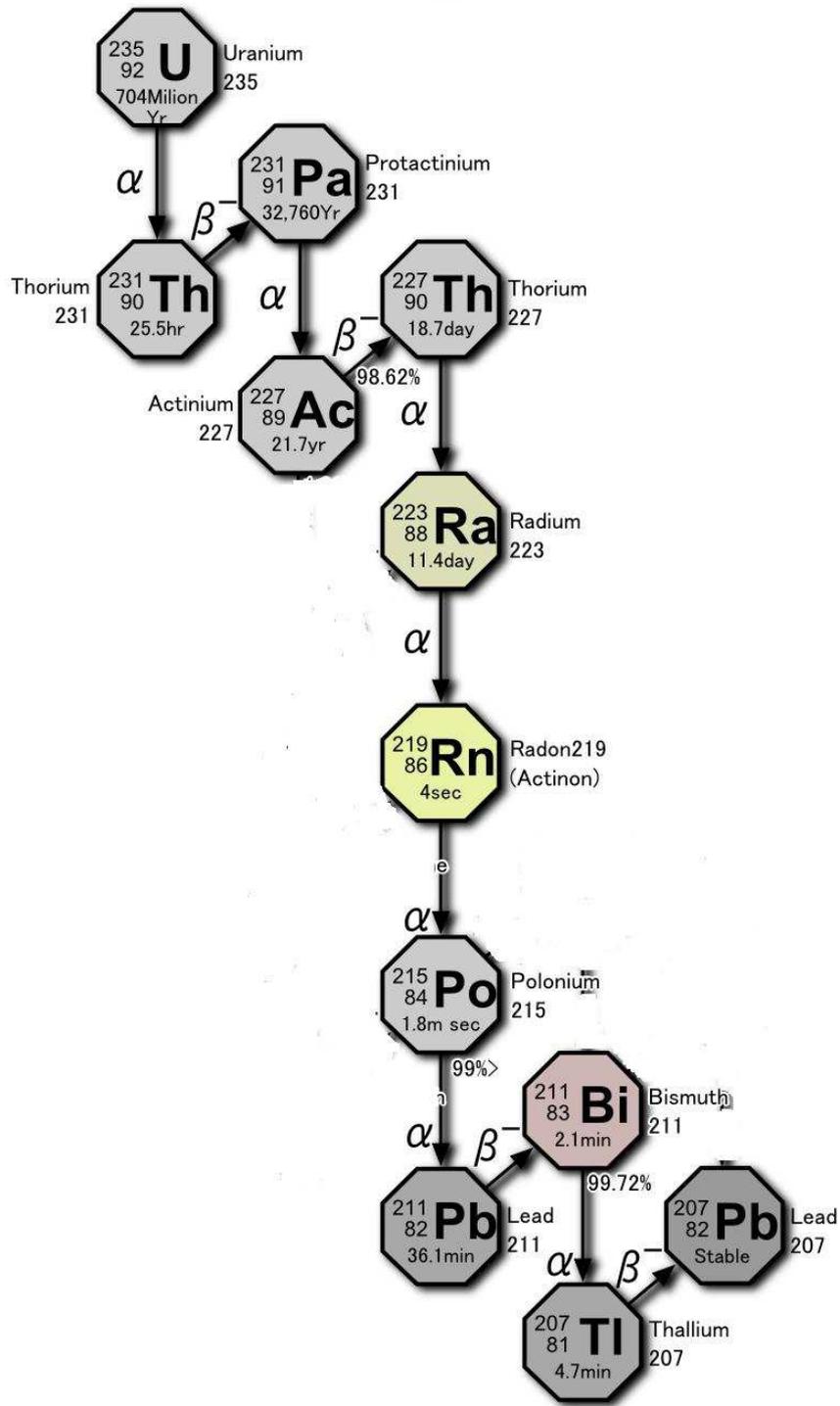


Figura 3 - Série do Actínio com meias-vidas mais longas.

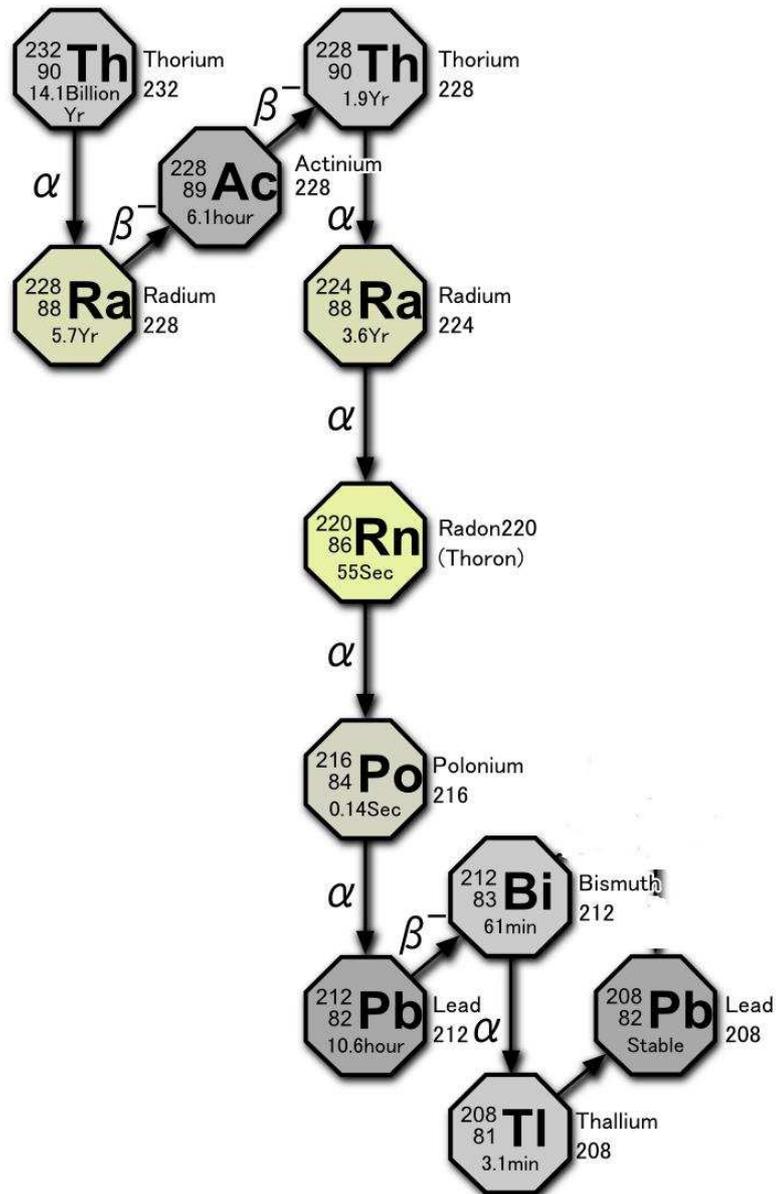


Figura 4 - Série do Tório com meias-vidas mais longas.

figuras 2, 3 e 4); outros possuem meias-vidas muito curtas, e.g., o polônio-218 da série do Urânio (3 minutos); o polônio-215 da série do Actínio ( $1,8 \times 10^{-3}$  segundo) e o polônio-216 da série do Tório (0,14 segundo).

No próximo capítulo descrevemos a modelagem matemática determinística que fazemos para o fenômeno do decaimento radioativo.

## 2 MODELAGEM MATEMÁTICA

### 2.1 Constante de Decaimento Radioativo

Definimos a constante de decaimento radioativo  $\lambda$  de um determinado isótopo radioativo de um elemento como a probabilidade por unidade de tempo que este isótopo venha a sofrer decaimento radioativo. Apesar de a modelagem computacional desta dissertação estar fundamentada na escola determinística da radioatividade, descrevemos na próxima seção, a título de ilustração, uma modelagem matemática probabilística para o decaimento radioativo simples, i.e., o isótopo radioativo decai para outro isótopo que é estável.

### 2.2 Modelagem Matemática Probabilística

A probabilidade  $p(t)$  de um núcleo sofrer decaimento radioativo em um intervalo de tempo,  $\Delta t$ , é proporcional somente a este intervalo se ele é suficientemente pequeno para que a relação  $p(t) \ll 1$  seja válida. A constante de proporcionalidade é a constante de decaimento radioativo e difere de núcleo para núcleo de acordo com os mecanismos de decaimento. Portanto podemos escrever

$$p(t) = \lambda \Delta t \quad , \quad (2.1)$$

que definimos como a probabilidade de decaimento de um núcleo durante um intervalo de tempo  $\Delta t$  que pode ser achado dividindo-se  $t$  em  $n$  intervalos iguais de duração  $\Delta t$ . Assim, a probabilidade de sobrevivência no primeiro dos  $n$  intervalos é

$$1 - p(t) \quad ;$$

no segundo intervalo é

$$[1 - p(t)]^2 \quad ;$$

e no  $n$ -ésimo intervalo é

$$[1 - p(t)]^n \quad .$$

Assim, a probabilidade de sobrevivência de um núcleo até um instante de tempo  $t$  é

$$(1 - \lambda\Delta t)^n = \left[1 - \frac{\lambda t}{n}\right]^n \quad .$$

Tomar o limite quando  $\Delta \rightarrow 0$  é equivalente a tomar o limite quando  $n \rightarrow +\infty$ , logo escrevemos

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} \left(1 - \frac{\lambda t}{n}\right)^n = e^{-\lambda t} \quad .$$

Se ao invés de um núcleo, tivermos inicialmente  $N_0$  núcleos idênticos, o número esperado  $N$  de maior probabilidade de sobrevivência após um tempo  $t$  será

$$N(t) = N_0 e^{-\lambda t} \quad . \tag{2.2}$$

### 2.3 Modelagem Matemática Determinística

Nesta modalidade de modelagem matemática, escrevemos um problema de valor inicial caracterizado por uma equação ou um sistema de equações diferenciais ordinárias de acordo com o tipo do decaimento radioativo ser simples ou em cadeia.

#### 2.3.1 Decaimento radioativo simples

Consideremos uma amostra de um material radioativo. Vamos admitir que todos os núcleos da amostra tenham igual probabilidade de decair. Se no tempo  $t$  existem  $N$  núcleos que ainda não decaíram, então, o número  $-dN$  de núcleos que decaem durante o intervalo de tempo entre  $t$  e  $t + dt$  deve ser linearmente proporcional a  $N$  e também a  $dt$ . Assim, temos

$$\frac{dN}{dt} = -\lambda N \quad , \tag{2.3}$$

com a condição inicial conhecida  $N(0) = N_0$ . Podemos resolver o problema de valor inicial (2.3) usando a técnica da transformada de Laplace cujos fundamentos apresentamos a seguir.

A transformada de Laplace [2] é uma transformação linear integral definida como

$$\mathcal{L}[f(t)] = F(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} f(t) dt, \quad (2.4)$$

para toda função  $f: [0, \infty) \rightarrow \mathfrak{R}$  e para todo  $s \geq 0$ .

**Exemplo 1.** Seja calcular a transformada de Laplace da função constante  $f(t) = 1$ .

$$\begin{aligned} \mathcal{L}[1](s) &= \int_0^{\infty} e^{-st} 1 dt = \lim_{b \rightarrow \infty} \int_0^b e^{-st} dt = \lim_{b \rightarrow \infty} \left[ -\frac{1}{s} e^{-st} \right]_0^b = \\ \lim_{b \rightarrow \infty} \left[ -\frac{1}{s} (e^{-sb} - e^0) \right] &= \lim_{b \rightarrow \infty} \left[ -\frac{1}{s} (e^{-sb} - 1) \right] = \frac{1}{s}, s > 0. \end{aligned}$$

**Exemplo 2.** Calculemos agora a transformada de Laplace da função  $f(t) = t$ .

$$\begin{aligned} \mathcal{L}[t](s) &= \int_0^{\infty} e^{-st} t dt = \lim_{b \rightarrow \infty} \int_0^b t e^{-st} dt = \lim_{b \rightarrow \infty} \left[ -\frac{t e^{-st}}{s} \right]_0^b + \frac{1}{s} \int_0^b e^{-st} dt = \lim_{b \rightarrow \infty} \left[ -\frac{t e^{-st}}{s} \right]_0^b - \\ \frac{1}{s^2} e^{-st} \Big|_0^b &= \lim_{b \rightarrow \infty} \left[ -\frac{b e^{-sb}}{s} - \frac{1}{s^2} (e^{-sb} - 1) \right] = \lim_{b \rightarrow \infty} \left[ \frac{-1}{s} \frac{b}{e^{sb}} - \frac{1}{s^2} \frac{1}{e^{sb}} + \frac{1}{s^2} \right] = \\ \frac{1}{s^2}, s > 0. \end{aligned}$$

**Exemplo 3.** Agora calculemos a transformada de Laplace da função  $f(t) = e^{at}$ .

$$\mathcal{L}[e^{at}] = \int_0^{\infty} e^{-st} (e^{at}) dt = \lim_{b \rightarrow \infty} \int_0^b e^{-(s-a)t} dt = \frac{1}{s-a}, s > a. \quad (2.5)$$

Observe que a transformada de Laplace associa a cada função  $f(t)$  uma nova função  $F(s) = \mathcal{L}[f(t)](s)$ . Logo,  $\mathcal{L}$  é um operador linear atuando sobre a função, porque  $\mathcal{L}[\alpha f(t) + \beta g(t)] = \int_0^{\infty} e^{-st} [\alpha f(t) + \beta g(t)] dt = \int_0^{\infty} [\alpha e^{-st} f(t) + \beta e^{-st} g(t)] dt = \alpha \int_0^{\infty} e^{-st} f(t) dt + \beta \int_0^{\infty} e^{-st} g(t) dt = \alpha \mathcal{L}[f(t)] + \beta \mathcal{L}[g(t)]$ ,

onde  $\alpha, \beta \in \mathfrak{R}$ ;  $f(t), g(t)$  são funções definidas em  $[0, \infty)$ .

Uma dificuldade muito séria com a transformada de Laplace é que a integral pode não existir para todos os valores do limite superior  $b$  ou que a integral imprópria pode divergir.

Para garantir que a transformada de Laplace de  $f(t)$  exista pelo menos em algum intervalo  $s > s_0$ , impomos as seguintes condições sobre  $f(t)$ :

1. A função  $f(t)$  é contínua por partes ou seccionalmente contínua, isto é,  $f(t)$  tem no mínimo um número finito de descontinuidades em qualquer intervalo  $0 \leq t \leq b$  e nesses pontos de descontinuidades,  $f(t)$  tem limites laterais.

2. A função  $f(t)$  é de ordem exponencial, isto é, existem constantes  $M$  e  $c$  tais que  $|f(t)| \leq Me^{ct}, 0 \leq t < \infty$ .

Se  $f(t)$  é contínua por partes e de ordem exponencial, então a sua transformada de Laplace existe para todo  $s$  suficientemente grande.

Ainda mais,  $\lim_{s \rightarrow \infty} F(s) = \lim_{s \rightarrow \infty} \mathcal{L}[f(t)](s) = 0$ .

Suponha que  $f$  seja contínua e  $f'$  seja contínua por partes em qualquer intervalo  $0 \leq t \leq A$ . Suponha ainda que existam constantes  $K, a$  e  $M$  tais que  $|f(t)| \leq Ke^{at}$  para  $t \geq M$ . Então,  $\mathcal{L}[f(t)]$  existe para  $s > a$ , além disso,

$$\mathcal{L}[f'(t)] = s\mathcal{L}[f(t)] - f(0) \quad . \quad (2.6)$$

*Demonstração.* Consideremos a integral  $\int_0^A e^{-st} f'(t) dt$

Fazendo  $t_1, t_2, \dots, t_n$  os pontos no intervalo  $0 \leq t \leq A$  onde  $f'$  é descontínua, obtemos

$$\int_0^A e^{-st} f'(t) dt = \int_0^{t_1} e^{-st} f'(t) dt + \int_{t_1}^{t_2} e^{-st} f'(t) dt + \dots + \int_{t_n}^A e^{-st} f'(t) dt \quad .$$

Integrando cada termo do segundo membro por partes, temos

$$\begin{aligned} \int_0^A e^{-st} f'(t) dt &= e^{-st} f(t) \Big|_0^{t_1} + e^{-st} f(t) \Big|_{t_1}^{t_2} + \dots + e^{-st} f(t) \Big|_{t_n}^A + \\ &+ s \left[ \int_0^{t_1} e^{-st} f(t) dt + \int_{t_1}^{t_2} e^{-st} f(t) dt + \dots + \int_{t_n}^A e^{-st} f(t) dt \right] \quad . \end{aligned}$$

Como  $f$  é contínua, as contribuições dos termos integrados em  $t_1, t_2, \dots, t_n$  se cancelam. Combinando as integrais, temos

$$\int_0^A e^{-st} f'(t) dt = e^{-sA} f(A) - f(0) + s \int_0^A e^{-st} f(t) dt \quad .$$

Quando  $A \rightarrow \infty$ ,  $e^{-sA} f(A) \rightarrow 0$  sempre que  $s > a$ . Assim, para  $s > a$ ,

$$\mathcal{L}[f'(t)] = s\mathcal{L}[f(t)] - f(0) \quad .$$

que demonstra o teorema. □

De modo mais geral, se  $f, f', f'', f''', \dots, f^{(n-1)}$  são contínuas em  $[0, \infty)$  e de ordem

exponencial e  $f^{(n)}$  é contínua por partes e de ordem exponencial, então,

$$1. \mathcal{L} [f''(t)] = s^2 \mathcal{L} [f(t)] - sf(0) - f'(0).$$

$$2. \mathcal{L} [f'''(t)] = s^3 \mathcal{L} [f(t)] - s^2 f(0) - sf'(0) - f''(0).$$

⋮

$$3. \mathcal{L} [f^{(n)}(t)] = s^n \mathcal{L} [f(t)] - s^{n-1} f(0) - s^{n-2} f'(0) - \dots - sf^{(n-2)}(0) - f^{(n-1)}(0).$$

Agora usamos a transformada de Laplace para resolução do problema de decaimento radioativo simples modelado matematicamente pela equação (2.3),

$$\mathcal{L} \left[ \frac{dN}{dt} \right] = \mathcal{L} [-\lambda N] \quad ,$$

usando (2.6) escrevemos

$$s\mathcal{L} [N] - N(0) = -\lambda\mathcal{L} [N]$$

$$s\mathcal{L} [N] + \lambda\mathcal{L} [N] = N(0) \quad .$$

Fazendo  $\mathcal{L} [N] = \eta(s)$  e  $N(0) = N_0$ , temos

$$\eta(s)(s + \lambda) = N_0$$

ou equivalentemente

$$\eta(s) = \frac{N_0}{s + \lambda} \quad . \tag{2.7}$$

Tomando a transformada inversa  $\mathcal{L}^{-1}$  em ambos os membros, escrevemos

$$\mathcal{L}^{-1}[\eta(s)] = \mathcal{L}^{-1}\left[\frac{N_0}{s + \lambda}\right] ,$$

que conforme (2.5) equivale a

$$N(t) = N_0 e^{-\lambda t} . \quad (2.8)$$

Comparando o resultado obtido na seção (3.2), equação (3.2), pela modelagem matemática probabilística, com o resultado apresentado na equação (3.8) pela modelagem matemática determinística, vemos que eles são idênticos. Agora, vamos relacionar a grandeza meia-vida que definimos no Capítulo 1 com a grandeza  $\lambda$ , constante de decaimento radioativo, que definimos na seção 2.1.

Usando o resultado (2.2) ou (2.8) e a definição de meia-vida ( $T_{1/2}$ ), escrevemos

$$\frac{N_0}{2} = N_0 e^{-\lambda T_{1/2}} ,$$

cuja solução é

$$T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda} \cong \frac{0,693}{\lambda} . \quad (2.9)$$

Portanto, na série do Urânio (figura 2), o isótopo radônio-222 tem meia-vida de 3,8 dias. Isto implica que sua constante de decaimento radioativo por emissão de partícula  $\alpha$  é

$$\lambda = \frac{\ln 2}{3,8 \times 24 \times 3600} = 0,000002111 (\text{segundos})^{-1} = 2,111 \times 10^{-6} (\text{segundos})^{-1}$$

### 2.3.2 Decaimento radioativo em cadeia

Existem na natureza núcleos radioativos que decaem para núcleos filhos, que por sua vez são também radioativos, e estes também decaem para núcleos que podem ser estáveis ou não. Quando essa cadeia de decaimentos sucessivos chega em um núcleo estável, temos então o fim da cadeia de decaimentos sucessivos. Considere, por exemplo a cadeia diretamente acoplada com dois decaimentos radioativos até atingir o isótopo estável

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

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

$$\frac{dN_3}{dt} = \lambda_2 N_2$$

onde  $N_1(0) = N_{10}$ ,  $N_2(0) = N_{20}$  e  $N_3(0) = N_{30}$ .

Aplicando a transformada de Laplace para resolver este sistema de equações diferenciais ordinárias, usamos a propriedade (2.6) para escrever

$$s\eta_1(s) - N_{10} = -\lambda_1\eta_1(s)$$

$$s\eta_2(s) - N_{20} = \lambda_1\eta_1(s) - \lambda_2\eta_2(s)$$

$$s\eta_3(s) - N_{30} = \lambda_2\eta_2(s) \quad , \quad (2.10)$$

onde  $\eta_i(s) = \mathcal{L}[N_i(t)]$ ,  $i = 1 : 3$ . Agora reescrevemos

$$(s + \lambda_1)\eta_1(s) = N_{10}$$

$$-\lambda_1\eta_1(s) + (s + \lambda_2)\eta_2(s) = N_{20}$$

$$-\lambda_2\eta_2(s) + s\eta_3(s) = N_{30} \quad . \quad (2.11)$$

Da primeira equação, temos que

$$\eta_1(s) = \frac{N_{10}}{s + \lambda_1} \quad . \quad (2.12)$$

Substituindo este resultado na segunda equação de (2.11), obtemos

$$\eta_2(s) = \frac{N_{20}}{(s + \lambda_2)} + \frac{\lambda_1 N_{10}}{(s + \lambda_1)(s + \lambda_2)} \quad . \quad (2.13)$$

Levando na terceira equação de (2.11), temos

$$\eta_3(s) = \frac{N_{30}}{s} + \frac{\lambda_2 N_{20}}{(s + \lambda_2)s} + \frac{\lambda_1 \lambda_2 N_{10}}{(s + \lambda_1)(s + \lambda_2)s} \quad . \quad (2.14)$$

Tomando as transformadas inversas de (2.12) e (2.13), usamos (2.5) para obter

$$\mathcal{L}^{-1}[\eta_1(s)] = N_{10} \mathcal{L}^{-1} \left[ \frac{1}{s + \lambda_1} \right] = N_{10} e^{-\lambda_1 t} \quad (2.15)$$

$$\mathcal{L}^{-1}[\eta_2(s)] = N_{20} \mathcal{L}^{-1} \left[ \frac{1}{s + \lambda_2} \right] + \lambda_1 N_{10} \mathcal{L}^{-1} \left[ \frac{1}{(s + \lambda_1)(s + \lambda_2)} \right] \quad .$$

Decompondo a fração  $\frac{1}{(s + \lambda_1)(s + \lambda_2)}$  em frações parciais, obtemos

$$\frac{A}{s + \lambda_1} + \frac{B}{s + \lambda_2} = \frac{-1}{(\lambda_1 - \lambda_2)} \frac{1}{(s + \lambda_1)} + \frac{1}{(\lambda_1 - \lambda_2)} \frac{1}{(s + \lambda_2)} \quad .$$

Aplicando a transformada inversa, temos

$$\mathcal{L}^{-1}[\eta_2(s)] = N_{20} \mathcal{L}^{-1} \left[ \frac{1}{s + \lambda_2} \right] + \lambda_1 N_{10} \mathcal{L}^{-1} \left[ \frac{-1}{(\lambda_1 - \lambda_2)} \frac{1}{(s + \lambda_1)} + \frac{1}{(\lambda_1 - \lambda_2)} \frac{1}{(s + \lambda_2)} \right] \quad .$$

Usando (2.5) escrevemos

$$N_2(t) = N_{20} e^{-\lambda_2 t} + \lambda_1 N_{10} \left( \frac{-1}{(\lambda_1 - \lambda_2)} e^{-\lambda_1 t} + \frac{1}{(\lambda_1 - \lambda_2)} e^{-\lambda_2 t} \right) \quad . \quad (2.16)$$

Similarmente para a equação (2.14), obtemos

$$\mathcal{L}^{-1}[\eta_3(s)] = N_{30} \mathcal{L}^{-1} \left[ \frac{1}{s} \right] + \lambda_2 N_{20} \mathcal{L}^{-1} \left[ \frac{1}{s(s + \lambda_2)} \right] + \lambda_1 \lambda_2 N_{10} \mathcal{L}^{-1} \left[ \frac{1}{s(s + \lambda_1)(s + \lambda_2)} \right] \quad .$$

Decompondo as duas últimas parcelas em frações parciais, obtemos:

$$\frac{1}{s(s + \lambda_2)} = \frac{A}{s} + \frac{B}{s + \lambda_2} = \frac{1}{\lambda_2} \frac{1}{s} + \frac{-1}{\lambda_2} \frac{1}{s + \lambda_2} \quad .$$

$$\frac{1}{s(s + \lambda_1)(s + \lambda_2)} = \frac{A}{s} + \frac{B}{s + \lambda_1} + \frac{C}{s + \lambda_2} = \frac{1}{\lambda_1 \lambda_2} \frac{1}{s} + \frac{1}{\lambda_1(\lambda_1 - \lambda_2)} \frac{1}{s + \lambda_1} +$$

$$\frac{-1}{\lambda_2(\lambda_1 - \lambda_2)} \frac{1}{s + \lambda_2} .$$

Substituindo esses resultados na equação para  $\mathcal{L}^{-1}[\eta_3(s)]$ , temos

$$N_3(t) = N_{30} + N_{20}(1 - e^{-\lambda_2 t}) + N_{10} + \frac{\lambda_2 N_{10}}{(\lambda_1 - \lambda_2)} e^{-\lambda_1 t} - \frac{\lambda_1 N_{10}}{(\lambda_1 - \lambda_2)} e^{-\lambda_2 t} , \quad (2.17)$$

onde usamos o resultado (2.5).

Fizemos passo a passo a solução do problema de valor inicial pelo método da transformada de Laplace para ilustrar como este procedimento pode ser tedioso em cadeias radioativas mais longas. Neste exemplo, a solução é dada pelas equações (2.15), (2.16) e (2.17).

No próximo capítulo chegamos ao clímax teórico desta dissertação onde descrevemos a técnica matricial da transformada de Laplace que utilizamos no desenvolvimento do aplicativo computacional que gera solução numérica analítica para problemas de decaimento radioativo com  $L$  isótopos; daí o nome do aplicativo  $LTRad_L$ .

### 3 TÉCNICA MATRICIAL DA TRANSFORMADA DE LAPLACE

Considere a cadeia radioativa diretamente acoplada de  $L$  elementos e  $L - 1$  decaimentos

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

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

$$\frac{dN_3}{dt} = \lambda_2 N_2 - \lambda_3 N_3$$

$$\frac{dN_4}{dt} = \lambda_3 N_3 - \lambda_4 N_4$$

⋮

$$\frac{dN_L}{dt} = \lambda_{L-1} N_{L-1} \quad .$$

Generalizando, podemos escrever

$$\frac{dN_m}{dt} = \lambda_{m-1} N_{m-1} - \lambda_m N_m \quad , \quad m = 1 : L \quad ,$$

ou equivalentemente

$$\frac{dN_m}{dt} + \lambda_m N_m = \lambda_{m-1} N_{m-1} \quad , \quad m = 1 : L \quad , \quad (3.1)$$

onde

$$\lambda_L = 0, \quad \lambda_0 = 0 \quad .$$

Em notação matricial, obtemos

$$\frac{d\vec{N}}{dt} = \Lambda \vec{N} \quad , \quad (3.2)$$

onde definimos  $\vec{N} = \begin{pmatrix} N_1 & N_2 & N_3 & \dots & N_L \end{pmatrix}^T$  e a matriz

$$\Lambda = \begin{pmatrix} -\lambda_1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \lambda_1 & -\lambda_2 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & -\lambda_3 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & -\lambda_4 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -\lambda_{L-1} & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

Considerando que a matriz  $\Lambda$  é singular, não conseguiremos uma transformação de similaridade que diagonalize  $\Lambda$ . Portanto, reescrevemos a equação (3.2) na seguinte forma

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \\ N_4 \\ \vdots \\ N_{L-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\lambda_1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \lambda_1 & -\lambda_2 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & -\lambda_3 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & -\lambda_4 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \lambda_{L-2} & -\lambda_{L-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \\ N_4 \\ \vdots \\ N_{L-1} \end{pmatrix}, \quad (3.4)$$

$$\frac{d}{dt} N_L = \lambda_{L-1} N_{L-1}, \quad (3.5)$$

onde separamos a última equação para levantarmos a singularidade da matriz  $\Lambda$ . Agora, a nova matriz  $\Lambda$  de ordem  $(L - 1)$  é inversível. Assim, o sistema (3.4) pode ser escrito na forma vetorial como

$$\frac{d\vec{N}}{dt} = \Lambda \vec{N} \quad (3.6)$$

$$\frac{dN_L}{dt} = \lambda_{L-1} N_{L-1}. \quad (3.7)$$

Conhecidas as condições iniciais  $\vec{N}(0)$ , a nossa proposta de metodologia baseia-se na solução completa do sistema (3.6); substituição da solução para  $N_{L-1}(t)$  em (3.7) e resolução da EDO (3.7) por variáveis separadas.

Em continuidade, apliquemos a transformada de Laplace na equação (3.6). O resultado é

$$\mathcal{L} \left( \frac{d\vec{N}}{dt} \right) = \Lambda \mathcal{L} \left( \vec{N} \right) \quad (3.8)$$

$$s\mathcal{L} \left( \vec{N} \right) - \vec{N} (0) = \Lambda \mathcal{L} \left( \vec{N} \right) \quad , \quad (3.9)$$

onde usamos o resultado (2.6). Aqui definimos

$$\mathcal{L} \left( \vec{N} \right) \equiv \vec{\eta}(s) \quad . \quad (3.10)$$

Logo, escrevemos

$$s\vec{\eta}(s) - \Lambda\vec{\eta}(s) = \vec{N}(0) \quad ,$$

ou, equivalentemente,

$$\vec{\eta}(s) = (s\mathfrak{S} - \Lambda)^{-1} \vec{N}(0) \quad , \quad (3.11)$$

onde  $\mathfrak{S}$  é a matriz identidade de ordem  $L - 1$ .

Agora vamos diagonalizar  $\Lambda$  por uma transformação de similaridade [3]. Portanto, escrevemos

$$\Lambda \vec{x}_1 = -\lambda_1 \vec{x}_1, \quad -\lambda_1 \text{ é autovalor de } \Lambda \text{ e } \vec{x}_1 \text{ é autovetor correspondente}$$

$$\Lambda \vec{x}_2 = -\lambda_2 \vec{x}_2, \quad -\lambda_2 \text{ é autovalor de } \Lambda \text{ e } \vec{x}_2 \text{ é autovetor correspondente}$$

$\vdots$

$$\Lambda \vec{x}_{L-1} = -\lambda_{L-1} \vec{x}_{L-1}, \quad -\lambda_{L-1} \text{ é autovalor de } \Lambda \text{ e } \vec{x}_{L-1}$$

é autovetor correspondente. Em forma mais compacta obtemos

$$\Lambda \begin{pmatrix} \vec{x}_1 & \vec{x}_2 & \dots & \vec{x}_{L-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\lambda_1 \vec{x}_1 & -\lambda_2 \vec{x}_2 & \dots & -\lambda_{L-1} \vec{x}_{L-1} \end{pmatrix},$$

ou equivalentemente

$$\Lambda X = X D(-\lambda_k),$$

onde  $D(-\lambda_k)$  é a matriz diagonal com elementos não-nulos  $\lambda_k, k = 1 : L - 1$ .

Pós-multiplicando por  $X^{-1}$ , obtemos

$$\Lambda = X D(-\lambda_k) X^{-1} \quad ,$$

isto é,

$$\Lambda = XDX^{-1} \quad , \quad (3.12)$$

que é uma relação de equivalência denominada de relação de similaridade entre a matriz  $\Lambda$  e a matriz diagonal  $D$  cujas entradas não nulas são os  $L - 1$  autovalores de  $\Lambda$  iguais a  $-\lambda_k, k = 1 : (L - 1)$ .

Substituindo a equação (3.12) na equação (3.11), obtemos

$$\vec{\eta}(s) = (s\mathfrak{S} - XDX^{-1})^{-1}\vec{N}(0)$$

$$\vec{\eta}(s) = [sXX^{-1} - XDX^{-1}]^{-1}\vec{N}(0)$$

$$\vec{\eta}(s) = [X(s\mathfrak{S} - D)X^{-1}]^{-1}\vec{N}(0)$$

$$\vec{\eta}(s) = X(s\mathfrak{S} - D)^{-1}X^{-1}\vec{N}(0) \quad . \quad (3.13)$$

Aqui temos

$$s\mathfrak{S} - D = \begin{bmatrix} s + \lambda_1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & s + \lambda_2 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & s + \lambda_3 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & s + \lambda_{L-1} \end{bmatrix}$$

e claramente

$$(s\mathfrak{S} - D)^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{s + \lambda_1} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{1}{s + \lambda_2} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{s + \lambda_3} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \frac{1}{s + \lambda_{L-1}} \end{bmatrix} \quad .$$

Aplicando a transformada inversa de Laplace  $\mathcal{L}^{-1}$  na equação (3.13), obtemos

$$\mathcal{L}^{-1}[\vec{\eta}(s)] = X \mathcal{L}^{-1}(s\mathfrak{S} - D)^{-1} X^{-1} \vec{N}(0) \quad ,$$

isto é

$$\vec{N}(t) = X E(-\lambda_k t) X^{-1} \vec{N}(0) \quad , \quad (3.14)$$

onde as entradas da matriz  $X$  são definidas como

$$X_{ij} = \begin{cases} i = j, & x_{ij} = 1 \\ i < j, & x_{ij} = 0 \\ i > j, & x_{ij} = \frac{\prod_{k=j}^{i-1} \lambda_k}{\prod_{k=j}^{i-1} (\lambda_{k+1} - \lambda_j)} \quad , \end{cases} \quad (3.15)$$

os elementos da matriz  $X^{-1}$  são dados por

$$X_{ij}^{-1} = \begin{cases} i = j, & x_{ij}^{-1} = 1 \\ i < j, & x_{ij}^{-1} = 0 \\ i > j, & x_{ij}^{-1} = \frac{\prod_{k=j}^{i-1} \lambda_k}{\prod_{k=j}^{i-1} (\lambda_i - \lambda_k)} \quad , \end{cases} \quad (3.16)$$

e os elementos da matriz diagonal  $E(-\lambda_k t)$  aparecem como

$$E(-\lambda_k t) = \begin{cases} i = j, & e_{ij} = e^{-\lambda_i t} \\ i \neq j, & e_{ij} = 0 \quad . \end{cases} \quad (3.17)$$

Neste ponto, observamos que as definições de construções das matrizes  $X$ ,  $X^{-1}$  e  $E$  dadas pelas equações (3.15), (3.16) e (3.17) foram estabelecidas empiricamente pela observação de cadeias simples com poucos decaimentos, e.g.,  $L = 2$ ,  $L = 3$ ,  $L = 4$ , etc. Estas definições simplificaram bastante a construção do aplicativo computacional  $LTRad_L$ , considerando que não foi preciso inverter a matriz  $X$  usando técnicas da álgebra linear numérica no algoritmo; determinamos a matriz  $X^{-1}$  por construção, usando a equação (3.16). Como exemplo, para  $L = 5$ , a matriz  $X$  e a matriz  $X^{-1}$  são dadas por

$$X = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\lambda_1}{(\lambda_2 - \lambda_1)} & 1 & 0 & 0 \\ \frac{\lambda_1 \lambda_2}{(\lambda_2 - \lambda_1)(\lambda_3 - \lambda_1)} & \frac{\lambda_2}{(\lambda_3 - \lambda_1)} & 1 & 0 \\ \frac{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3}{(\lambda_2 - \lambda_1)(\lambda_3 - \lambda_1)(\lambda_4 - \lambda_1)} & \frac{\lambda_2 \lambda_3}{(\lambda_3 - \lambda_1)(\lambda_4 - \lambda_1)} & \frac{\lambda_3}{(\lambda_4 - \lambda_1)} & 1 \end{bmatrix}$$

e

$$X^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-\lambda_1}{(\lambda_2 - \lambda_1)} & 1 & 0 & 0 \\ \frac{-\lambda_1 \lambda_2}{(\lambda_3 - \lambda_1)(\lambda_3 - \lambda_2)} & \frac{-\lambda_2}{(\lambda_3 - \lambda_2)} & 1 & 0 \\ \frac{-\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3}{(\lambda_4 - \lambda_1)(\lambda_4 - \lambda_2)(\lambda_4 - \lambda_3)} & \frac{-\lambda_2 \lambda_3}{(\lambda_4 - \lambda_2)(\lambda_4 - \lambda_3)} & \frac{-\lambda_3}{(\lambda_4 - \lambda_3)} & 1 \end{bmatrix} .$$

Fazendo o produto da matriz  $X$  pela matriz  $X^{-1}$ , obtemos a matriz identidade de ordem 4.

Neste ponto, incluímos o caso do último isótopo estável ( $\lambda_L = 0$ ), cuja concentração é modelada pela equação (3.7). Portanto, obtemos

$$\frac{dN_L}{dt} = \lambda_{L-1} \text{linha}_{L-1}(X) E(-\lambda_i t) X^{-1} \text{col}(N_{i0}), i = 1 : (L-1) \quad , \quad (3.18)$$

onde definimos:

- $\text{linha}_{L-1}(X) = (L-1)$ -ésimo vetor-linha da matriz  $X$ ;
- $\text{col}(N_{i0}) =$  vetor-coluna  $\vec{N}_0$  .

A equação (3.18) pode ser reescrita na forma

$$dN_L = \lambda_{L-1} \text{linha}_{L-1}(X) E(-\lambda_i t) dt (X^{-1}) \text{col}(N_{i0}), \quad (3.19)$$

$$i = 1 : (L-1) \quad .$$

Integrando a equação (3.19) no intervalo de  $t = 0$  até o instante de interesse, obtemos

$$\int_{N_{L0}}^{N_L(t)} dN_L = \lambda_{L-1} \text{linha}_{L-1}(X) \text{diag} \left( \int_0^t e^{-\lambda_i t} dt \right) (X^{-1}) \text{col}(N_{i0}) \quad (3.20)$$

$$i = 1 : (L - 1) \quad ,$$

onde *diag* simboliza matriz diagonal, ou, equivalentemente,

$$N_L(t) = \lambda_{L-1} \text{linha}_{L-1}(X) \text{diag} \left( \frac{1 - e^{-\lambda_i t}}{\lambda_i} \right) (X^{-1}) \text{col}(N_{i0}) + N_{L0}, i = 1 : (L - 1) \quad . \quad (3.21)$$

No próximo capítulo descrevemos sucintamente o código computacional *LTRad<sub>L</sub>* que desenvolvemos para modelar cadeias radioativas com  $L$  isótopos.

## 4 MODELAGEM COMPUTACIONAL

O nosso modelo computacional foi desenvolvido na plataforma livre Scilab<sup>1</sup>, que é um ambiente voltado para computação numérica. Scilab foi criado em 1990 por um grupo de pesquisadores do INRIA<sup>2</sup>- Institut de Recherche en Informatique et en Automatique e do ENPC - École Nationale des Ponts et Chaussées. Desde 1994, quando passou a estar disponível na Internet, Scilab é gratuito, *free software*, e distribuído com o código fonte, *open source software*.

Para obter o resultado numérico para o problema de decaimento radioativo

$$\frac{d\vec{N}}{dt} = -\lambda\vec{N} \quad ,$$

sujeito às condições iniciais

$$\vec{N}(0) = \vec{N}_0 \quad ,$$

apresentamos o algoritmo computacional  $LTRad_L$  desenvolvido.

### Entrada:

- 1 - Cadeia radioativa a ser simulada;
- 2 - Isótopo radioativo inicial e terminal;
- 3 - Instante de tempo da consulta;
- 4 - Condições iniciais;

### Passos intermediários:

**Passo 1** - Constrói a Matriz  $D$  que é uma matriz diagonal, usando a equação (3.17);

**Passo 2** - Constrói a Matriz  $X$  que é a matriz dos autovetores, usando a equação (3.15);

**Passo 3** - Constrói a Matriz  $V$  que é a inversa da matriz  $X$ , usando a equação (3.16);

**Passo 4** - Determina a Matriz  $C$  que é a matriz produto de  $X$  por  $D$ ;

**Passo 5** - Determina a Matriz  $R$  que é a matriz produto de  $C$  por  $V$ ;

### Saída:

Determina o vetor  $U$  que é o Resultado Numérico da simulação, cf. a equação (3.14).

<sup>1</sup>Página do SCILAB: <http://www.scilab.org>

<sup>2</sup>Página do INRIA: <http://www.inria.fr>

Neste ponto observamos que se o  $L$  –ésimo isótopo é estável, então  $\lambda_L = 0$ , e usamos a equação (3.21) para determinarmos a concentração  $N_L(t)$  no instante de tempo da consulta.

A seguir, apresentamos na figura 5 um fluxograma sobre o código computacional desenvolvido.

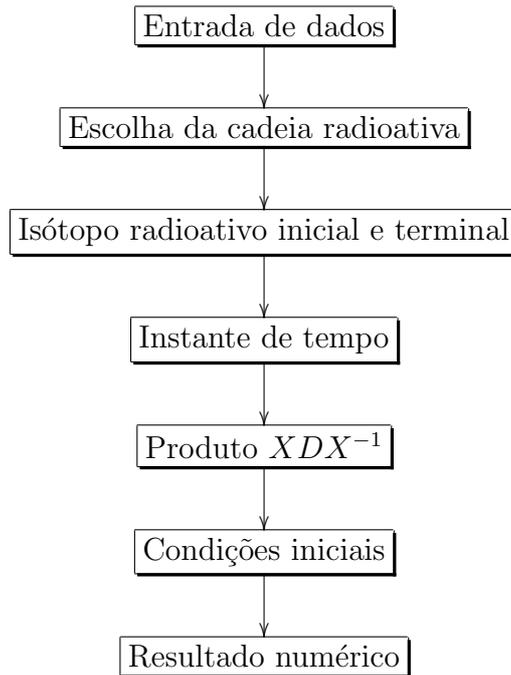


Figura 5 - Fluxograma do código  $LTRad_L$ .

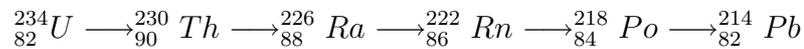
Enfatizamos que a modelagem computacional apresentada neste capítulo que é implementada pelo aplicativo  $LTRad_L$  admite como dados de entrada as concentrações ou as massas dos isótopos envolvidos.

No próximo capítulo apresentamos resultados numéricos para três problemas típicos.

## 5 RESULTADOS NUMÉRICOS

A seguir apresentamos três exemplos numéricos para ilustrar a eficiência do aplicativo desenvolvido nesta dissertação.

O primeiro problema modelo representa o decaimento radioativo por emissão  $\alpha$



através de um fragmento da Cadeia do Urânio. O instante de tempo da consulta foi 100.000 anos ou  $3,1536 \times 10^{12}$  segundos. As condições iniciais do problema em unidades de massa da amostra para cada elemento são

$$\begin{aligned} m_4(0) &= 10g \\ m_5(0) &= 2g \\ m_6(0) &= 1g \\ m_7(0) &= 3g \\ m_8(0) &= 0.5g \\ m_9(0) &= 0g \quad , \end{aligned}$$

onde os índices referem-se às ordens dos isótopos na cadeia, cf. figura 2.

Matriz diagonal no instante de tempo  $t$  desejado

$$D = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0,99 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} .$$

Matriz dos autovetores

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 4,4 \times 10^{-1} & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 9,5 \times 10^{-3} & 2,2 \times 10^{-2} & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 6,1 \times 10^{-8} & 1,4 \times 10^{-7} & 6,5 \times 10^{-6} & 1 & 0 & 0 \\ 3,4 \times 10^{-11} & 7,8 \times 10^{-11} & 3,6 \times 10^{-9} & 5,5 \times 10^{-4} & 1 & 0 \\ 3,0 \times 10^{-10} & 6,9 \times 10^{-10} & 3,2 \times 10^{-8} & 4,9 \times 10^{-3} & -1,1 \times 10^0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Matriz  $X^{-1}$  que é a inversa da matriz X dos autovetores

$$X^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -4,4 \times 10^{-1} & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1,4 \times 10^{-4} & -2,2 \times 10^{-2} & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -3,7 \times 10^{-20} & 8,9 \times 10^{-13} & -6,5 \times 10^{-6} & 1 & 0 & 0 \\ 3,5 \times 10^{-33} & -1,5 \times 10^{-22} & 2,0 \times 10^{-12} & -5,5 \times 10^{-4} & 1 & 0 \\ -2,4 \times 10^{-29} & 1,2 \times 10^{-19} & -1,7 \times 10^{-10} & 5,5 \times 10^{-3} & 1,1 \times 10^0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Matriz C que é definida como o produto de X por D

$$C = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 4,4 \times 10^{-1} & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 9,5 \times 10^{-3} & 2,2 \times 10^{-2} & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 6,1 \times 10^{-8} & 1,4 \times 10^{-7} & 6,5 \times 10^{-6} & 1,0 \times 10^0 & 0 & 0 \\ 3,4 \times 10^{-11} & 7,8 \times 10^{-11} & 3,6 \times 10^{-9} & 5,5 \times 10^{-4} & 9,9 \times 10^{-1} & 0 \\ 3,0 \times 10^{-10} & 6,9 \times 10^{-10} & 3,2 \times 10^{-8} & 4,9 \times 10^{-3} & -1,1 \times 10^0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Matriz R que é definida como o produto de C por  $X^{-1}$

$$R = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2,7 \times 10^{-13} & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -3,3 \times 10^{-19} & 8,7 \times 10^{-13} & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -7,2 \times 10^{-25} & -3,9 \times 10^{-24} & 4,1 \times 10^{-11} & 1 & 0 & 0 \\ -3,5 \times 10^{-27} & -1,3 \times 10^{-26} & 1,3 \times 10^{-16} & 6,3 \times 10^{-6} & 9,9 \times 10^{-1} & 0 \\ -6,9 \times 10^{-26} & 2,3 \times 10^{-19} & -3,5 \times 10^{-10} & 1,1 \times 10^{-2} & 1,1 \times 10^{-2} & 1 \end{pmatrix}.$$

Resultado numérico no instante de tempo desejado ( $t = 100.000$  anos)

$U =$

$$m_4(3,1536 \times 10^{12}) = 7,6g$$

$$m_5(3,1536 \times 10^{12}) = 2,4g$$

$$m_6(3,1536 \times 10^{12}) = 5,0 \times 10^{-2}g$$

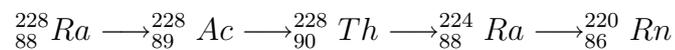
$$m_7(3,1536 \times 10^{12}) = 3,3 \times 10^{-7}g$$

$$m_8(3,1536 \times 10^{12}) = 1,8 \times 10^{-10} g$$

$$m_9(3,1536 \times 10^{12}) = 1,6 \times 10^{-9} g$$

Observando os resultados gerados para  $t = 100.000$  anos, vemos que a massa do elemento inicial da modelagem  ${}^{234}_{92}U$  reduziu significativamente, considerando que a meia-vida deste isótopo é também bastante longa (245.500 anos). Entretanto, a massa do próximo isótopo radioativo na cadeia considerada aumentou ligeiramente, pois a meia-vida do  ${}^{230}_{90}Th$  é menos longa (75.380 anos) e existe uma fonte como resultado do decaimento  $\alpha$  do seu precursor ( ${}^{234}_{92}U$ ) durante estes 100.000 anos. O terceiro isótopo na cadeia considerada é o  ${}^{226}_{88}Ra$  que teve sua massa reduzida de 1 g para 0,05 g (20 vezes menor) em 100.000 anos. Isto deve-se ao fato de este isótopo possuir meia-vida relativamente curta (1.602 anos) comparativamente ao período de tempo observado, apesar da mais longa meia-vida de seu precursor. Os três últimos isótopos praticamente desapareceram pois suas meias-vidas são extremamente curtas comparativamente com o período observado. Após a apresentação dos resultados numéricos do terceiro problema modelo, mostramos os gráficos dos decaimentos  $\alpha$  simulados neste problema.

O segundo problema modelo representa o decaimento em cadeia



através de um fragmento da Cadeia do Tório. O instante de tempo da consulta foi 5 horas ou 18000 segundos. As condições iniciais do problema em unidades de massa de cada elemento da amostra é

$$m_2(0) = 10g$$

$$m_3(0) = 6g$$

$$m_4(0) = 8g$$

$$m_5(0) = 3g$$

$$m_6(0) = 5g$$

Matriz diagonal no instante de tempo  $t$  desejado

$$D = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 5,7 \times 10^{-1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 9,6 \times 10^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1,7 \times 10^{-97} \end{pmatrix}.$$

Matriz dos autovetores

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1,2 \times 10^{-4} & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 5,0 \times 10^{-1} & -1 & 1 & 0 & 0 \\ 2,6 \times 10^{-3} & 3,9 \times 10^{-4} & 5,3 \times 10^{-3} & 1 & 0 \\ 4,7 \times 10^{-7} & 7,0 \times 10^{-8} & 9,3 \times 10^{-7} & 1,8 \times 10^{-4} & 1 \end{pmatrix}.$$

Matriz inversa da matriz X dos autovetores

$$X^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1,2 \times 10^{-4} & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 5,0 \times 10^{-1} & 1 & 1 & 0 & 0 \\ -9,9 \times 10^{-6} & -5,6 \times 10^{-3} & -5,3 \times 10^{-3} & 1 & 0 \\ 1,3 \times 10^{-19} & -4,2 \times 10^{-13} & 1,7 \times 10^{-10} & -1,8 \times 10^{-4} & 1 \end{pmatrix}.$$

Matriz C que é definida como o produto de X por D

$$C = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1,2 \times 10^{-4} & 5,7 \times 10^{-1} & 0 & 0 & 0 \\ 5,0 \times 10^{-1} & -5,7 \times 10^{-1} & 1 & 0 & 0 \\ 2,6 \times 10^{-3} & 2,2 \times 10^{-4} & 5,3 \times 10^{-3} & 9,6 \times 10^{-1} & 0 \\ 4,7 \times 10^{-7} & 4,0 \times 10^{-8} & 9,3 \times 10^{-7} & 1,7 \times 10^{-4} & 1,7 \times 10^{-97} \end{pmatrix}.$$

Matriz R que é definida como o produto de C por  $X^{-1}$

$$R = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 5,3 \times 10^{-5} & 5,7 \times 10^{-1} & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 4,3 \times 10^{-1} & 1 & 0 & 0 \\ 5,3 \times 10^{-3} & 4,8 \times 10^{-5} & 2,0 \times 10^{-4} & 9,6 \times 10^{-1} & 0 \\ 9,4 \times 10^{-7} & 8,5 \times 10^{-9} & 3,6 \times 10^{-8} & 1,7 \times 10^{-4} & 1,7 \times 10^{-97} \end{pmatrix}.$$

Resultado numérico no instante de tempo desejado ( $t = 5$  horas)

$$m_2(18000) = 10g$$

$$m_3(18000) = 3,4g$$

$$m_4(18000) = 21g$$

$$m_5(18000) = 2,9g$$

$$m_6(18000) = 5,2 \times 10^{-4}g$$

Observando os resultados gerados pelo aplicativo  $LTRad_L$  para o trecho da cadeia do Tório que constitui o nosso segundo problema-modelo, ressaltamos que:

- a massa do isótopo  ${}^{228}_{88}Ra$  permanece inalterada nas 5 horas pois a sua meia-vida é extremamente longa (5,7 anos);
- a massa do seu filho  ${}^{228}_{89}Ac$  por decaimento  $\beta^-$  reduziu praticamente à metade, pois sendo a fonte do precursor ( ${}^{228}_{88}Ra$ ) praticamente nula no período, o isótopo  ${}^{228}_{89}Ac$  decai significativamente em 5 horas pois sua meia-vida é relativamente curta (6,1 horas);
- a massa do  ${}^{228}_{90}Th$  aumenta significativamente de 8 g para 21 g em 5 horas. Isto deve-se à curta meia-vida de seu precursor (6,1 horas) aliada à sua longuíssima meia-vida (1,9 anos);
- a massa do  ${}^{224}_{88}Ra$  praticamente não se altera nas 5 horas investigadas. Isto pode ser explicado por sua longuíssima meia-vida (3,6 anos) e de seu precursor (1,9 anos);
- o isótopo radioativo  ${}^{220}_{86}Rn$  praticamente desaparece nas 5 horas de investigação pois sua meia-vida é curtíssima (55 segundos).

Após a apresentação dos resultados do próximo problema modelo, mostramos os gráficos dos decaimentos simulados neste problema.

O terceiro problema modelo representa o decaimento em cadeia



através de um fragmento terminal da Cadeia do Actínio, que chega ao isótopo estável. O instante de tempo da consulta foi 20 minutos ou 1200 segundos. As condições iniciais do

problema em unidades de massa da amostra para cada elemento são

$$m_9(0) = 100g$$

$$m_{10}(0) = 50g$$

$$m_{11}(0) = 20g$$

$$m_{12}(0) = 10g$$

Matriz diagonal no instante de tempo  $t$  desejado

$$D = \begin{pmatrix} 6,8 \times 10^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & 1,6 \times 10^{-3} & 0 \\ 0 & 0 & 5,5 \times 10^{-2} \end{pmatrix}.$$

Matriz dos autovetores

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 6,3 \times 10^{-2} & 1 & 0 \\ 1,6 \times 10^{-1} & -1,8 & 1 \end{pmatrix}.$$

Matriz inversa da matriz  $X$  dos autovetores

$$X^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ -6,3 \times 10^{-2} & 1 & 0 \\ 2,8 \times 10^{-1} & 1,8 & 1 \end{pmatrix}.$$

Matriz  $C$  que é definida como o produto de  $X$  por  $D$

$$C = \begin{pmatrix} 6,8 \times 10^{-1} & 0 & 0 \\ 4,3 \times 10^{-2} & 1,6 \times 10^{-3} & 0 \\ 1,1 \times 10^{-1} & 2,9 \times 10^{-3} & 5,5 \times 10^{-2} \end{pmatrix}.$$

Matriz  $R$  que é definida como o produto de  $C$  por  $V$

$$R = \begin{pmatrix} 6,8 \times 10^{-1} & 0 & 0 \\ 4,3 \times 10^{-2} & 1,6 \times 10^{-3} & 0 \\ 1,3 \times 10^{-1} & 9,7 \times 10^{-2} & 5,5 \times 10^{-2} \end{pmatrix}.$$

Resultado numérico no instante de tempo desejado para os isótopos radioativos

$$m_9(1200) = 68g$$

$$m_{10}(1200) = 4,4g$$

$$m_{11}(1200) = 19g$$

Resultado numérico para o isótopo estável

$$m_{12}(1200) = 140g$$

Com base nos resultados gerados por este experimento numérico, vemos que:

- a massa do  ${}^{211}_{82}Pb$  reduziu pois o mesmo possui meia-vida de 36,1 minutos que é comparável em ordem de grandeza aos 20 minutos de investigação;
- a massa do  ${}^{211}_{83}Bi$  reduziu significativamente pois, apesar da curta meia-vida de seu precursor (36,1 minutos), sua meia-vida é extremamente curta (2,1 minutos);
- a massa do  ${}^{207}_{81}Tl$  reduziu ligeiramente nesses 20 minutos pois seu precursor tem meia-vida muito curta (2,1 minutos) e ele também possui meia-vida relativamente curta (4,7 minutos) comparadas com o período de investigação;
- a massa do isótopo estável terminal da cadeia do Actínio ( ${}^{207}_{82}Pb$ ) cresceu significativamente nesses 20 minutos, de 10 g para 140 g, devido à curta meia-vida de seu precursor sem a presença de decaimento radioativo do  ${}^{207}_{82}Pb$  que é estável, só havendo acúmulo.

A seguir, apresentamos os gráficos dos decaimentos simulados nos três problemas vistos acima.

Apresentamos os gráficos ilustrativos dos 5 decaimentos  $\alpha$  modelados no problema-modelo número 1 da cadeia radioativa natural do Urânio.

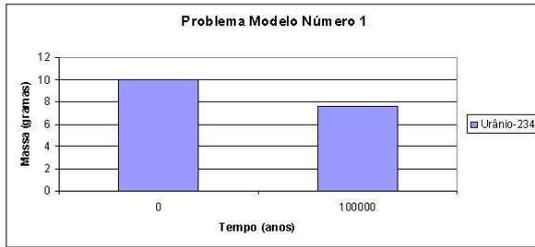


Figura 6 - Isótopo do U-234.

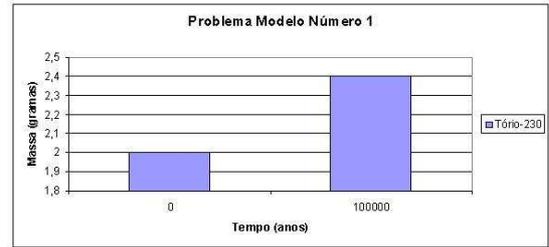


Figura 7 - Isótopo do Th-230.

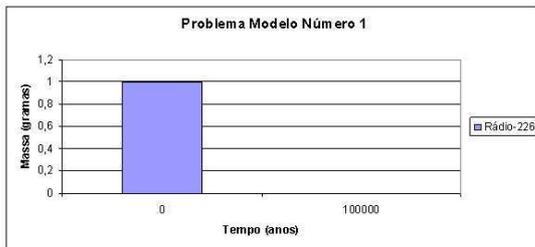


Figura 8 - Isótopo do Ra-226.

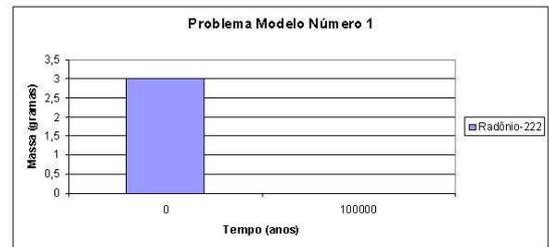


Figura 9 - Isótopo do Rn-222.

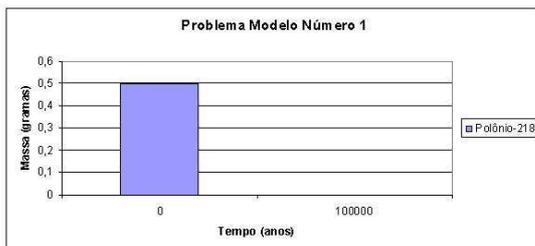


Figura 10 - Isótopo do Po-218.

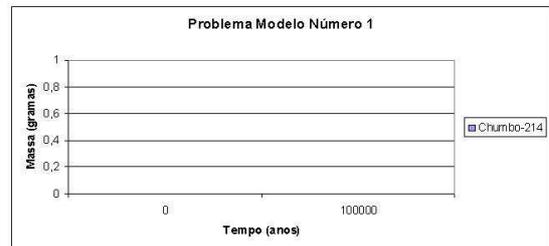


Figura 11 - Isótopo do Pb-214.

Agora apresentamos os gráficos ilustrativos dos 4 decaimentos modelados no problema-modelo número 2 da cadeia radioativa natural do Tório.

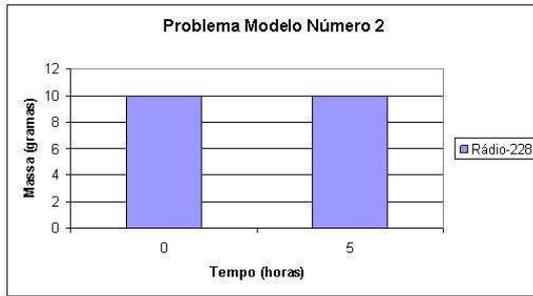


Figura 12 - Isótopo do Ra-228.

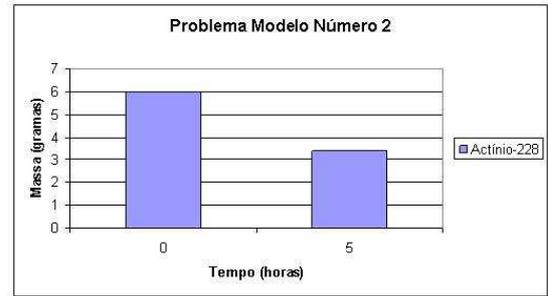


Figura 13 - Isótopo do Ac-228.

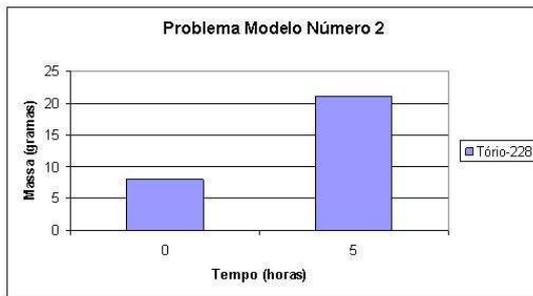


Figura 14 - Isótopo do Th-228.

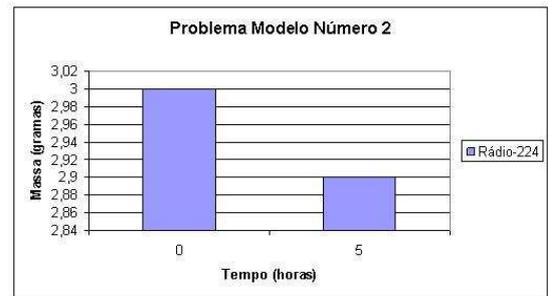


Figura 15 - Isótopo do Ra-224.

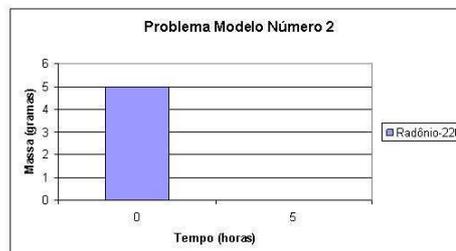


Figura 16 - Isótopo do Rn-220.

Concluindo, apresentamos os gráficos ilustrativos dos 3 decaimentos modelados no problema-modelo número 3 da cadeia radioativa natural do Actínio.

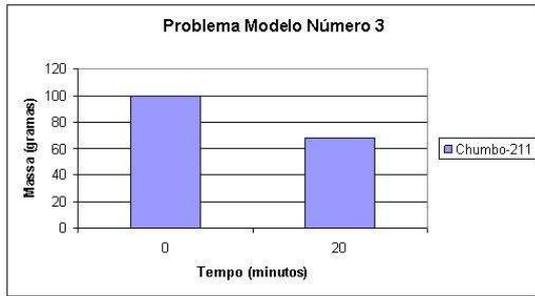


Figura 17 - Isótopo do Pb-211.

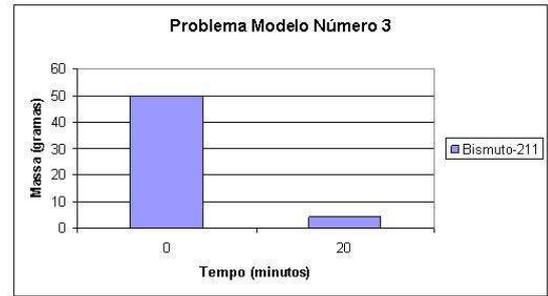


Figura 18 - Isótopo do Bi-211.

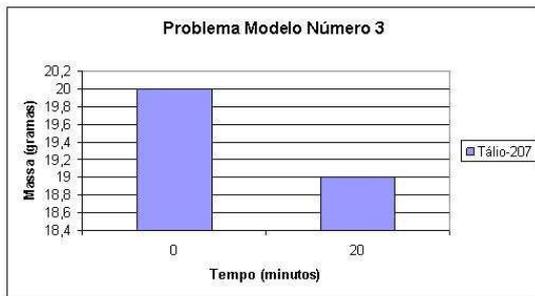


Figura 19 - Isótopo do Tl-207.

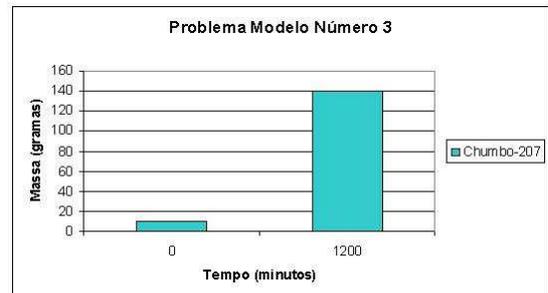


Figura 20 - Isótopo do Pb-207.

## 6 CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Desenvolvemos neste trabalho de dissertação um aplicativo computacional  $LTRad_L$  usando a plataforma livre Scilab que implementa o método da transformada de Laplace [2] na formulação matricial para solução analítica de problemas de decaimento radioativo. Seguindo a escola determinística de modelagem matemática, o problema físico de decaimento radioativo é modelado matematicamente por um problema de valor inicial representado por uma equação, ou um sistema de equações diferenciais ordinárias.

Visando à modelagem computacional determinística, podemos gerar soluções para o problema de valor inicial de interesse nesta dissertação usando métodos numéricos clássicos, e.g., o método implícito trapezoidal ou o método explícito de Runge-Kutta de quarta ordem [4]. Entretanto, devido principalmente às grandes variações que pode haver nas meias-vidas dos isótopos radioativos que podem pertencer a uma mesma cadeia, a grade de discretização temporal pode ser de difícil definição considerando os aspectos de precisão e estabilidade para a convergência da solução numérica. Ademais, pode haver a necessidade de um grande número de passos de tempo até concluirmos a modelagem desejada no instante de tempo da investigação. Por essas razões, optamos pelo método analítico de solução usando a formulação matricial do problema com a técnica da transformada de Laplace. Conforme apresentamos no Capítulo 3, separamos a última equação diferencial do isótopo estável e usamos a relação de similaridade para diagonalização da matriz resultante. Com isso, identificamos uma forma genérica de construção da matriz diagonalizante e de sua inversa para simplificar o procedimento de inversão da transformada de Laplace e obtenção da solução numérica analítica do problema de valor inicial no instante de tempo da investigação. Com esses resultados podemos determinar a concentração ou a massa do isótopo estável, conforme descrevemos no Capítulo 3. Portanto, de acordo com os resultados dos três problemas-modelos considerados no capítulo anterior, afora os erros de arredondamento da aritmética finita computacional, os resultados numéricos gerados pelo aplicativo  $LTRad_L$  coincidem com os resultados gerados a partir da solução analítica do problema de valor inicial que modela matematicamente o fenômeno do decaimento radioativo.

Como trabalhos futuros, sugerimos incluir um laço no algoritmo computacional para determinarmos soluções em passos de tempo intermediários para construções de

gráficos da evolução de cada isótopo da cadeia. Sugerimos também considerar outras ramificações possíveis, ainda que menos prováveis, de decaimentos radioativos com meias-vidas mais curtas.

## REFERÊNCIAS

- 1 ENGE, H. *Introduction to Nuclear Physics*. Reading: Addison-Wesley Publishing Company, 1972.
- 2 KREYSZIG, Erwin. *Advanced engineering mathematics*. New York: John Wiley e Sons, 1967.
- 3 FRIEDBERG, S. H.; INSEL, A. J.; SPENCE, L. E. *Linear Algebra*. Englewood Cliffs : Prentice Hall, 1979.
- 4 BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D. *Numerical Analysis*. Boston : Prindle, Weber & Schmidt, 1985.