

**Um aspecto relacionado à datação por trilhas de fissão**  
**(EP para o curso Cálculo Numérico para Geociências 2009 - Eduardo Colli)**

*Este texto não deve ser consultado para informações sobre geologia. Ele usa apenas os conceitos de geocronologia como motivação para um exercício de cálculo numérico. Inclusive, na introdução, há uma fórmula que não encontrei na literatura - ou seja, pode estar errada. Essa fórmula, no entanto, não é necessária nem para a compreensão nem para a realização da tarefa proposta. Se alguém quiser consultar um professor de geocronologia para verificar o texto, eu agradeço - assim, ele pode se tornar um material definitivo e disponível para outros alunos.*

**Datação por trilhas de fissão.** Esse método vem sendo utilizado para datação de rochas, em apoio a outros métodos mais tradicionais. Há controvérsias sobre ele, no mérito das quais não entraremos. Uma das possíveis objeções pode ser “resolvida” pelos dados fornecidos e pela tarefa proposta. A fonte (secundária) principal desse trabalho é o livro “Radiogenic Isotope Geology”, de A. P. Dickin.

As rochas são marcadas por “buracos” originados da energia cinética dos subprodutos do decaimento de isótopos radioativos, sendo  $U^{238}$  o principal responsável. Em cortes planos, esses buracos são vistos (após tratamento) como “trilhas”, que têm largura característica. O comprimento pode depender da direção do buraco em relação ao plano de corte.

A contagem das trilhas fornece, portanto, a quantidade de decaimento que ocorreu na rocha. Supondo que o decaimento de  $U^{238}$  seja o único a provocar o surgimento de trilhas e examinando sua quantidade remanescente na rocha, é possível estimar a idade do material.

Para o exercício não precisaremos saber como isso é feito, exatamente. Mas arrisco-me a tentar deduzir, ao menos em teoria, a matemática necessária para a estimativa da idade, com o intuito de motivar os jovens estudantes do curso de geologia. É este trecho a que me referi em *itálico*, acima. A dedução provém da referência citada, mas não termina como ela. Ou seja, ou eu errei ou o livro errou.

Dando nomes aos bois, podemos chamar de  $D$  a quantidade total de trilhas na rocha (mais adiante será conveniente pensar em densidades, mas para as deduções é sempre mais fácil pensar em quantidades absolutas). A quantidade de urânio (medida como queira, por exemplo em quantidade de átomos) ao longo do tempo é denotada pela função  $U(t)$ , com  $U_0 = U(0)$  representando a quantidade inicial, que é desconhecida, em princípio. Aqui supomos que  $t = 0$  é o instante de formação da rocha que, embora não seja precisamente um instante, é um intervalo de tempo muito pequeno na escala geológica.

O urânio decai a uma taxa  $\lambda$  conhecida. Isto quer dizer que  $U'(t) = -\lambda U(t)$ , ou seja, a taxa de variação da quantidade de urânio (ou a taxa de decaimento) é proporcional à quantidade do isótopo e negativa. É fácil mostrar usando o cálculo que  $U(t)$  tem que ser igual a  $e^{-\lambda t}U_0$ . Bom, você pode pelo menos verificar que  $U(t) = e^{-\lambda t}U_0$  satisfaz  $U'(t) = -\lambda U(t)$  para todo  $t$  e  $U(0) = U_0$ , mas eu garanto que essa é a *única* solução.

Em particular, a perda de urânio com o tempo é dada diretamente por  $U'(t) = -\lambda e^{-\lambda t}U_0$ . Essa última função indica a quantidade de decaimentos por unidade de tempo, ao longo do tempo, se trocado o sinal. Se quisermos saber quantos decaimentos houve entre  $t = 10^6$  e  $t = 2 \times 10^6$ , basta integrar

$$\int_{10^6}^{2 \times 10^6} \lambda e^{-\lambda t} U_0 dt.$$

Em particular, se  $T$  é a idade da rocha, a *quantidade total de decaimentos* será

$$\int_0^T \lambda e^{-\lambda t} U_0 dt = -U_0 e^{-\lambda t} \Big|_0^T = U_0(1 - e^{-\lambda T}).$$

Agora introduzimos uma taxa  $\alpha$ , entre 0 e 1, que indica a fração dos decaimentos que gera uma trilha (creio que isso poderia ser melhor na modelagem, mas não tenho subsídios experimentais e teóricos para propor outra coisa). Então o número de trilhas será

$$D = \alpha U_0(1 - e^{-\lambda T}).$$

Acontece que  $U_0$  não é determinável (a não ser por outros métodos), mas  $U(T)$ , que é a quantidade atual de urânio, é. Como  $U(T) = U_0 e^{-\lambda T}$ , então podemos substituir  $U_0 = e^{\lambda T} U(T)$  na expressão, e ficaremos com

$$D = \alpha U(T)(e^{\lambda T} - 1).$$

Para determinar  $T$ , basta isolá-lo na equação, já que  $D$  pode ser determinado por contagem de trilhas,  $U(T)$  pode ser determinado por métodos específicos, e  $\alpha$  e  $\lambda$  são constantes medidas experimentalmente. Resulta que

$$T = \frac{1}{\lambda} \log\left(1 + \frac{D}{\alpha U(T)}\right).$$

**O problema da fundição.** Com as técnicas adequadas de contagem e a partir da última fórmula poder-se-ia chegar à idade da rocha, mas infelizmente a natureza não é tão “exata” assim. Um dos problemas desse método é que as rochas sofrem processos geológicos ao longo de sua existência, muitas vezes se submetendo a grandes temperaturas que de alguma forma “fundem” o material e, por exemplo, estragam as trilhas formadas pela fissão do urânio.

Veja que um único e intenso processo de aquecimento pode zerar toda as marcas de trilha. Neste caso, o processo de datação ainda funciona, não mais para determinar a idade da rocha original mas agora para determinar a idade desse processo térmico. Até aí sem muitos problemas, porque o método é capaz de trazer ao menos alguma informação cronológica.

No entanto, esses processos de aquecimento podem ser vários e não tão intensos a ponto de zerar as trilhas. Um processo de aquecimento a uma dada temperatura é capaz de apagar algumas trilhas e reduzir a largura de outras, deixando o material com uma densidade menor de trilhas e com largura média menor do que as trilhas originais.

Os experimentos cujos dados vamos utilizar testaram diferentes tempos e temperaturas de fundição (dispensem-me dos detalhes de material e do experimento, por favor). Vamos numerar os experimentos de 1 a  $N$ , usando o índice  $i$ . Em cada experimento  $i$  foram utilizados valores determinados de temperatura e tempo de fundição (dados aos quais não temos acesso). No experimento  $i$ , o *fator de redução da densidade das trilhas* foi o número  $d_i$ , entre 0 e 1, e o *fator de redução da largura média das trilhas* foi  $\ell_i$ , também entre 0 e 1. Esses dados se encontram no arquivo DadosEP1.txt, em duas colunas, a primeira para os valores de  $d_i$  (que usaremos sempre na abscissa) e a segunda para os valores de  $\ell_i$ .

Importe os dados no Scilab e faça um gráfico. Você verá que há uma forte correlação entre as variáveis  $\ell$  e  $d$ , sugerindo que existe mesmo uma dependência do tipo  $\ell = f(d)$

capaz de prever a largura média em função da densidade, e vice-versa. Veja que, com isso, seria possível determinar a densidade original de trilhas antes da fundição (com o objetivo de, a partir daí, determinar-se a idade da rocha usando o desenvolvimento acima). Como se faz isso?

Você analisa um material e vê que a largura média dessas trilhas, comparada com a largura média das trilhas que não passam pelo processo de fundição, é  $\ell_0$ . Com isso, você determina que o fator de redução da densidade  $d_0$  deve ser  $d_0 = f^{-1}(\ell_0)$  (seria preciso inverter a suposta  $f$ , mas nada que um gráfico bem feito não resolva, sem prejuízo da precisão). Além disso, você pode medir a densidade das trilhas observadas, digamos  $\gamma$ . Então a densidade original, que foi reduzida do fator  $d_0$  para chegar ao valor  $\gamma$ , era de

$$\frac{\gamma}{d_0}.$$

Tudo isso apenas para motivar o real objetivo deste EP: fazer ajuste de mínimos quadrados para os dados fornecidos, buscando expressões “razoáveis” para  $f$ , que sirvam como gabarito para a determinação da densidade original de trilhas num material que passou pelo processo de fundição.

**Preparação dos dados.** A primeira observação é que, obrigatoriamente,  $f(1) = 1$ . Este será o resultado do experimento em que nenhuma fundição é efetuada no material. Essa informação será levada em conta quando escolhermos as famílias de ajuste.

Uma das tentativas de ajuste será usando famílias de polinômios. Como impor  $f(1) = 1$  para um polinômio  $f$  não é tão confortável, faremos uma translação nas coordenadas. Chamaremos  $x = d - 1$  e  $y = \ell - 1$ . Como os  $(d_i, \ell_i)$ 's ficam no quadrado  $[0, 1] \times [0, 1]$ , agora os  $(x_i, y_i)$ 's ficam no quadrado  $[-1, 0] \times [-1, 0]$ . Chamaremos de  $g$  a função buscada nas novas coordenadas, isto é,  $y = g(x)$ . Agora a função  $g$  será obrigada a satisfazer  $g(0) = 0$ .

É importante saber como podemos obter  $f$  a partir de  $g$ . A função  $g$  será obtida do ajuste de mínimos quadrados, mas depois gostaremos de ter  $f$  à mão para utilizá-la. Ora, basta seguir o seguinte procedimento:

$$d \mapsto x = d - 1 \mapsto y = g(x) = g(d - 1) \mapsto \ell = y + 1 = g(d - 1) + 1.$$

Ou seja,

$$\ell = f(d) = g(d - 1) + 1.$$

Posto isso, podemos nos concentrar apenas nas escolhas de  $g$ .

**Dois ajustes lineares nos parâmetros: polinômios.** O ajuste mais natural é o ajuste polinomial, que é linear nos parâmetros. Ao impormos  $g(0) = 0$  não precisamos nos preocupar com o termo de grau zero do polinômio. Uma olhada no gráfico também nos mostra que a relação entre  $x$  e  $y$  não é linear - a derivada da função é maior perto de  $x = -1$ . Poderíamos arriscar um ajuste de polinômio quadrático, mas um exame visual mais fino permite concluir que a própria taxa de variação da derivada não parece constante. Então partimos para o ajuste cúbico.

No ajuste cúbico, buscam-se os parâmetros  $a, b, c$  que minimizem a diferença quadrática dos dados para a função  $ax + bx^2 + cx^3$ . Uma das tarefas será fazer esse ajuste. No entanto,

é possível também ver, a partir do exame visual, que o ponto de inflexão da função coincide com o zero. Como quando isso ocorre para um polinômio cúbico o termo de grau 2 é zero, então podemos simplesmente ajustar a família  $ax + bx^3$ . A ideia é fazer os dois ajustes e ver se do primeiro para o segundo há um grande aumento (relativo) da diferença quadrática. Se não houver, o segundo ajuste é mais recomendado por ser uma função mais simples.

**Dicas para resolver os problemas lineares.** Neste parágrafo, darei dicas para usar o Scilab na solução dos ajustes lineares. Em primeiro lugar, para ser coerente com o texto, é preciso carregar os vetores  $x$  e  $y$  em matrizes-linha, separadas.

Nos casos lineares, o Scilab facilita bastante a montagem dos sistemas. Suponha que  $A$  seja a matriz dos coeficientes do ajuste

$$A = \begin{pmatrix} \langle g_0, g_0 \rangle & \cdots & \langle g_0, g_k \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle g_k, g_0 \rangle & \cdots & \langle g_k, g_k \rangle \end{pmatrix}$$

e que  $t$  seja a matriz-coluna dos termos independentes:

$$t = \begin{pmatrix} \langle g_0, y \rangle \\ \vdots \\ \langle g_k, y \rangle \end{pmatrix}.$$

Para construir essas duas matrizes, construa antes a matriz

$$M = \begin{pmatrix} g_0(x_1) & g_0(x_2) & \cdots & g_0(x_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ g_k(x_1) & g_k(x_2) & \cdots & g_k(x_N) \end{pmatrix},$$

que é  $(k+1) \times N$ . Mesmo que  $M$  seja grande, cada linha pode ser expressa como uma única expressão do vetor  $x$ :

$$M = [g_0(x); g_1(x); \dots; g_k(x)],$$

trocando-se, evidentemente, os  $g_m$ 's por suas expressões explícitas. Cada ponto-e-vírgula indica uma quebra de linha.

Agora observe (observe mesmo!) que

$$A = M * M',$$

onde  $M'$  é a transposta de  $M$ , que é uma matriz  $N \times (k+1)$ . O símbolo  $*$  indica o produto matricial. Além disso,

$$t = M * y'.$$

Aí é só resolver o sistema linear  $Ap = t$ , onde  $p$  é o vetor-coluna de incógnitas, que são exatamente os parâmetros procurados. As dicas para fazer isso foram dadas no curso anteriormente.

**Ajuste não linear.** O terceiro ajuste proposto é não linear e, por isso, mais difícil de resolver (calma, eu ajudo). Esse ajuste se inspira no fato de que a função se parece também bastante com a função logaritmo, desde que com uma adequada translação no domínio e mudanças de escala no domínio e no contradomínio.

Veja que a função logaritmo de domínio nos reais positivos vai a menos infinito em  $x = 0$ , vale zero em  $x = 1$  e sua derivada é positiva e decrescente (é a função  $\frac{1}{x}$ ). Ela se parece com a relação buscada entre  $y$  e  $x$  nos dados experimentais, exceto que o zero da função que buscamos deve ocorrer para  $x = 0$ . Além disso, é preciso dar margem para dilatar ou contrair as direções horizontal e vertical independentemente. Isso é conseguido pela seguinte composição:

$$x \mapsto bx \mapsto bx + 1 \mapsto \log(bx + 1) \mapsto a \log(bx + 1) = g(x).$$

Na primeira operação, altera-se a escala da horizontal pelo fator  $b$  (positivo, em princípio). Depois soma-se 1, para em seguida aplicar o logaritmo. O resultado será uma função com a cara do logaritmo, com o zero em  $x = 0$  e assíntota em  $-1/b$ . Finalmente, multiplica-se pelo fator  $a$ , que fará a alteração de escala na vertical.

Observe que a família  $g(x) = a \log(bx + 1)$  não é linear nos parâmetros (até é em  $a$ , mas não em  $b$ ). Observe também que os truques de linearização discutidos no curso não parecem funcionar. A tentativa natural seria exponenciar os dois lados de  $y = a \log(bx + 1)$ , ficando com  $e^y = (bx + 1)^a$ , que ainda não é uma equação linear nos parâmetros.

Posto isso, tentaremos minimizar diretamente a diferença quadrática

$$Q(a, b) = \sum_{i=1}^N (y_i - a \log(bx + 1))^2.$$

A abordagem direta é procurar o(s) ponto(s) crítico(s) de  $Q$ . Se houver só um, ele será o mínimo (admitindo que existe o mínimo). Se houver mais de um, teremos que testar qual é o mínimo. Veremos que, felizmente, há só um.

De  $\frac{\partial Q}{\partial a} = 0$  obtemos

$$a = \frac{\langle y, \log(bx + 1) \rangle}{\langle \log(bx + 1), \log(bx + 1) \rangle},$$

fazendo contas semelhantes às que já fizemos anteriormente, simplesmente porque a família é linear no parâmetro  $a$ . No parâmetro  $b$  a não linearidade complica um pouco, mas não muito. De  $\frac{\partial Q}{\partial b} = 0$  resulta

$$a = \frac{\langle y, \frac{x}{bx+1} \rangle}{\langle \log(bx + 1), \frac{x}{bx+1} \rangle}.$$

Ficamos então com duas equações onde a incógnita  $a$  está isolada. Igualando as duas (e eliminando as frações), ficamos com uma equação em  $b$ :

$$\langle y, \log(bx + 1) \rangle \cdot \langle \log(bx + 1), \frac{x}{bx + 1} \rangle - \langle y, \frac{x}{bx + 1} \rangle \cdot \langle \log(bx + 1), \log(bx + 1) \rangle = 0.$$

Chamaremos de  $H(b)$  a expressão do lado esquerdo da equação (veja que  $x$  e  $y$  não são variáveis, pois como os produtos internos representam somas envolvendo os dados  $x_i$  e  $y_i$ , tudo na expressão vira número depois de explicitado, exceto o  $b$ ). Achando o(s) zero(s) de  $b$ , encontraremos os correspondentes valores de  $a$  com qualquer uma das duas equações acima que colocam  $a$  em função de  $b$ .

**Dicas para resolver o problema não linear.** Dado um  $b$ , a expressão de  $H(b)$  pode ser calculada com uma dica análoga às dadas para os problemas lineares. Por exemplo, se  $x$  e  $y$  são matrizes-linha com os dados, então  $\langle y, \log(bx + 1) \rangle$  se escreve, no Scilab, como

$$y * \log(bx + 1)'$$

Tome cuidado com o vetor  $\frac{1}{bx+1}$ . Escreva

$$(b * x + 1) . \wedge (-1)$$

(teste outras grafias, como  $1/(bx + 1)$  ou  $1./(bx + 1)$  para ver o que acontece). Eu sugiro definir vetores auxiliares

$$u = \log(bx + 1) , v = x * ((b * x + 1) . \wedge (-1))$$

para escrever

$$H(b) = (y * u') * (u * v') - (y * v') * (u * u')$$

A sugestão é achar o zero de  $H$  pelo *método de dissecção*, que consiste em cercar o ponto procurado por intervalos, sendo o intervalo da etapa seguinte uma das metades do intervalo da etapa anterior. A determinação de qual metade contém o zero de  $H$  é feita pela análise do sinal de  $H$  nos extremos de cada intervalo. Se o zero de  $H$  está no intervalo então o sinal de  $H$  em um extremo do intervalo deve ser oposto ao sinal de  $H$  no outro extremo do intervalo.

Com o Scilab, faça um gráfico de  $H$  e use-o para cercar o zero de  $H$  entre dois valores. Coloque esses dois valores na primeira linha da matriz  $I$  (ou seja,  $I(1, 1) = \dots, I(1, 2) = \dots$ ), que será ampliada em cada etapa para conter, na primeira coluna, as aproximações à esquerda, e na segunda coluna as aproximações à direita. As linhas de  $I$  serão preenchidas iterativamente.

Você verá que  $H$  vai de positivo para negativo quando passa pelo ponto procurado, portanto o sinal de  $H$  nas aproximações à esquerda é sempre positivo, e nas aproximações à direita é sempre negativo. Agora você divide o intervalo em dois usando seu ponto médio. Se o sinal de  $H$  no ponto médio for positivo, então o zero de  $H$  estará na metade da direita; se for negativo, estará na metade da esquerda. Então define-se o novo intervalo de aproximação como sendo o da direita ou o da esquerda, respectivamente.

A rotina iterativa pode ser feita no Scilab, em uma única linha. Os comandos são separados por vírgula ou ponto-e-vírgula, dependendo se se quer ver ou não os resultados parciais. Tendo a matriz  $I$  sido inicializada como acima, faça um laço de 1 a  $n$  (use  $n$  explícito e não muito grande, e depois ajuste para obter convergência), usando “for j=1:n”. Dentro do laço, tome

$$b = 0.5 * (I(i, 1) + I(i, 2)) ,$$

que é o ponto médio do intervalo da etapa  $i$ . Calcule  $H(b)$  como descrito acima. Se  $H(b) > 0$ , defina  $I(i+1, 1) = b$  e  $I(i+1, 2) = I(i, 2)$ , isto é, o novo intervalo tem como extremo esquerdo o ponto médio e como extremo direito o mesmo extremo direito do intervalo anterior. Senão, defina  $I(i+1, 1) = I(i, 1)$  e  $I(i+1, 2) = b$ .

Um esquema da grafia do laço é: “for i=1:n, comando; comando; if (expressão de comparação) comando; comando; else comando; comando; end; comando; end;”. Veja que o primeiro “end” fecha o “if”, enquanto que o segundo fecha o “for”.

### O que é para fazer?

1. Faça o ajuste de  $g(x) = ax + bx^3$ , obtendo os parâmetros ótimos  $a$  e  $b$ . Calcule a diferença quadrática, mas divida por  $N$  e tire a raiz, pois esse valor dará o desvio-padrão da variável  $y_i - g(x_i)$  (cuja média é zero). Esse valor para mais e para menos do gráfico de  $g$  deve conter mais ou menos uns 68% dos pontos. Faça um gráfico superpondo os pontos experimentais com o ajuste.
2. Faça o mesmo com  $g(x) = ax + bx^2 + cx^3$ . Calcule também o desvio-padrão de  $y_i - g(x_i)$  neste caso (para a função obtida  $g$ ) e compare com o ajuste anterior. Houve melhora significativa? E os parâmetros, mudaram muito? (Quer dizer, o parâmetro de grau dois é próximo de zero e os de grau 1 e 3 são próximos dos parâmetros do ajuste anterior?). Faça o gráfico também. De qual gráfico você gosta mais?
3. Faça o ajuste de  $g(x) = a \log(bx + 1)$ . A aproximação melhorou? Faça o gráfico também.
4. Escreva as expressões dos três ajustes nas variáveis  $d$  e  $\ell$  originais. Plote os gráficos usando essas expressões, para conferir se está tudo certo.

TEM MUITO FALATÓRIO NESTE EP, MAS A REALIZAÇÃO É RAPIDÍSSIMA. DEMORA MAIS TEMPO LER E DEPOIS ORGANIZAR O MATERIAL PARA ME ENTREGAR DO QUE ESCREVER OS COMANDOS. ISTO MOSTRA A VANTAGEM DE UM SOFTWARE COMO ESSE, QUE DÁ FLEXIBILIDADE DE PROGRAMAR E AO MESMO TEMPO MANIPULA VETORES E MATRIZES DE FORMA NATURAL.