

УДК 539.122:518.5

РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЙ РАДИОАКТИВНОГО РАСПАДА

Д. Г. Модестов
(РФЯЦ-ВНИИТФ)

Дается описание алгоритма, позволяющего при минимальных вычислительных затратах построить устойчивую процедуру решения, в том числе в аналитическом виде, уравнений, описывающих изменение изотопного состава вещества во времени.

Введение

Существует достаточно большое число прикладных задач, для которых необходимо определять зависимость изотопного состава вещества от времени. Здесь следует заметить, что всюду в этой работе для краткости изотопами будут называться и изомеры [1], так как в данном случае характеристики поведения различных изотопных состояний существенно отличаются друг от друга.

Изменение изотопного состава описывается системой дифференциальных уравнений. Решение этой системы, с одной стороны, упрощается тем, что в большинстве случаев на достаточно большом интервале времени ее можно с хорошей точностью аппроксимировать системой линейных уравнений, матрица которой обладает рядом полезных свойств, что позволяет свести решение нелинейной задачи к последовательному решению небольшого набора линейных задач. С другой стороны, это решение усложняется большим количеством рассматриваемых изотопов (размерностью системы), достигающим порядка нескольких тысяч, а также сильным различием характерных времен (периодов полураспада), приводящим к существенному отличию поведения концентрации разных изотопов за время эволюции системы.

Таким образом, применение общих методов дает неустойчивое решение, к тому же требующее значительного количества вычислительных затрат. Более того, с их помощью невозможно получить аналитическое решение, которое удобно использовать для ряда задач. Эти факторы диктуют необходимость разработки специального алгоритма.

В данной работе представлено описание такого алгоритма, позволяющего достаточно эффективно находить решение линейной задачи радиоактивного распада. Фактически он сводится к рекуррентному вычислению ряда параметров, с помощью которых строится аналитическое решение. Кроме того, предлагаемый алгоритм удобен и для решения нелинейных задач, так как, вычислив один раз тензор распадов, можно использовать его для решения локальных линейных подзадач.

В настоящее время алгоритм реализован в одном из комплексов программ, созданном для моделирования прохождения частиц высоких энергий через вещество. Этот алгоритм используется в процедурах обработки результатов по накоплению ядерных остатков и позволяет оценивать зависимость от времени концентрации как их, так и создаваемых ими радиационных полей.

Дело в том, что при ядерных взаимодействиях высокоэнергетических частиц ($E > 1$ ГэВ) образуются остаточные ядра с массами и зарядами, распределенными в достаточно широких интервалах, что, в свою очередь, приводит к тому, что прохождение этих частиц через вещество, особенно содержащее элементы из конца таблицы Менделеева, вызывает наработку большого и заранее не известного количества изотопов. В частности, для решения задачи оценки радиационной нагрузки на CMS-детектор (ЦЕРН) использовалась большая часть данных из библиотеки [2], содержащей характеристики 2 707 изотопов. Попытки применить в данной задаче различные алгоритмы не дали удовлетворительных результатов вследствие невысокой точности и большого времени счета (была необходима оценка наработки некоторых изотопов и наведенно-

го радиационного фона для широкого диапазона времен и большого, порядка нескольких тысяч, числа областей). Предлагаемый в данной работе алгоритм позволил избежать этих недостатков. В частности, для процессора Pentium-II/400 МГц время, затрачиваемое на вычисление тензора распадов, составляет $\approx 0,17$ с, на решение задачи Коши — $\approx 0,02$ с.

Основные уравнения

В большинстве прикладных задач изменение изотопного состава происходит в основном за счет двух процессов: взаимодействия ядер вещества с потоками частиц и самопроизвольного радиоактивного распада. При этом всегда можно выбрать интервал времени, внутри которого влияние изменения изотопного состава на потоки частиц можно считать несущественным и считать последние зависящими только от внешних условий. Такое приближение приводит к тому, что можно определить некоторую *внешнюю* скорость наработки данного изотопа за счет первого процесса. Уравнение, описывающее изменение изотопного состава в этом приближении, может быть записано в следующем виде:

$$\frac{dn_i}{dt} = -\frac{1}{\tau_i}n_i + \sum_{j \neq i} \frac{P_{j \rightarrow i}}{\tau_j}n_j + v_i(t),$$

где n_i — число ядер (концентрация) i -го изотопа; τ_i — среднее время его жизни; $P_{j \rightarrow i}$ — суммарная вероятность каналов распада j -го изотопа, приводящих к образованию i -го; $v_i(t)$ — скорость наработки i -го изотопа за счет реакций с потоками частиц. Если обозначить

$$\Lambda_{ij} = \begin{cases} -\frac{1}{\tau_i}, & i = j; \\ \frac{P_{j \rightarrow i}}{\tau_i}, & i \neq j, \end{cases} \quad (1)$$

то эта система может быть записана в более удобной для анализа форме:

$$\frac{dn_i}{dt} = \sum_j \Lambda_{ij}n_j + v_i(t),$$

или, используя векторные обозначения,

$$\frac{d\vec{n}}{dt} = \hat{\Lambda}\vec{n} + \vec{v}(t), \quad (2)$$

где $\hat{\Lambda}$ — квадратная матрица, которая в дальнейшем будет называться *матрицей распадов*.

Решение уравнения (2) при условии $\vec{n}(t_0) = \vec{n}_0$ может быть выражено формулой

$$\vec{n}(t) = e^{\hat{\Lambda}(t-t_0)} \left[\vec{n}_0 + \int_{t_0}^t e^{-\hat{\Lambda}(t'-t_0)} \vec{v}(t') dt' \right]. \quad (3)$$

В частности, решение наиболее часто встречающейся на практике задачи с $\vec{n}_0 = 0$ и $\vec{v}(t) = \vec{v}_0 = \text{const}$ имеет вид

$$\vec{n}(t) = \hat{\Lambda}^{-1} \left[e^{\hat{\Lambda}(t-t_0)} - 1 \right] \vec{v}_0 \xrightarrow{t \rightarrow \infty} -\hat{\Lambda}^{-1} \vec{v}_0.$$

Практически решение основных задач изменения изотопного состава за счет радиоактивного распада сводится к подстановке в это выражение определенных значений параметров и (или) вычислению его предельных значений.

Как видно, для построения решений необходимо вычислять некоторые функции матрицы распадов. В общем случае, учитывая то, что размерность матрицы (количество различных изотопов) достигает порядка нескольких тысяч, это проблематично. Для построения эффективного алгоритма необходимо рассмотреть некоторые специальные свойства матрицы распадов.

Свойства матрицы распадов

Определим специальные свойства матрицы $\hat{\Lambda}$.

Первое свойство — самое очевидное. Это разреженность матрицы $\hat{\Lambda}$, которая следует из ее определения (см. (1)), так как число каналов радиоактивного распада для любого элемента сравнительно невелико.

Наиболее важное, второе свойство для построения алгоритма определения матрицы $\hat{\Lambda}$ является следствием закона сохранения энергии. Из этого закона следует, что в каждом акте распада энергия атома не возрастает. Таким образом, если существует процесс распада i -го изотопа, приводящий к образованию j -го, то не существует процесса распада j -го изотопа с образованием i -го. Используя это свойство на множестве изотопов, можно ввести отношение частичного порядка [3], определяемое следующим соотношением: *изотоп $i >$ изотоп $j \Rightarrow$ существует канал распада i -го изотопа, приводящий к образованию j -го*. Удобно построить индексацию изотопов в соответствии с отношением частичного порядка, т. е. *изотоп $i >$ изотоп $j \Rightarrow i > j$* . Матрица распадов, элементы которой расположены

в соответствии с вышеопределенной индексацией, имеет верхнетреугольный вид (т. е. $\Lambda_{ij} \equiv 0$, если $i > j$). При этом согласно (2) диагональные элементы обратно пропорциональны среднему времени жизни соответствующего изотопа: $\Lambda_{ii} = -1/\tau_i$. В частности, и это важно для дальнейших рассуждений, данное свойство приводит к тому, что собственные значения матрицы распадов совпадают с ее диагональными элементами:

$$\lambda_i = \Lambda_{ii} = -\frac{1}{\tau_i}. \quad (4)$$

Вследствие взаимнооднозначного соответствия типов изотопов и векторных индексов всюду в дальнейшем предложение *i сравнимо (несравнимо) с j* будет подразумевать, что изотоп типа i сравним (несравним) в смысле введенного отношения частичного порядка с изотопом типа j .

И наконец, последним, третьим свойством является то, что для любых сравнимых изотопов i и j выполняется условие $\tau_i \neq \tau_j$. Вообще говоря, это свойство не имеет никаких физических причин для обоснования. Однако сопоставление различных экспериментальных данных, в частности констант из библиотеки [2], подтверждает высказанное предположение.

Тензор распадов

Для построения алгоритма решения уравнений радиоактивного распада необходимо доказать следующее.

Утверждение. *Экспонента матрицы распадов может быть представлена в следующем виде¹:*

$$\left(e^{\hat{\Lambda}t}\right)_{ij} = \sum_k \mu_{ij}^k e^{\lambda_k t}, \quad (5)$$

где λ_k — собственные значения матрицы, а μ_{ij}^k удовлетворяют соотношениям

$$(i > k) \vee (k > j) \Rightarrow \mu_{ij}^k \equiv 0. \quad (6)$$

¹Как известно, если матрица имеет различные собственные значения, ее экспонента представима в виде линейной комбинации экспонент от собственных значений. Однако в данном случае матрица распадов имеет обычно большое число совпадающих собственных значений и поэтому доказательство существования экспоненциального представления является необходимым условием построения решения эволюционных уравнений.

Дополнительное условие: *в случае, если хотя бы два из изотопов i, j или k несравнимы (см. предыдущий раздел), то, так же, как и в (6), соответствующие им коэффициенты нулевые:*

$$i, k, j - \text{попарно несравнимы} \Rightarrow \mu_{ij}^k \equiv 0. \quad (7)$$

Для краткости набор компонент μ_{ij}^k в дальнейшем будет называться *тензором распадов*, хотя тензором он является только по двум нижним индексам.

Для доказательства удобнее взять не матрицу $\hat{\Lambda}$, а транспонированную $\hat{\Lambda}^T$, являющуюся нижнетреугольной, выражение для экспоненты которой через тензор распадов согласно (5) будет следующим:

$$\left(e^{\hat{\Lambda}^T t}\right)_{ij} = \left(e^{\hat{\Lambda} t}\right)_{ji} = \sum_k \mu_{ji}^k e^{\lambda_k t}. \quad (8)$$

В этом случае если вектор \vec{y} является произведением экспоненты матрицы на вектор \vec{x} ,

$$\vec{y} = e^{\hat{\Lambda}^T t} \vec{x},$$

то компоненты \vec{y} являются решениями системы дифференциальных уравнений

$$\frac{dy_i}{dt} = \sum_{j=1}^i \Lambda_{ji} y_j, \quad y_i(0) = x_i. \quad (9)$$

Как известно, решение (9) можно представить в виде линейной комбинации степенных и показательных функций переменной t (см., например, [4]), однако структура матрицы $\hat{\Lambda}$ позволяет получить его в виде рекуррентной последовательности решения уравнений для каждого i :

$$y_i(t) = \left(x_i + \sum_{j=1}^{i-1} \Lambda_{ji} \int_0^t d\tau y_j(\tau) e^{-\lambda_i \tau} \right) e^{\lambda_i t}.$$

Докажем, что это решение согласно соотношениям (5) и (6) можно представить в виде²

$$y_i(t) = \sum_{k=1}^i \sum_{p=1}^k \mu_{pi}^k e^{\lambda_k t} x_p. \quad (10)$$

²Необходимо помнить, что при суммировании отличны от нуля только те члены, индексы которых попарно сравнимы.

Для доказательства (10) удобно использовать метод математической индукции. Для $i = 1$ выражение (10) принимает вид

$$y_1(t) = e^{\lambda_1 t} x_1.$$

То есть $\mu_{11}^1 = 1$. Для произвольного i , используя предположение индукции, выражение (10) можно записать как

$$y_i(t) = \left[x_i + \sum_{j=1}^{i-1} \Lambda_{ji} \sum_{k=1}^j \sum_{p=1}^k \mu_{pj}^k x_p \int_0^t d\tau e^{(\lambda_k - \lambda_i)\tau} \right] e^{\lambda_i t}. \quad (11)$$

Интегрирование (11) дает

$$y_i(t) = \left[x_i + \sum_{j=1}^{i-1} \Lambda_{ji} \sum_{k=1}^j \sum_{p=1}^k \mu_{pj}^k x_p \frac{e^{(\lambda_k - \lambda_i)t} - 1}{\lambda_k - \lambda_i} \right] e^{\lambda_i t},$$

или

$$y_i(t) = e^{\lambda_i t} x_i - \sum_{j=1}^{i-1} \Lambda_{ji} \sum_{k=1}^j \sum_{p=1}^k \frac{\mu_{pj}^k}{\lambda_k - \lambda_i} e^{\lambda_i t} x_p + \sum_{j=1}^{i-1} \Lambda_{ji} \sum_{k=1}^j \sum_{p=1}^k \frac{\mu_{pj}^k}{\lambda_k - \lambda_i} e^{\lambda_k t} x_p. \quad (12)$$

Как видно, это выражение совпадает с условием индукции (10), что и доказывает исходные предположения (4) и (5), конечно, при условии равенства нулю произведений $\Lambda_{ji} \mu_{pj}^k$ для всех j и p в том случае, когда $\lambda_k = \lambda_i$. Это свойство справедливо при выполнении условия (7). Действительно, тогда для ненулевого значения вышеупомянутого произведения изотопы, соответствующие индексам p , k , j и i , должны образовывать неубывающую цепочку и соответственно любые два из них должны быть сравнимы (так как все они составляют линейно упорядоченное подмножество). В частности, сравнимы k и i . Однако согласно третьему свойству матрицы распадов при этом всегда $\lambda_k \neq \lambda_i$. Таким образом, осталось доказать выполнение условия (7).

Для его доказательства, используя (12), получим формальные рекуррентные соотношения для вычисления компонент тензора распадов (если при этом не возникнут противоречия, можно будет считать доказательство завершенным):

$$\mu_{ji}^k = \frac{1}{\lambda_k - \lambda_i} \sum_{p=k}^{i-1} \mu_{jp}^k \Lambda_{pi}; \quad (13)$$

$$\mu_{ji}^i = - \sum_{p=j}^{i-1} \mu_{jp}^i; \quad (14)$$

$$\mu_{ii}^i = 1, \quad (15)$$

где $j \leq k < i$.

Очевидно, если несравнимы j и k , то все μ_{jp}^k и, следовательно, вся сумма в выражении (13) равны нулю, а значит, и $\mu_{ji}^k = 0$. В том же случае, если несравнимы индексы k и i , то все члены суммы $\Lambda_{pi} \mu_{jp}^k = 0$ и соответственно вся сумма нулевая. Таким образом, соотношение (13) сохраняет свойство (7). Что же касается (14), то при несравнимых i и j все μ_{jp}^i в сумме равны нулю и, следовательно, свойство (7) сохраняется.

Таким образом, утверждение о существовании тензора распадов доказано.

Замечание 1. Так как правая и левая части выражения (5) являются аналитическими функциями переменной t , то очевидно, что для любого неотрицательного целого числа n справедливо следующее:

$$\left(\frac{d^n}{dt^n} e^{\hat{\Lambda}t} \Big|_{t=0} \right)_{ij} = (\hat{\Lambda}^n)_{ij} = \sum_k \lambda_k^n \mu_{ij}^k.$$

То есть утверждения, доказанные для экспоненты, справедливы для любого полинома, а следовательно, и для любой действительной функции, так как на конечном множестве (спектре $\hat{\Lambda}$) любая функция точно представима полиномами.

Замечание 2. Как легко заметить, выражения (14) и (15) вместе эквивалентны соотношению

$$\sum_{k=j}^i \mu_{ji}^k = \delta_{ji},$$

которое, впрочем, следует из (8), если в последнем положить $t = 0$. Это позволяет при вычислении тензора распадов не хранить компоненты μ_{ji}^i для $j = 1, \dots, i$, так как в соответствии с замечанием 1

$$f(\hat{\Lambda})_{ij} = \begin{cases} f(\lambda_j), & i = j; \\ \sum_{k=i}^{j-1} \mu_{ij}^k \left(f(\lambda_k) - f(\lambda_j) \right), & i < j. \end{cases}$$

Заключение

Таким образом, предлагаемый алгоритм решения задачи Коши (3) (или набора таких задач) состоит из двух шагов:

- 1) вычисления тензора распадов μ_{jk}^i ;
- 2) получения решения в виде линейной комбинации компонент тензора распадов с параметрами задачи и величинами вида $e^{\lambda_i t}$.

При этом при решении набора задач первый шаг делается только один раз.

В заключение можно привести выражения, используемые для вычисления величин на шаге 2 при решении задачи (3):

$$\begin{aligned} \left(e^{\widehat{\Lambda}(t-t_0)} \vec{n}_0 \right)_i &= e^{\lambda_i(t-t_0)} n_{0i} + \\ &+ \sum_{j>i} \sum_{k=i}^{j-1} \mu_{ij}^k \left[e^{\lambda_k(t-t_0)} - e^{\lambda_j(t-t_0)} \right] n_{0j}; \\ \left(\int_{t_0}^t e^{\widehat{\Lambda}(t-t')} \vec{v}(t') dt' \right)_i &= \int_{t_0}^t dt' \left\{ e^{\lambda_i(t-t_0)} v_i(t') + \right. \end{aligned}$$

$$\left. + \sum_{j>i} \sum_{k=i}^{j-1} \mu_{ij}^k \left[e^{\lambda_k(t-t')} - e^{\lambda_j(t-t')} \right] v_j(t') \right\}.$$

Список литературы

1. *Мухин К. Н.* Введение в ядерную физику. М.: Атомиздат, 1965.
2. *Ekstrom P., Kinsey R. R., Browne E.* PC Application for Nuclear Science. PCNuDat and PapyrusTM NSR. Oak Ridge National Laboratory, 1996.
3. *Скорняков Л. А.* Элементы общей алгебры. М.: Наука, 1983.
4. *Петровский И. Г.* Лекции по теории обыкновенных дифференциальных уравнений. М.: Наука, 1970.

Статья поступила в редакцию 17.04.06.