



FFI Forsvarets
forskningsinstitutt

22/01786

FFI-RAPPORT

Beregning av aktivitet til et nettverk av reaksjoner

Andreas Schiller

Beregning av aktivitet til et nettverk av reaksjoner

Andreas Schiller

Emneord

Radioaktivitet
Differensialligninger
Matriser
Egenverdiproblemer

FFI-rapport

22/01786

Prosjektnummer

1602

Engelsk tittel

Calculation of activity of a reaction network

Elektronisk ISBN

978-82-464-3420-9

Godkjennerne

Halvor Bjordal, *forskningsleder*

Halvor Ajer, *forskningssjef*

Dokumentet er elektronisk godkjent og har derfor ikke håndskreven signatur.

Opphavsrett

© Forsvarets forskningsinstitutt (FFI). Publikasjonen kan siteres fritt med kildehenvisning.

Sammendrag

Kvantemekaniske systemer beskrives gjerne ved et sett av egentilstander (ofte merket ved deres energier eller frekvenser) og overganger eller henfall mellom disse (karakterisert ved deres overgangsrater). Eksempler på slike systemer kan være atomer, molekyler eller atomkjerner. Overgangsratene kan stort sett beregnes i tidsavhengig perturbasjonsteori ved Fermis gyldne regel. Men selv om man kjenner alle overgangsrater mellom alle kvantetilstander (ved måling eller ved beregning), så krever en nøyaktig modellering av tidsutviklingen til systemet at man tar hensyn til alle forgreininger og sammenføringer i nettverket av mulige henfall fra utgangstilstand til slutttilstand.

Vi modellerer dette nettverket av overganger som et system av sammenkoblede autonome lineære førsteordens differensiallikninger. Dets løsning er formulert i lukket form ved hjelp av matrisefunksjoner. Vi formulerer eksakte og tilnærmete løsninger til slike matrisefunksjoner og implementerer noen numeriske algoritmer der den mest effektive baserer seg på Padé approksimasjonen. Matrisefunksjoner kan anvendes overalt der man er konfrontert med lignende differensiallikningssystemer, som for eksempel ved vibrasjonsanalyse.

Eksempelene vi bruker i denne rapporten stammer fra kjernefysikken der overgangene mellom kvantetilstandene tilsvarer forskjellige typer radioaktivitet og der vi fokuserer nettopp på beregningen av denne aktiviteten. I denne konteksten diskuterer vi også betingelsen for å kunne generalisere vår matematiske modell fra et nettverk med henfall (unære reaksjoner) til et nettverk med binære reaksjoner.

Lignende eksempler kunne også formuleres for overganger mellom elektroniske tilstander i atomer eller molekyler der radiative overganger tilsvarer utsendelse av lys eller generelt elektromagnetisk stråling med forskjellige bølgelengder. Slike eksempler kunne inkludere atomer og molekyler som er involvert i produksjon av laserstråling, men også konkurrerende prosesser.

Summary

Quantum-mechanical systems may be described in terms of eigenstates (usually labeled by their energies or frequencies) and transitions or decays between them (characterized by their transition rates). Examples of such systems may be atoms, molecules or atomic nuclei. Transition rates may in general be calculated within time-dependent perturbation theory by Fermi's golden rule. However, even if one obtains complete knowledge of all transition rates between all quantum states (by measurement or calculation), a precise modeling of the time evolution of the system requires that one takes into account all branchings and all funnelings within the network of possible decays from the initial to the final state.

We model this network of transitions as a system of coupled, autonomous and linear differential equations of first order. The solution of which is formulated in closed form by means of functions of matrices. We formulate exact and approximate solutions of such functions of matrices and implement some numerical algorithms, the most effective of which is based on the Padé approximation. Functions of matrices may be employed in all cases where one is confronted by similar systems of differential equations, such as, for instance, vibration analysis.

The examples we use in this report are all derived from nuclear physics, where transitions between quantum states correspond to different types of radioactivity and where we focus precisely on the calculation of this activity. In this context we also discuss the conditions under which our mathematical model may be generalized from a network of decays (unary reactions) to a network of binary reactions.

Similar examples could also be formulated for transitions between electronic states of atoms or molecules, where radiative transitions correspond to emission of light or generally electromagnetic radiation with different wavelengths. Such examples could include atoms and molecules which are involved in the generation of laser beams, but also in competing processes.

Innhold

Sammendrag	3
Summary	4
1 Innledning	7
2 Innledende eksempel	8
2.1 Anmerkninger angående binære reaksjoner	10
3 Formell løsning til systemet av likninger	11
3.1 Løsning ved konstant produksjonsrate	12
3.2 Funksjoner av matriser	12
3.3 Cayley Hamilton teoremet	12
3.4 Evaluering av utviklingskoeffisienter	13
3.4.1 Spesialtilfelle: doble eller mangedoble egenverdier	14
3.4.2 Spesialtilfelle: egenverdier lik null	15
3.5 Aktivitet	16
4 Analytiske eksempler med et trenivåsystem	17
4.1 Eksempel med $\lambda_{CA} = 0$, $N_0 = 0$ og $P_B = 0$	17
4.2 Eksempel med $\lambda_{CA} = 0$ og $N_0 = 0$	19
4.3 Eksempel med $\lambda_{CA} = 0$, $N_B = 0$ og $P_A = 0$	20
4.4 Eksempel med $N_B = 0$ og $P_0 = 0$	22
4.5 En morsom kuriositet	23
5 Numeriske metoder	24
5.1 Invertere en tidsuavhengig Vandermondematrix	24
5.2 Numerisk algoritme	25
5.3 Invertere en tidsuavhengig transformasjonsmatrix	27
5.4 Numerisk algoritme	28
5.5 Padé approksimasjon	30
5.6 Alder til en ^{226}Ra kilde	32
6 Konklusjon	35



1 Innledning

Beregning av aktivitet blir ofte fremstilt som en enkel sak. Hvis man går ut fra en reaksjons- eller overgangsrate λ og en stoffmengde N_0 , så har etter en tid t en del av den opprinnelige stoffmengden reagert, mens den gjenværende mengden kan beregnes ved

$$N(t) = N_0 e^{-\lambda t}. \quad (1.1)$$

Aktiviteten A beregnes ut fra den gjenværende stoffmengden ved

$$A(t) = \lambda N(t). \quad (1.2)$$

Disse to lover, det eksponentielle henfallet av stoffmengden og aktiviteten, er det de aller fleste forbinder med radioaktivitet. Dessverre, med en gang situasjonen blir litt mer komplisert, så kan ikke lenger stoffmengden og aktiviteten formuleres på en så enkel måte.

Man kan for eksempel tenke seg et stoff som henfaller to eller flere ganger. Da bygges stoffmengden og aktiviteten til mellomproduktene først opp, før de henfaller igjen. Typisk for dette er når man isolerer et element fra henfallsrekken til de naturlige uran- eller thoriumisotopene.

Et annet eksempel finner man når man ser på fisjonsprodukter i en reaktor. Her kan man tenke seg en kontinuerlig dannelse av et radioaktivt stoff, enten direkte ved fisjon eller indirekte ved henfall av et annet fisjonsprodukt. Videre, så kan stoffet man er interessert i både henfalle ved spontan radioaktivitet, eller reagere med et nøytron. Typisk for dette er ^{135}Xe , som kan dannes direkte ved fisjon, eller ved β^- -henfall¹ fra ^{135}I . Edelgassen kan så enten β^- -henfalle til ^{135}Cs eller fange inn et nøytron for å danne ^{136}Xe .²

Et annet relevant problem er syntesen av tunge elementer i eksplosive stellare omgivelser, der mere enn tusen reaksjonsrater og radioaktive henfall må tas hensyn til for å kunne estimere element- og isotopfordelingen i, for eksempel, solsystemet.

Relevant for FFI er situasjoner der man for eksempel ønsker å modellere utslipp fra havareerte maritime reaktorer eller nedfall fra kjernefysiske eksplosjoner. Med tanke på verifikasjon, så kan også en situasjon være interessant der man ønsker å modellere driftshistorikken til en kjernereaktor ut fra målinger til aktiviteten eller sammensetningen til avfallet.

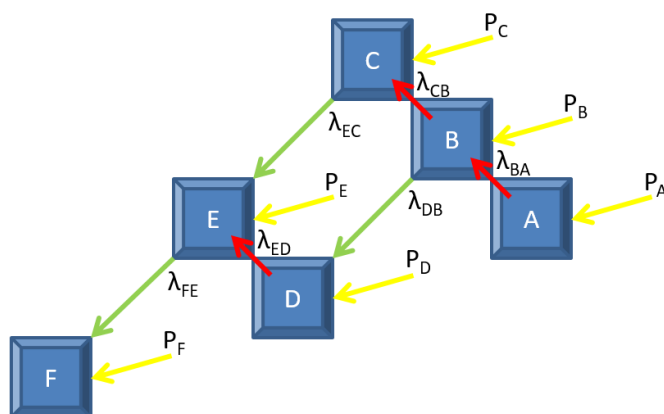
Hensikten med rapporten er å fremstille en metode for å løse systemet av sammenkoblede autonome lineære førsteordens differensiallikninger som matematisk modellerer reaksjonsnettverket av kjernefysiske prosesser. Spesielt ønsker vi å formulere en løsning som ikke krever numerisk integrasjon av differensiallikninger. Akkurat som i det enkle tilfellet ovenfor, så kan man formulere en analytisk løsning for en hel klasse modeller og som lar seg evaluere numerisk ved lineær algebra. Sentralt for dette er Cayley-Hamilton teoremet som ble formulert i 1853 for 3×3 matriser. I 1878 kunne Frobenius vise at teoremet også holder for $n \times n$ matriser.

¹I et β^- -henfall omdannes et av nøytronene i kjernen til et proton og det sendes ut både et elektron og et antinøytrino.

²Edelgassen ^{135}Xe er kjent som nøytrongift, fordi den reagerer veldig sterkt med nøytroner. Dynamikken rundt dannelse og henfall av ^{135}Xe er dermed høyst relevant med tanke på hvor fort en nedstengt reaktor kan starte opp igjen.

2 Innledende eksempel

Et lite, men ganske typisk nettverk av reaksjoner man kunne tenke seg er vist i figur 2.1. De forskjellige isotopene er representert ved blå bokser (mot høyre: økende nøytrontall, oppover: økende protontall), mens pilene representerer forskjellige slags radioaktive henfall (grønne piler: α -henfall³, røde piler: β^- -henfall) eller direkte produksjon (gule piler) av disse isotoper. Her er det viktig å huske at antall henfall per tid er gitt ved produktet av stoffmengden N med reaksjons- eller overgangsraten λ , mens antall dannelser per tid er simpelthen gitt ved en (tidsavhengig) produksjonsrate $P(t)$ (og som i en reaktor er typisk proporsjonal til dens effekt).



Figur 2.1 Enkelt nettverk av henfall (grønne piler: α -henfall, røde piler: β^- -henfall) og produksjon (gule piler) av forskjellige isotoper.

Spesielt hvis vi ser på stoff (isotop) A, så er dens forandringsrate \dot{N}_A , det vil si antall dannelser minus antall henfall per tid lik

$$\dot{N}_A = -\lambda_{BA}N_A + P_A, \quad (2.1)$$

der N_A er antall isotoper av type A, λ_{BA} er overgangsraten for henfall fra isotop A til isotop B og P_A er produksjonsraten av isotop A. Her har man kun et mulig henfall og én dannelsesmekanisme.

Når vi ser for eksempel på forandring i antall isotoper av type D, så må vi i tillegg til den direkte produksjonsraten også ta hensyn til dannelsen ved α henfall fra isotop B. Vi får dermed

$$\dot{N}_D = -\lambda_{ED}N_D + \lambda_{DB}N_B + P_D. \quad (2.2)$$

Som et videre eksempel kan isotop B dannes også ved både henfall fra et annet isotop og ved direkte produksjon. I tillegg, kan isotopen henfalle på to forskjellige måter. Til sammen får vi

$$\dot{N}_B = -\lambda_{CB}N_B - \lambda_{DB}N_B + \lambda_{BA}N_A + P_B. \quad (2.3)$$

I et siste eksempel kan isotop E dannes på tre forskjellige måter, men kan henfalle på kun én måte. Her får vi

$$\dot{N}_E = -\lambda_{FE}N_E + \lambda_{ED}N_D + \lambda_{EC}N_C + P_E. \quad (2.4)$$

³ α -henfall tilsvarer utsendelse av en ^4He kjerne, som består av to protoner og to nøytroner.

2.1 Anmerkninger angående binære reaksjoner

I vårt eksempel har vi så langt kun brukt henfall (eller unære reaksjoner), men ikke "ekte" (eller binære) kjernereaksjoner. Også disse kan modelleres ved en reaksjonsrate λ , men man oppdager ganske fort to problemer.

Det første problemet med binære kjernereaksjoner er at reaksjonsraten oftest avhenger ganske mye av kinetisk energi i massesentersystemet. Løsningen blir nokså enkel hvis energifordelingen er kjent (for eksempel en Maxwellfordeling) og er konstant over tid (for eksempel ved at temperaturen er konstant). I så fall kan man beregne en reaksjonsrate som er midlet over energifordelingen. Dette er en situasjon man ofte har når man modellerer elementproduksjon i stellare omgivelser.

Det andre problemet med binære kjernereaksjoner er at antallet reaksjoner avhenger av produktet til begge reaktanter. Dette fører til ikke-lineære differensiallikninger. Dette problemet er vanskeligere å løse enn det første. Oftest avhenger måten man løser dette av den helt konkrete situasjonen man ønsker å modellere. Typisk er igjen elementproduksjon i stellare omgivelser. For eksempel i det man kaller r prosess antar man at man har et stort antall frie nøytroner som ikke avtar mens prosessen pågår. I så fall kan man sette nøytronkonsentrasjonen konstant og systemet av differensiallikninger blir igjen lineært. Den enkleste måten å modellere denne prosessen er derfor å anta en konstant temperatur og en konstant nøytronkonsentrasjon som forenkler problemstillingen slik at den kan løses ved metodene som vi skal diskutere her i denne rapporten. En slik forenklet modell kalles ofte en kanonisk r prosess.

Noe lignende kan man også anta for reaktordrift i likevekt. Her har man både en (lokal) konstant nøytronkonsentrasjon og en (lokal) kjent (og tidsuavhengig) energifordeling til nøytronene. Tilnærmelsen faller bort i det en ulykke inntreffer som for eksempel en LOCA (loss-of-coolant) ulykke. I et sânt tilfelle så kan temperaturen til brenselet øke betraktelig, og hvis kjølingsmedium i tillegg har funksjon som moderator, så kan energifordelingen til nøytronene skyves mot høyere verdier. Begge effekter kan signifikant forandre reaksjonsratene.

3 Formell løsning til systemet av likninger

Vi har i kapittel 2 formulert systemet av autonome, lineære førsteordens differensiallikninger i form av vektorer og matriser

$$\frac{d}{dt}\vec{N} = \lambda \cdot \vec{N} + \vec{P}(t). \quad (3.1)$$

Nå fortsetter vi med å løse dette systemet. Som vanlig, løser vi først det homogene systemet

$$\frac{d}{dt}\vec{N} = \lambda \cdot \vec{N} \quad (3.2)$$

ved integrasjon, som gir⁵

$$\vec{N}(t) = e^{\lambda(t-t_0)} \cdot \vec{N}_0, \quad (3.3)$$

der \vec{N}_0 er en konstant som beskriver stoffmengden til de involverte isotopene ved tidspunktet t_0 .

Det inhomogene systemet kan for eksempel løses ved en teknikk som kalles variasjon av konstanten. For dette formulerer vi

$$\vec{N}(t) = e^{\lambda(t-t_0)} \cdot \vec{N}_0(t), \quad (3.4)$$

der vi har byttet ut konstanten \vec{N}_0 med en tidavhengig funksjon $\vec{N}_0(t)$. Når uttrykket deriveres får vi⁶

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\vec{N}(t) &= \lambda \cdot e^{\lambda(t-t_0)} \cdot \vec{N}_0(t) + e^{\lambda(t-t_0)} \cdot \frac{d}{dt}\vec{N}_0(t) \\ &= \lambda \cdot \vec{N}(t) + e^{\lambda(t-t_0)} \cdot \frac{d}{dt}\vec{N}_0(t). \end{aligned} \quad (3.5)$$

Når dette settes inn i differensiallikning (3.1), får vi

$$\vec{P}(t) = e^{\lambda(t-t_0)} \cdot \frac{d}{dt}\vec{N}_0(t). \quad (3.6)$$

Ved å gange med $e^{-\lambda(t-t_0)}$ på begge sider får man dermed⁷

$$e^{-\lambda(t-t_0)} \cdot \vec{P}(t) = \frac{d}{dt}\vec{N}_0(t), \quad (3.7)$$

som vi kan integrere til

$$\vec{N}_0(t) = \int_{t_0}^t e^{-\lambda(\tau-t_0)} \cdot \vec{P}(\tau) d\tau + \vec{N}_0. \quad (3.8)$$

Dermed har vi også løst det inhomogene problemet og ved å sette det i likning (3.4) får vi tilsammen

$$\begin{aligned} \vec{N}(t) &= e^{\lambda(t-t_0)} \cdot \left[\int_{t_0}^t e^{-\lambda(\tau-t_0)} \cdot \vec{P}(\tau) d\tau + \vec{N}_0 \right] \\ &= \int_{t_0}^t e^{-\lambda(\tau-t)} \cdot \vec{P}(\tau) d\tau + e^{\lambda(t-t_0)} \cdot \vec{N}_0. \end{aligned} \quad (3.9)$$

⁵Vi kommer til å diskutere eksponentialfunksjonen til en matrise i kapittel 3.2.

⁶En matrise \mathbf{A} kommuterer med sin eksponentialfunksjon $e^{\mathbf{A}}$.

⁷Matrisen $e^{-\mathbf{A}}$ er den inverse matrisen til $e^{\mathbf{A}}$.

3.1 Løsning ved konstant produksjonsrate

Integrasjonen i den generelle løsningen (3.9) kan utføres når man spesifiserer den eksterne produksjonsraten. Et enkelt tilfelle er en konstant rate $\vec{P}(t) = \vec{P}_0$. I så fall kan vektoren \vec{P}_0 tas ut av integralet som dermed kan evalueres til⁸

$$\begin{aligned}\vec{N}(t) &= -\frac{1}{\lambda} \cdot e^{-\lambda(\tau-t)} \Big|_{t_0}^t \cdot \vec{P}_0 + e^{\lambda(t-t_0)} \cdot \vec{N}_0 \\ &= \lambda^{-1} \left[e^{\lambda(t-t_0)} - \mathbb{I} \right] \cdot \vec{P}_0 + e^{\lambda(t-t_0)} \cdot \vec{N}_0,\end{aligned}\tag{3.10}$$

der $\frac{1}{\lambda}$ er kun en annen skrivemåte for den inverse matrisen⁹ λ^{-1} .

3.2 Funksjoner av matriser

Det er nå på tide å forklare hva man egentlig mener med en funksjon av en matrise og spesielt med en eksponentialfunksjon av en matrise. Helt konkret er en funksjon av en matrise definert ved den tilsvarende potensrekken. For eksponentialfunksjonen har man for eksempel potensrekken

$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!},\tag{3.11}$$

og vi definerer

$$e^{\lambda(t-t_0)} = \mathbb{I} + \lambda(t-t_0) + \frac{1}{2}\lambda^2(t-t_0)^2 + \dots\tag{3.12}$$

Videre kan vi definere en funksjon

$$f_P(\lambda(t-t_0)) = \lambda^{-1}(t-t_0)^{-1} \cdot \left[e^{\lambda(t-t_0)} - \mathbb{I} \right],\tag{3.13}$$

som kan brukes for å forenkle løsningen (3.10) for en konstant produksjonsrate til

$$\vec{N}(t) = (t-t_0)f_P(\lambda(t-t_0)) \cdot \vec{P}_0 + e^{\lambda(t-t_0)} \cdot \vec{N}_0.\tag{3.14}$$

Også for denne funksjonen kan vi finne en potensrekke, som er

$$f_P(\lambda(t-t_0)) = \mathbb{I} + \frac{1}{2}\lambda(t-t_0) + \frac{1}{6}\lambda^2(t-t_0)^2 + \dots\tag{3.15}$$

3.3 Cayley Hamilton teoremet

Selv om funksjoner av matriser er definert ved uendelige potensrekker, så betyr det ikke at den praktiske beregningen til et slikt funksjonsuttrykk må skje ved en uendelig sum. Spesielt viktig i

⁸Eksponentialfunksjonen til nullmatrisen \mathbb{O} gir den diagonale enhetsmatrisen \mathbb{I} , det vil si $e^{\mathbb{O}} = \mathbb{I}$.

⁹Også den inverse matrisen \mathbf{A}^{-1} kommuterer med eksponentialfunksjonen til matrisen $e^{\mathbf{A}}$.

denne sammenhengen er Cayley-Hamilton teoremet som sier at en kvadratisk $n \times n$ matrise løser sitt eget karakteristiske polynom. Det betyr at når man beregner det karakteristiske polynomet til en matrise \mathbf{A} , altså når man ut fra definisjonen

$$\det(\mathbf{A} - \mu \mathbb{I}) = 0 \quad (3.16)$$

regner seg fram til et polynom n -ten grades¹⁰

$$b_n \mu^n + b_{n-1} \mu^{n-1} + \dots + b_1 \mu + b_0 = 0, \quad (3.17)$$

der løsningene er settet av egenverdiene $\{\mu_m\}$, så kan man med det samme settet av koeffisienter $\{b_m\}$ formulere matriseidentiteten

$$b_n \mathbf{A}^n + b_{n-1} \mathbf{A}^{n-1} + \dots + b_1 \mathbf{A} + b_0 \mathbb{I} = \mathbf{0}. \quad (3.18)$$

Det betyr videre at den n -te potensen til en matrise kan uttrykkes ved en sum av alle de lavere potensene til den samme matrisen, der man har¹⁰

$$\mathbf{A}^n = -\frac{b_{n-1}}{b_n} \mathbf{A}^{n-1} - \frac{b_{n-2}}{b_n} \mathbf{A}^{n-2} - \dots - \frac{b_1}{b_n} \mathbf{A} - \frac{b_0}{b_n} \mathbb{I}. \quad (3.19)$$

Når man ønsker å beregne den nest høyere potensen, altså \mathbf{A}^{n+1} , så kan man gange uttrykket for \mathbf{A}^n med \mathbf{A} og erstatte det ene leddet i summen som nå inneholder \mathbf{A}^n med den kjente summen av lavere potenser. Så kan man lett se at også den nest høyere potensen (og egentlig alle høyere potenser) kan uttrykkes ved en endelig sum opptil $(n-1)$ -te orden i \mathbf{A} .

Som konsekvens betyr det at en uendelig potensrekke (med koeffisienter $\{b_m\}$) av en kvadratisk $n \times n$ matrise kan også formuleres som en endelig sum opptil $(n-1)$ -te orden av den samme matrisen, men med andre koeffisienter $\{\beta_m\}$. Spesielt gjelder for de to funksjoner av matriser som diskuteres i kapittel 3.2

$$e^{\lambda(t-t_0)} = \beta_0 \mathbb{I} + \beta_1 \lambda(t-t_0) + \beta_2 \lambda^2(t-t_0)^2 + \dots + \beta_{n-1} \lambda^{n-1}(t-t_0)^{n-1}, \quad (3.20)$$

$$f_P(\lambda(t-t_0)) = \alpha_0 \mathbb{I} + \alpha_1 \lambda(t-t_0) + \alpha_2 \lambda^2(t-t_0)^2 + \dots + \alpha_{n-1} \lambda^{n-1}(t-t_0)^{n-1}. \quad (3.21)$$

Slike endelige summer er mye enklere å evaluere enn uendelige potensrekker. Men vi må fortsatt finne en metode for beregningen av koeffisientene $\{\alpha_m\}$ og $\{\beta_m\}$.

3.4 Evaluering av utviklingskoeffisienter

Den enkleste måten å beregne koeffisientene til de endelige summene er å gange matriseidentitetene (3.20, 3.21) med settet $\{\vec{v}_m\}$ av egenvektorene til matrisen $\lambda(t-t_0)$. Vi antar i første omgang at den kvadratiske $n \times n$ matrisen $\lambda(t-t_0)$ har n forskjellige egenverdier μ_k med de tilsvarende (normerte) egenvektorene \vec{v}_k . Det vil si vi har

$$\lambda(t-t_0) \cdot \vec{v}_k = \mu_k \vec{v}_k. \quad (3.22)$$

¹⁰Koeffisienten $b_n = (-1)^n \neq 0$.

Når vi ganger matriseidentitetene (3.20, 3.21) med egenvektorene \vec{v}_k og \vec{v}_k^T fra henholdsvis høyre og venstre side, finner vi to sett med henholdsvis n likninger

$$\exp(\mu_k) = \beta_0 + \beta_1\mu_k + \beta_2\mu_k^2 + \dots + \beta_{n-1}\mu_k^{n-1}, \quad (3.23)$$

$$f_P(\mu_k) = \alpha_0 + \alpha_1\mu_k + \alpha_2\mu_k^2 + \dots + \alpha_{n-1}\mu_k^{n-1}. \quad (3.24)$$

Begge sett med likninger kan skrives ved hjelp av matriser som

$$\begin{pmatrix} \exp(\mu_1) \\ \exp(\mu_2) \\ \vdots \\ \exp(\mu_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \mu_1 & \cdots & \mu_1^{n-1} \\ 1 & \mu_2 & \cdots & \mu_2^{n-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \mu_n & \cdots & \mu_n^{n-1} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_{n-1} \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

og

$$\begin{pmatrix} f_P(\mu_1) \\ f_P(\mu_2) \\ \vdots \\ f_P(\mu_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \mu_1 & \cdots & \mu_1^{n-1} \\ 1 & \mu_2 & \cdots & \mu_2^{n-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \mu_n & \cdots & \mu_n^{n-1} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_{n-1} \end{pmatrix}. \quad (3.26)$$

Den spesielle typen matrise som opptrer her er kjent som Vandermondematrix. Man kjenner mange egenskaper til en slik matrise, blant annet kjenner man at dens determinant (som også kalles Vandermondedeterminant) er gitt ved

$$\left\| \begin{pmatrix} 1 & \mu_1 & \cdots & \mu_1^{n-1} \\ 1 & \mu_2 & \cdots & \mu_2^{n-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \mu_n & \cdots & \mu_n^{n-1} \end{pmatrix} \right\| = \prod_{j>i} (\mu_j - \mu_i). \quad (3.27)$$

Under vår forutsetning, som var at alle egenverdier er forskjellige, kan man lett se at Vandermondedeterminanten blir ulik null. De to settene med koeffisienter $\{\beta_m\}$ og $\{\alpha_m\}$ kan derfor alltid beregnes ved den inverse Vandermondematrixen, som eksisterer hvis alle egenverdier er forskjellige.

Hele problemet løses altså ved først å finne hele settet $\{\mu_m\}$ av egenverdier til matrisen $\lambda(t - t_0)$ for så å sette opp Vandermondematrixen basert på potenser av disse egenverdiene. Denne matrisen har en determinant ulik null (under forutsetning av at alle egenverdier er forskjellige) som på grunn av dette lar seg invertere. Dermed kan man beregne utviklingskoeffisientene $\{\alpha_m\}$ og $\{\beta_m\}$ til henholdsvis matrisefunksjonene $f_P(\lambda(t - t_0))$ og $e^{\lambda(t-t_0)}$. Kjenner man først disse matrisefunksjoner, kan løsningen beregnes ved for eksempel likning (3.14) i tilfelle av en konstant produksjonsrate. Alle disse trinnene lar seg implementere i et dataprogram.

3.4.1 Spesialtilfelle: doble eller mangedoble egenverdier

Frem til nå har vi forutsatt at alle egenverdier er forskjellige. Men det trenger de ikke å være generelt sett. Vi skal derfor se hva som skjer når to fra før forskjellige egenverdier rykker nærmere og nærmere sammen helt til de blir like. Prinsipielt, når vi ser på likningene (3.23, 3.24), krever vi at

en gitt funksjon (her e^μ og $f_P(\mu)$) skal ha n felles punkter med en $(n - 1)$ -te grads polynom (her henholdvis $P(\mu)$ og $Q(\mu)$). Disse polynomene er gitt ved

$$P(\mu) = \beta_0 + \beta_1\mu + \beta_2\mu^2 + \dots + \beta_{n-1}\mu^{n-1}, \quad (3.28)$$

$$Q(\mu) = \alpha_0 + \alpha_1\mu + \alpha_2\mu^2 + \dots + \alpha_{n-1}\mu^{n-1}. \quad (3.29)$$

Når to av disse felles punkter rykker nærmere og nærmere sammen, så betyr det geometrisk, at grafene til både funksjonen og polynomet blir likere og likere i omgivelsen av disse to punktene. Det som er to skjæringspunkter blir da til et berøringspunkt der ikke kun funksjonsverdiene til funksjonen og polynomet er like, men også deres første deriverte. Generelt kan man si, at hvis man har en m -dobbel egenverdi μ_i , så burde funksjonen og polynomet være like ved dette punktet opptil deres $(m - 1)$ -te deriverte. Matematisk formulerer man disse nye betingelsene ved

$$\left. \frac{d^k}{d\mu^k} e^\mu \right|_{\mu_i} = e^{\mu_i} = \left. \frac{d^k}{d\mu^k} P(\mu) \right|_{\mu_i}, \quad (3.30)$$

$$\left. \frac{d^k}{d\mu^k} f_P(\mu) \right|_{\mu_i} = \left. \frac{d^k}{d\mu^k} Q(\mu) \right|_{\mu_i}, \quad (3.31)$$

der $k = 1 \dots m - 1$ og der vi allerede har evaluert den deriverte til eksponentialfunksjonen. Ved hjelp av disse nye likningene har man igjen nok betingelser for å kunne bestemme settene med koeffisientene $\{\beta_m\}$ og $\{\alpha_m\}$.

3.4.2 Spesialtilfelle: egenverdier lik null

Funksjonen f_P er definert i kapittel 3.2 ved sin potensrekke

$$f_P(\mu) = 1 + \frac{1}{2}\mu + \frac{1}{6}\mu^2 + \dots, \quad (3.32)$$

men er også gitt i lukket form som

$$f_P(\mu) = \frac{e^\mu - 1}{\mu}. \quad (3.33)$$

Man ser at selv om potensrekken er veldefinert for $\mu = 0$, så er det samme ikke sant for det nedre uttrykket, som er det man vanligvis kommer til å bruke i beregninger. Problemer kan derfor oppstå hvis funksjonen (eller dens deriverte) må evalueres ved $\mu = 0$, altså hvis man har en (enkel, dobbel eller mangedobbel) egenverdi lik null. Her må man enten gå tilbake til potensrekken (som er lett å evaluere), eller man tolker likning (3.33) i limit, det vil si som

$$f_P(\mu = 0) = \lim_{\mu \rightarrow 0} \frac{e^\mu - 1}{\mu} = 1, \quad (3.34)$$

og tilsvarende for de deriverte til funksjonen. For å evaluere slike uttrykk kan man enten bruke regelen til de l'Hospital eller evaluere den deriverte potensrekken direkte.

3.5 Aktivitet

Når man har funnet mengden til alle isotoper $\vec{N}(t)$, kan man fortsette med å beregne de forskjellige typer aktivitet. Her må man unngå en ganske vanlig feil, som er å blande sammen aktivitet A med forandring i stoffmengde \dot{N} . Forandring i stoffmengde inkluderer nemlig ikke kun henfall (det er det som er aktivitet) men også dannelse av stoffet (se eksempelet i kapittel 2). Hvis et stoff er produsert med samme rate som det henfaller, så er forandring i stoffmengde lik null (det er i likevekt), men aktiviteten kan være ganske betraktelig. Derfor, som allerede nevnt i kapittel 1, likning (1.2), så er aktivitet alltid gitt ved stoffmengde N ganget med overgangsrate λ . Hvis man er interessert i en spesifikk aktivitet eller type henfall j til et spesielt isotop i , så er den tilsvarende aktiviteten gitt ved

$$A_{ji}(t) = \lambda_{ji}N_i(t). \quad (3.35)$$

Hvis man derimot er interessert i all aktivitet til et isotop i , uansett type aktivitet, så ønsker man å beregne

$$A_i(t) = \lambda_i N_i(t), \quad (3.36)$$

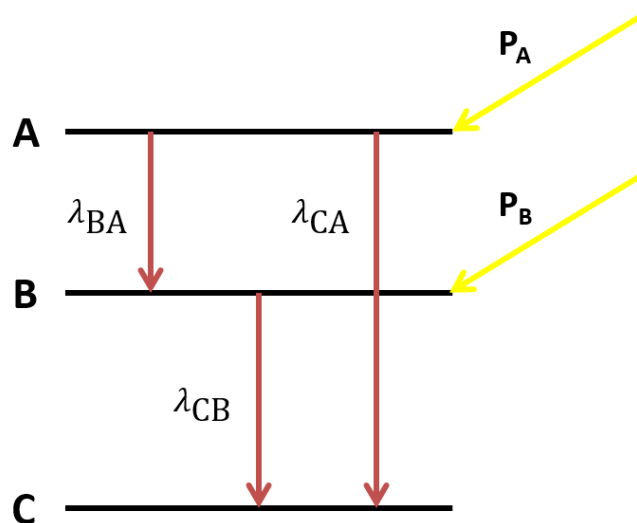
der den totale overgangsraten λ_i beregnes ved å summere alle partielle overgangsrater λ_{ji} , som beskrevet i kapittel 2. Hvis man er interessert i summen av all aktivitet, så ønsker man å beregne

$$A(t) = \sum_i \lambda_i N_i(t). \quad (3.37)$$

Alternativt kunne man oppsummere kun α , β eller γ aktivitet eller tilsvarende aktivitet over en gitt energiterskel. Hva som er relevant kommer rett og slett an på hva slags måleutstyr man har til rådighet, om utstyret skiller mellom forskjellig type radioaktivitet eller om utstyret gir tilstrekkelig energioppløsning. Ellers, hvis man ikke er interessert i ren aktivitet (målt i Becquerel) men mere generelt i strålehygieniske spørsmål, så kan man gange hver spesifikke aktivitet med dens midlere avsatt energi per kilogram kroppsvekt for å beregne absorbert stråledose (målt i Gray), eller i tillegg gange hver aktivitet også med sin tilsvarende kvalitetsfaktor for å beregne ekvivalent stråledose (målt i Sievert). Vi skal ikke gjøre slike vurderinger her.

4 Analytiske eksempler med et trenivåsystem

Siden all teori nå er på plass, er det på tide med noen enkle eksempler slik at man ser hvordan metoden virker. Disse eksemplene er såpass enkle at numeriske spørsmål og de faktiske beregningene skal stå minst mulig i veien for forståelsen av metoden. I alle eksempler skal vi gå ut fra tre nivåer eller isotoper med mulige henfall mellom disse. I tillegg, så tillater vi en direkte produksjon av opptil to av de tre nivåene (se figur 4.1).



Figur 4.1 Typisk skjema av tre nivåer eller isotoper med mulige overganger og direkte produksjoner. I de fleste regnestykker kommer vi til å bruke en forenkling der en eller flere av overgangs- og produksjonsrater er satt lik null.

I alle tilfeller, så skal produksjonsraten være konstant i tid, slik at løsningen som diskutert i kapittel 3.1 kan anvendes. Videre, så skal vi i alle tilfeller sette starttidspunkt $t_0 = 0$, slik at formlene blir så enkle som mulig.

4.1 Eksempel med $\lambda_{CA} = 0$, $N_0 = 0$ og $P_B = 0$

I det første eksemplet ønsker vi å se på to etterfølgende henfall fra A til B og så fra B til C, uten mulighet for noen direkte overgang fra A til C. Dette kunne modellere kontinuerlig produksjon av en isotop for eksempel ved fisjon i en reaktor som henfaller ved to etterfølgende β^- -overganger. Kun den første isotopen produseres direkte, og stoffmengden til alle isotoper ved starttidspunkt skal være lik null.

Med disse antakelsene, så er utgangspunktet til beregningene gitt ved

$$\lambda = \begin{pmatrix} -\lambda_{BA} & 0 & 0 \\ +\lambda_{BA} & -\lambda_{CB} & 0 \\ 0 & +\lambda_{CB} & 0 \end{pmatrix}, \vec{P}_0 = \begin{pmatrix} P_A \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \text{ og } \vec{N}_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.1)$$

Hensikten er å beregne¹¹ funksjonen $f_P(\lambda t)$. For å gjøre dette finner vi først settet med egenverdiene til matrisen λt . Siden matrisen er en triangulær matrise (se kapittel 2) er egenverdiene lik diagonalelementene, det vil si $\{\mu_m\} = \{-\lambda_{BA}t, -\lambda_{CB}t, 0\}$. I følge kapittel 3.4 kan vi med disse egenverdiene sette opp et system av algebraiske likninger for å beregne utviklingskoeffisienten. Helt konkret får vi

$$\begin{pmatrix} \frac{1-e^{-\lambda_{BA}t}}{\lambda_{BA}t} \\ \frac{1-e^{-\lambda_{CB}t}}{\lambda_{CB}t} \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -\lambda_{BA}t & (\lambda_{BA}t)^2 \\ 1 & -\lambda_{CB}t & (\lambda_{CB}t)^2 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix}. \quad (4.2)$$

Matrisen lar seg invertere hvis $\lambda_{BA} \neq \lambda_{CB}$ og man får de tre koeffisientene

$$\alpha_0 = 1 \quad (4.3)$$

$$\alpha_1 = \frac{1}{\lambda_{BA}\lambda_{CB}(\lambda_{CB} - \lambda_{BA})t^2} \left[\frac{\lambda_{CB}^2}{\lambda_{BA}}(e^{-\lambda_{BA}t} - 1 + \lambda_{BA}t) - \frac{\lambda_{BA}^2}{\lambda_{CB}}(e^{-\lambda_{CB}t} - 1 + \lambda_{CB}t) \right], \quad (4.4)$$

$$\alpha_2 = \frac{1}{\lambda_{BA}\lambda_{CB}(\lambda_{CB} - \lambda_{BA})t^3} \left[\frac{\lambda_{CB}}{\lambda_{BA}}(e^{-\lambda_{BA}t} - 1 + \lambda_{BA}t) - \frac{\lambda_{BA}}{\lambda_{CB}}(e^{-\lambda_{CB}t} - 1 + \lambda_{CB}t) \right]. \quad (4.5)$$

Med dette har vi alt vi trenger for å beregne løsningen ved

$$\vec{N}(t) = t [\alpha_0 \mathbb{I} + \alpha_1 \lambda t + \alpha_2 (\lambda t)^2] \cdot \vec{P}_0, \quad (4.6)$$

som gir

$$\vec{N}(t) = P_A \begin{pmatrix} \frac{1}{\lambda_{BA}} - \frac{1}{\lambda_{BA}} e^{-\lambda_{BA}t} \\ \frac{1}{\lambda_{CB}} - \frac{1}{\lambda_{CB} - \lambda_{BA}} e^{-\lambda_{BA}t} + \frac{1}{\lambda_{CB} - \lambda_{BA}} \frac{\lambda_{BA}}{\lambda_{CB}} e^{-\lambda_{CB}t} \\ t - \frac{1}{\lambda_{BA}} - \frac{1}{\lambda_{CB}} + \frac{1}{\lambda_{CB} - \lambda_{BA}} \frac{\lambda_{CB}}{\lambda_{BA}} e^{-\lambda_{BA}t} - \frac{1}{\lambda_{CB} - \lambda_{BA}} \frac{\lambda_{BA}}{\lambda_{CB}} e^{-\lambda_{CB}t} \end{pmatrix}. \quad (4.7)$$

I tilfelle $\lambda_{BA} = \lambda_{CB} \equiv \lambda$, har matrisen λt to like egenverdier, og systemet av likninger for å beregne utviklingskoeffisientene blir

$$\begin{pmatrix} \frac{1-e^{-\lambda t}}{\lambda t} \\ \frac{1-e^{-\lambda t} - \lambda t e^{-\lambda t}}{(\lambda t)^2} \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -\lambda t & (\lambda t)^2 \\ 0 & 1 & -2\lambda t \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix}. \quad (4.8)$$

Også denne matrisen lar seg invertere og vi får de tre koeffisientene

$$\alpha_0 = 1, \quad (4.9)$$

$$\alpha_1 = \frac{1}{(\lambda t)^2} [-3 + 2\lambda t + 3e^{-\lambda t} + \lambda t e^{-\lambda t}], \quad (4.10)$$

$$\alpha_2 = \frac{1}{(\lambda t)^3} [-2 + 2\lambda t + 2e^{-\lambda t} + \lambda t e^{-\lambda t}]. \quad (4.11)$$

¹¹Funksjonen $e^{\lambda t}$ behøves ikke i dette eksemplet siden \vec{N}_0 er lik null.

Dermed er alt på plass, og vi kan beregne løsningen som blir

$$\vec{N}(t) = P_A \begin{pmatrix} \frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda} e^{-\lambda t} \\ \frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda} e^{-\lambda t} - t e^{-\lambda t} \\ t - \frac{2}{\lambda} + \frac{2}{\lambda} e^{-\lambda t} + t e^{-\lambda t} \end{pmatrix}. \quad (4.12)$$

4.2 Eksempel med $\lambda_{CA} = 0$ og $N_0 = 0$

Dette eksemplet er en generalisering av det forrige eksemplet ved at også direkte produksjon av isotop B er tillatt (igjen, for eksempel ved fisjon i en reaktor). Dermed er matrisen λ den samme som i kapittel 4.1 og vektoren $\vec{N}_0 = 0$ er også som før. Kun vektoren som modellerer produksjonsraten er ny. Den er nå gitt ved

$$\vec{P}_0 = \begin{pmatrix} P_A \\ P_B \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.13)$$

Det betyr samtidig, at vi fortsatt kun trenger å beregne funksjonen $f_P(\lambda t)$, som vi allerede har gjort i kapittel 4.1. Dermed kan vi gå direkte til siste trinn av regnestykket, der vi beregner

$$\vec{N}(t) = t f_P(\lambda t) \cdot \vec{P}_0. \quad (4.14)$$

Selv her kan vi gjenbruke løsningen som vi fant i kapittel 4.2. Løsningen er nemlig summen av to bidrag som er proporsjonal til henholdsvis P_A og P_B , der bidraget som er proporsjonal til P_A er identisk med løsningen vi fant i kapittel 4.1, mens bidraget som er proporsjonal til P_B er gitt ved

$$\vec{N}_B(t) = P_B \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{\lambda_{CB}} (1 - e^{-\lambda_{CB} t}) \\ t - \frac{1}{\lambda_{CB}} (1 - e^{-\lambda_{CB} t}) \end{pmatrix}, \quad (4.15)$$

som sammen med det første bidraget gir

$$\vec{N}(t) = \begin{pmatrix} \frac{P_A}{\lambda_{BA}} (1 - e^{-\lambda_{BA} t}) \\ \frac{P_A + P_B}{\lambda_{CB}} - \frac{P_A}{\lambda_{CB} - \lambda_{BA}} e^{-\lambda_{BA} t} + \frac{1}{\lambda_{CB}} \left(\frac{P_A \lambda_{BA}}{\lambda_{CB} - \lambda_{BA}} - P_B \right) e^{-\lambda_{CB} t} \\ (P_A + P_B) \left(t - \frac{1}{\lambda_{CB}} \right) - \frac{P_A}{\lambda_{BA}} \left(1 - \frac{\lambda_{CB}}{\lambda_{CB} - \lambda_{BA}} e^{-\lambda_{BA} t} \right) - \frac{1}{\lambda_{CB}} \left(\frac{P_A \lambda_{BA}}{\lambda_{CB} - \lambda_{BA}} - P_B \right) e^{-\lambda_{CB} t} \end{pmatrix}. \quad (4.16)$$

I tilfelle $\lambda_{BA} = \lambda_{CB} \equiv \lambda$ kan man løse problemet på akkurat samme måte. Bidraget som er proporsjonal til P_A er det samme som vi fant i kapittel 4.1, mens bidraget som er proporsjonal til P_B er gitt ved

$$\vec{N}_B(t) = P_B \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{\lambda} (1 - e^{-\lambda t}) \\ t - \frac{1}{\lambda} (1 - e^{-\lambda t}) \end{pmatrix}, \quad (4.17)$$

slik at summen av begge bidrag gir

$$\vec{N}(t) = \begin{pmatrix} \frac{P_A}{\lambda}(1 - e^{-\lambda t}) \\ \frac{P_A + P_B}{\lambda}(1 - e^{-\lambda t}) - P_A t e^{-\lambda t} \\ (P_A + P_B)t - \frac{2P_A + P_B}{\lambda}(1 - e^{-\lambda t}) + P_A t e^{-\lambda t} \end{pmatrix}. \quad (4.18)$$

4.3 Eksempel med $\lambda_{CA} = 0$, $N_B = 0$ og $P_A = 0$

Her antar vi at kun isotop B blir produsert direkte, mens det er en gitt mengde av isotop A ved starttidspunkt. Matrisen λ er altså fortsatt den samme som i kapitlene 4.1 og 4.2, men vektorene som gir opprinnelig stoffmengde \vec{N}_0 og produksjonsraten \vec{P}_0 er nå gitt ved

$$\vec{N}_0 = \begin{pmatrix} N_A \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \text{ og } \vec{P}_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ P_B \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.19)$$

Siden stoffmengde ved starttidspunkt ikke er lik null lenger, er den generelle løsningen gitt ved (se kapittel 3.2)

$$\vec{N}(t) = t f_P(\lambda t) \cdot \vec{P}_0 + e^{\lambda t} \cdot \vec{N}_0. \quad (4.20)$$

Det første bidraget har vi allerede beregnet i kapittel 4.2 ved likning (4.15). For å kunne beregne det andre bidraget, må vi først beregne den andre matrisefunksjonen $e^{\lambda t}$. Det gjør vi på liknende måte som i kapittel 4.1 ved å beregne utviklingskoeffisientene ved

$$\begin{pmatrix} e^{-\lambda_{BA}t} \\ e^{-\lambda_{CB}t} \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -\lambda_{BA}t & (\lambda_{BA}t)^2 \\ 1 & -\lambda_{CB}t & (\lambda_{CB}t)^2 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix}. \quad (4.21)$$

Matrisen er den samme som i kapittel 4.1 og lar seg fortsatt invertere hvis $\lambda_{BA} \neq \lambda_{CB}$. Dermed får man de tre koeffisientene

$$\beta_0 = 1, \quad (4.22)$$

$$\beta_1 = \frac{1}{\lambda_{BA}\lambda_{CB}t} \left[\frac{\lambda_{BA}^2 e^{-\lambda_{CB}t} - \lambda_{CB}^2 e^{-\lambda_{BA}t}}{\lambda_{CB} - \lambda_{BA}} + \lambda_{BA} + \lambda_{CB} \right], \quad (4.23)$$

$$\beta_2 = \frac{1}{\lambda_{BA}\lambda_{CB}t^2} \left[\frac{\lambda_{BA} e^{-\lambda_{CB}t} - \lambda_{CB} e^{-\lambda_{BA}t}}{\lambda_{CB} - \lambda_{BA}} + 1 \right]. \quad (4.24)$$

Dermed kan vi nå beregne matrisefunksjonen $e^{\lambda t}$ ved

$$e^{\lambda t} = [\beta_0 \mathbb{I} + \beta_1 \lambda t + \beta_2 (\lambda t)^2]. \quad (4.25)$$

Videre kan vi nå beregne det andre bidraget til løsningen som er

$$\vec{N}_A(t) = N_A \begin{pmatrix} e^{-\lambda_{BA}t} \\ \frac{\lambda_{BA}}{\lambda_{CB}-\lambda_{BA}}(e^{-\lambda_{BA}t} - e^{-\lambda_{CB}t}) \\ 1 - \frac{1}{\lambda_{CB}-\lambda_{BA}}(\lambda_{CB}e^{-\lambda_{BA}t} - \lambda_{BA}e^{-\lambda_{CB}t}) \end{pmatrix}, \quad (4.26)$$

Sammen med det første bidraget som er gitt ved likning (4.15) får vi

$$\vec{N}(t) = \begin{pmatrix} N_A e^{-\lambda_{BA}t} \\ \frac{P_B}{\lambda_{CB}} + \frac{N_A \lambda_{BA}}{\lambda_{CB}-\lambda_{BA}} e^{-\lambda_{BA}t} - \left(\frac{N_A \lambda_{BA}}{\lambda_{CB}-\lambda_{BA}} + \frac{P_B}{\lambda_{CB}} \right) e^{-\lambda_{CB}t} \\ N_A + P_B \left(t - \frac{1}{\lambda_{CB}} \right) - \frac{N_A \lambda_{CB}}{\lambda_{CB}-\lambda_{BA}} e^{-\lambda_{BA}t} + \left(\frac{N_A \lambda_{BA}}{\lambda_{CB}-\lambda_{BA}} + \frac{P_B}{\lambda_{CB}} \right) e^{-\lambda_{CB}t} \end{pmatrix}. \quad (4.27)$$

Også her skal vi undersøke tilfellet der $\lambda_{BA} = \lambda_{CB} \equiv \lambda$, siden to like egenverdier til matrisen λt forandrer systemet av likninger for å beregne utviklingskoeffisientene til

$$\begin{pmatrix} e^{-\lambda t} \\ e^{-\lambda t} \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -\lambda t & (\lambda t)^2 \\ 0 & 1 & -2\lambda t \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix}. \quad (4.28)$$

Når vi inverterer det nye systemet får vi

$$\beta_0 = 1, \quad (4.29)$$

$$\beta_1 = \frac{2}{\lambda t} - \left(1 + \frac{2}{\lambda t} \right) e^{-\lambda t}, \quad (4.30)$$

$$\beta_2 = \frac{1}{(\lambda t)^2} - \left(\frac{1}{\lambda t} + \frac{1}{(\lambda t)^2} \right) e^{-\lambda t}. \quad (4.31)$$

Dermed kan vi beregne matrisefunksjonen $e^{\lambda t}$ på vanlig måte. Ved hjelp av denne kan vi beregne det andre bidraget til løsningen

$$\vec{N}_A(t) = N_A \begin{pmatrix} e^{-\lambda t} \\ \lambda t e^{-\lambda t} \\ 1 - (1 + \lambda t) e^{-\lambda t} \end{pmatrix}. \quad (4.32)$$

Sammen med bidraget fra likning (4.17) får vi

$$\vec{N}(t) = \begin{pmatrix} N_A e^{-\lambda t} \\ \frac{P_B}{\lambda} + \left(N_A \lambda t - \frac{P_B}{\lambda} \right) e^{-\lambda t} \\ N_A + P_B \left(t - \frac{1}{\lambda} \right) - \left(N_A (\lambda t + 1) - \frac{P_B}{\lambda} \right) e^{-\lambda t} \end{pmatrix}. \quad (4.33)$$

4.4 Eksempel med $N_B = 0$ og $P_0 = 0$

Dette eksemplet er litt annerledes enn de forrige, siden vi tillater en direkte overgang fra nivå A til nivå C. Dette kunne gjenspeile en situasjon der isotop A henfaller ved β^- -stråling enten til grunntilstanden (nivå C) eller en isomer tilstand (nivå B) til en datterisotop. Den isomere tilstanden kan så henfalle ved γ -henfall eller intern konversjon (IC) til grunntilstanden. Vi antar her at en viss mengde av isotop A er gitt, men det skjer ingen ny produksjon av noen av de involverte isotopene.

Som utgangspunkt til beregningen setter vi opp en modifisert matrise λ og to vektorer som modellerer produksjonsrate og opprinnelig stoffmengde

$$\lambda = \begin{pmatrix} -\lambda_{BA} - \lambda_{CA} & 0 & 0 \\ +\lambda_{BA} & -\lambda_{CB} & 0 \\ +\lambda_{CA} & +\lambda_{CB} & 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{P}_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \text{og } \vec{N}_0 = \begin{pmatrix} N_A \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.34)$$

I dette eksemplet trenger vi kun å beregne matrisefunksjonen $e^{\lambda t}$, funksjonen $f_P(\lambda t)$ behøves ikke siden \vec{P}_0 er lik null.

For å beregne $e^{\lambda t}$ må vi først finne settet med egenverdiene til matrisen λ . Matrisen er igjen triangulær (se kapittel 2), som betyr at egenverdiene er lik diagonalelementene. Settet med egenverdiene er dermed $\{\mu_m\} = \{-(\lambda_{BA} + \lambda_{CA})t, -\lambda_{CB}t, 0\}$. Dermed kan vi sette opp systemet av likninger for å beregne utviklingskoeffisientene ved

$$\begin{pmatrix} e^{-\lambda_A t} \\ e^{-\lambda_{CB} t} \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -\lambda_A t & (\lambda_A t)^2 \\ 1 & -\lambda_{CB} t & (\lambda_{CB} t)^2 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix}, \quad (4.35)$$

hvor vi bruker den totale overgangsraten $\lambda_A = \lambda_{BA} + \lambda_{CA}$ fra kapittel 2 for å oppnå en mer kompakt skrivemåte.

Matrisen er faktisk den samme som i likning (4.21) hvis man erstatter λ_{BA} med λ_A . Dermed kan matrisen inverteres hvis $\lambda_A \neq \lambda_{CB}$ og uttrykkene for utviklingskoeffisientene blir de samme som i likningene (4.22–4.24) så lenge man fortsatt erstatter λ_{BA} med λ_A . Med dette kan man beregne matrisefunksjonen $e^{\lambda t}$ ved det vanlige

$$e^{\lambda t} = [\beta_0 \mathbb{I} + \beta_1 \lambda t + \beta_2 (\lambda t)^2], \quad (4.36)$$

som ikke blir det samme som i kapittel 4.3, siden matrisen λ ikke er den samme.

Videre kan vi beregne løsningen som er

$$\vec{N}(t) = N_A \begin{pmatrix} e^{-\lambda_A t} \\ \frac{\lambda_{BA}}{\lambda_{CB} - \lambda_A} (e^{-\lambda_A t} - e^{-\lambda_{CB} t}) \\ 1 + \frac{\lambda_{CA} - \lambda_{CB}}{\lambda_{CB} - \lambda_A} e^{-\lambda_A t} + \frac{\lambda_{BA}}{\lambda_{CB} - \lambda_A} e^{-\lambda_{CB} t} \end{pmatrix}, \quad (4.37)$$

Også her skal vi undersøke tilfellet der $\lambda_A = \lambda_{CB} \equiv \lambda$. I så fall får vi et system med likninger for å beregne utviklingskoeffisientene som er helt identisk med likning (4.28). Dermed blir utviklingskoeffisientene gitt ved likningene (4.29–4.31). Med disse kan vi igjen beregne matrisefunksjonen $e^{\lambda t}$ (som igjen ikke blir den samme som i kapittel 4.3) og videre løsningen

$$\vec{N}(t) = N_A \begin{pmatrix} e^{-\lambda t} \\ \lambda_{BA} t e^{-\lambda t} \\ 1 - (1 + \lambda_{BA} t) e^{-\lambda t} \end{pmatrix}. \quad (4.38)$$

4.5 En morsom kuriositet

Løsningen i kapittel 4.2 for $\frac{P_A + P_B}{\lambda_{CB}} = \frac{P_B}{\lambda_{BA}}$ blir til

$$\vec{N}(t) = \begin{pmatrix} \frac{P_A}{\lambda_{BA}} (1 - e^{-\lambda_{BA} t}) \\ \frac{P_B}{\lambda_{BA}} (1 - e^{-\lambda_{BA} t}) \\ (P_A + P_B) \left(t - \frac{1}{\lambda_{BA}} (1 - e^{-\lambda_{BA} t}) \right) \end{pmatrix}, \quad (4.39)$$

og løsningen i kapittel 4.3 for $N_A = P_B \left(\frac{1}{\lambda_{CB}} - \frac{1}{\lambda_{BA}} \right)$ blir til

$$\vec{N}(t) = \begin{pmatrix} N_A e^{-\lambda_{BA} t} \\ \frac{P_B}{\lambda_{CB}} (1 - e^{-\lambda_{BA} t}) \\ P_B t - \frac{P_B}{\lambda_{BA}} (1 - e^{-\lambda_{BA} t}) \end{pmatrix}, \quad (4.40)$$

som betyr at i disse spesialtilfellene så følger aktiviteten til isotop B en enkel eksponentiell tidsavhengighet, dog med halveringstiden til isotop A.

5 Numeriske metoder

Selv om de analytiske eksemplene som vi diskuterte i kapittel 4 forhåpentlig illustrerer metoden ganske ordentlig, så bærer de litt preg av matematiske øvelser. For en numerisk algoritme som skal anvendes på realistiske eksempler med mange forskjellige henfall og reaksjoner, så må hovedfokus ligge på ytelse. Vi skal derfor se på forskjellige måter for å løse oppgaven.

5.1 Invertere en tidsuavhengig Vandermondematrix

Beregning av matrisefunksjoner i kapittel 3.4 og i alle eksempler i kapittel 4 er basert på (tidsavhengige) egenverdier $\{\mu_m\}$ til matrisen $\lambda(t - t_0)$. Det er ikke noe problem for de analytiske eksemplene fra kapittel 4, men for en numerisk algoritme betyr det at man må invertere en Vandermondematrix for hvert tidspunkt. Dette gjør algoritmen ineffektiv. Vi skal derfor formulere en bedre algoritme der man bruker settet med (tidsuavhengige) egenverdier $\{\nu_m\}$ til matrisen λ . De to settene med egenverdier er relatert med hverandre ved $\mu_k = \nu_k(t - t_0)$.

I første omgang skal vi anta at λ har n forskjellige egenverdier. I så fall finner vi

$$\begin{pmatrix} \exp(\nu_1(t - t_0)) \\ \exp(\nu_2(t - t_0)) \\ \vdots \\ \exp(\nu_n(t - t_0)) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \nu_1 & \cdots & \nu_1^{n-1} \\ 1 & \nu_2 & \cdots & \nu_2^{n-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \nu_n & \cdots & \nu_n^{n-1} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1(t - t_0) \\ \vdots \\ \beta_{n-1}(t - t_0)^{n-1} \end{pmatrix} \quad (5.1)$$

og

$$\begin{pmatrix} f_P(\nu_1(t - t_0)) \\ f_P(\nu_2(t - t_0)) \\ \vdots \\ f_P(\nu_n(t - t_0)) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \nu_1 & \cdots & \nu_1^{n-1} \\ 1 & \nu_2 & \cdots & \nu_2^{n-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \nu_n & \cdots & \nu_n^{n-1} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1(t - t_0) \\ \vdots \\ \alpha_{n-1}(t - t_0)^{n-1} \end{pmatrix}. \quad (5.2)$$

Her har vi flyttet tidsavhengigheten ut av matrisen og inn i vektorene med utviklingskoeffisientene. Med dette grepet behøver man ikke å invertere en ny matrise for hvert tidspunkt. Det er tilstrekkelig å invertere én Vandermondematrix én gang for å kunne løse opp likningssystemene. Det hjelper også at man på denne måten beregner direkte $\tilde{\beta}_k = \beta_k(t - t_0)^k$ og $\tilde{\alpha}_k = \alpha_k(t - t_0)^k$, siden beregningen av matrisefunksjonene forenkles dermed fra likningene (3.20,3.21) til

$$e^{\lambda(t-t_0)} = \tilde{\beta}_0 \mathbb{I} + \tilde{\beta}_1 \lambda + \tilde{\beta}_2 \lambda^2 + \dots + \tilde{\beta}_{n-1} \lambda^{n-1}, \quad (5.3)$$

$$f_P(\lambda(t - t_0)) = \tilde{\alpha}_0 \mathbb{I} + \tilde{\alpha}_1 \lambda + \tilde{\alpha}_2 \lambda^2 + \dots + \tilde{\alpha}_{n-1} \lambda^{n-1}. \quad (5.4)$$

Videre, siden løsningen for en konstant produksjonsrate er gitt ved likning (3.14)

$$\vec{N}(t) = (t - t_0) f_P(\lambda(t - t_0)) \cdot \vec{P}_0 + e^{\lambda(t-t_0)} \cdot \vec{N}_0. \quad (5.5)$$

det vil si ved

$$\vec{N}(t) = (t - t_0) \sum_{k=0}^{n-1} \tilde{\alpha}_k \left[\lambda^k \cdot \vec{P}_0 \right] + \sum_{k=0}^{n-1} \tilde{\beta}_k \left[\lambda^k \cdot \vec{N}_0 \right] \quad (5.6)$$

er alle uttrykk i hakeparentesene tidsuavhengige. Derfor behøver man å beregne disse uttrykkene kun én gang.

Spesialtilfellet med doble eller mangedoble egenverdier er skissert i kapittel 3.4.1. Sentralt for dette er polynomene $P(\mu)$ og $Q(\mu)$. Siden vi ønsker å operere med egenverdiene $\{\nu_m\}$ til den tidsuavhengige matrisen λ , formulerer vi modifiserte polynomer ved

$$\tilde{P}(\nu) = \tilde{\beta}_0 + \tilde{\beta}_1\nu + \tilde{\beta}_2\nu^2 + \dots + \tilde{\beta}_{n-1}\nu^{n-1}, \quad (5.7)$$

$$\tilde{Q}(\nu) = \tilde{\alpha}_0 + \tilde{\alpha}_1\nu + \tilde{\alpha}_2\nu^2 + \dots + \tilde{\alpha}_{n-1}\nu^{n-1}. \quad (5.8)$$

der tidsavhengigheten er igjen flyttet over til koeffisientene. Hvis vi nå betrakter en m -dobbel egenverdi ν_i , krever vi igjen at

$$\left. \frac{d^k}{d\nu^k} e^{\nu(t-t_0)} \right|_{\nu_i} = (t-t_0)^k e^{\nu_i(t-t_0)} = \left. \frac{d^k}{d\nu^k} \tilde{P}(\nu) \right|_{\nu_i}, \quad (5.9)$$

$$\left. \frac{d^k}{d\nu^k} f_P(\nu(t-t_0)) \right|_{\nu_i} = (t-t_0)^k f_P^{(k)}(\nu_i(t-t_0)) = \left. \frac{d^k}{d\nu^k} \tilde{Q}(\nu) \right|_{\nu_i}, \quad (5.10)$$

der $k = 1 \dots m-1$. Dette gir igjen nok nye likninger til at man har et tilstrekkelig antall betingelser for å kunne bestemme settene med koeffisientene $\{\tilde{\beta}_m\}$ og $\{\tilde{\alpha}_m\}$.

5.2 Numerisk algoritme

En effisient numerisk algoritme ved hjelp av en tidsuavhengig Vandermondematrix under antakelsen av en konstant produksjonsrate består av følgende trinn

1. Sette opp matrisen λ som beskriver nettverket av henfall (se kapittel 2) og startbetingelsene \vec{P}_0 og \vec{N}_0 ved t_0 .
2. Beregne alle hakeparenteser $[\lambda^k \cdot \vec{P}_0]$ og $[\lambda^k \cdot \vec{N}_0]$ fra likning (5.6).
3. Finne settet med egenverdier $\{\nu_m\}$ til λ (egenverdiene er diagonalelementene hvis matrisen er triangulær, se kapittel 2).

4. Sette opp Vandermondematrixen $\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & \nu_1 & \dots & \nu_1^{n-1} \\ 1 & \nu_2 & \dots & \nu_2^{n-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \nu_n & \dots & \nu_n^{n-1} \end{pmatrix}$ eller tilsvarende i tilfelle doble

eller mangedoble egenverdier.

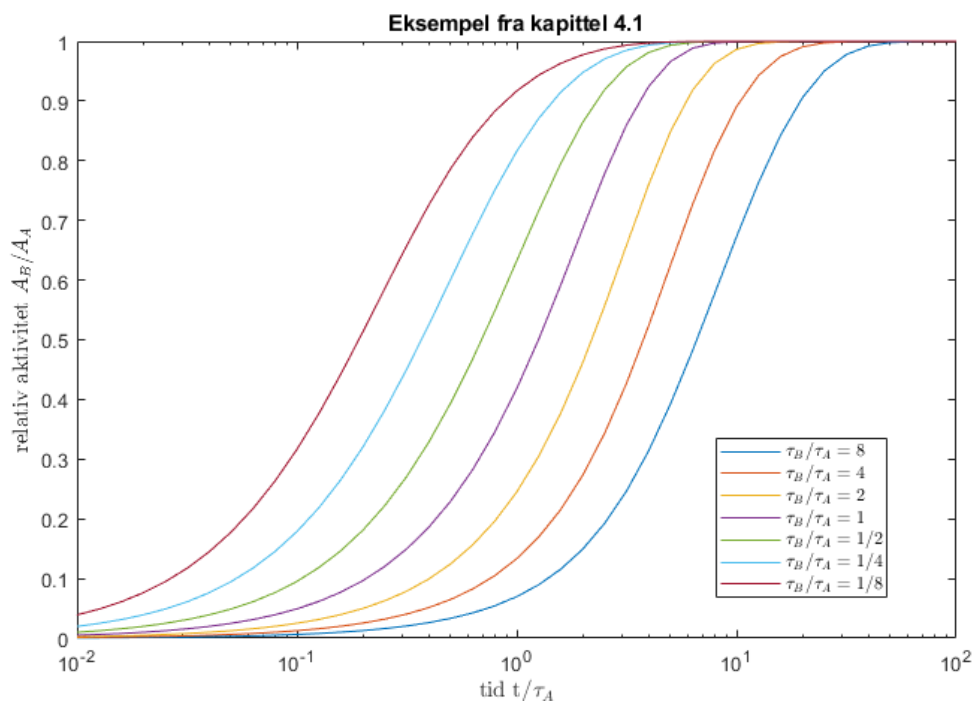
5. Beregne den inverse matrisen \mathbf{M}^{-1} .
6. Beregne for hvert ønsket tidspunkt t

(a) Settet med koeffisientene $\{\tilde{\alpha}_m\}$ og $\{\tilde{\beta}_m\}$ ved å gange vektorene $\begin{pmatrix} f_P(\nu_1(t-t_0)) \\ f_P(\nu_2(t-t_0)) \\ \vdots \\ f_P(\nu_n(t-t_0)) \end{pmatrix}$ og

$$\begin{pmatrix} \exp(\nu_1(t - t_0)) \\ \exp(\nu_2(t - t_0)) \\ \vdots \\ \exp(\nu_n(t - t_0)) \end{pmatrix}$$
 eller tilsvarende i tilfelle doble eller mangedoble egenverdier med den inverse matrisen \mathbf{M}^{-1} .

- (b) Løsningen $\vec{N}(t)$ ved hjelp av likning (5.6).
- (c) Spesiell aktivitet til en isotop ved å gange tilsvarende stoffmengde med overgangsrate.

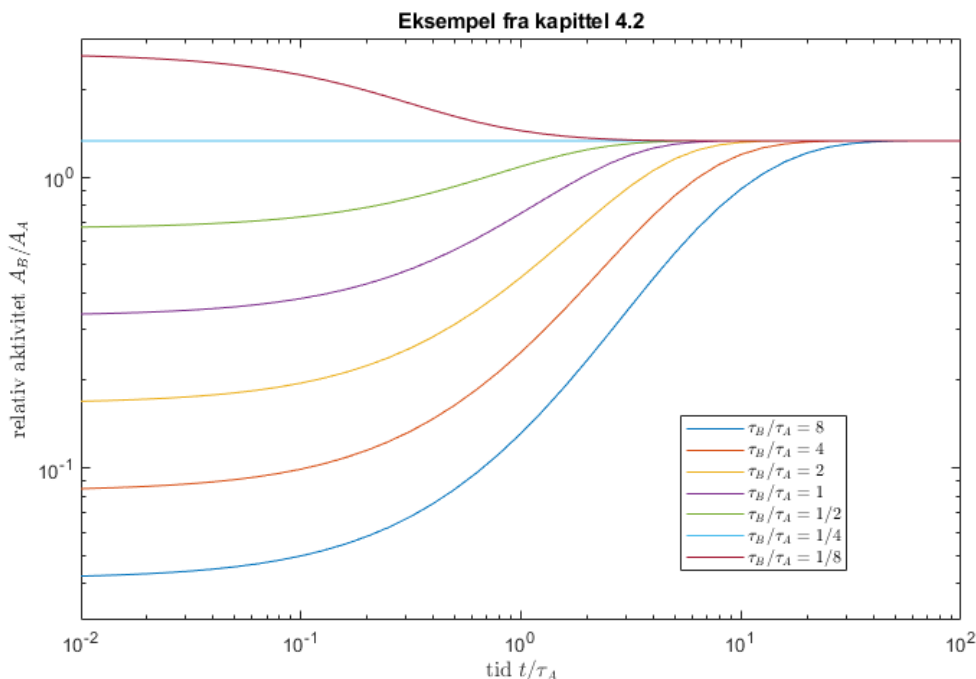
Det største numeriske problemet med algoritmen er å invertere Vandermondematriksen. Selv om vi kan vise at determinanten er ulik null, kan de store forskjellene i størrelsesorden til egenverdiene (det vil si halveringstidene) føre til at matrisen ikke kan inverteres numerisk med tilstrekkelig presisjon.



Figur 5.1 Relativ aktivitet (aktivitet til isotop B delt med aktivitet til isotop A) som funksjon av tid for eksempelet i kapittel 4.1. τ_A er levetid til isotop A og τ_B er levetid til isotop B.

Som en liten demonstrasjon beregner vi numeriske verdier tilsvarende eksemplene fra kapittel 4.1 og 4.2, (se figurene 5.1 og 5.2). I figur 5.1 ser man veldig fint effekten som ofte kalles sekulær likevekt. Det betyr at for tider som er lange i forhold til den lengste halveringstiden (eller levetiden¹²) i en henfallsrekke, så viser alle isotoper i rekken det samme aktivitetsnivået. Generelt kan man si at aktivitetsnivået til en isotop nærmer seg aktivitetsnivået til isotopen én lenger opp i henfallsrekken på en tidsskala som er lik sin egen levetid. Vi kommer til å bruke denne innsikten senere igjen.

¹²Levetiden τ er relatert til halveringstiden $T_{1/2}$ ved $T_{1/2} = \tau \ln 2$.



Figur 5.2 Relativ aktivitet (aktivitet til isotop B delt med aktivitet til isotop A) som funksjon av tid for eksempelet i kapittel 4.2. τ_A er levetid til isotop A og τ_B er levetid til isotop B.

Også i figur 5.2 ser man effekten til sekulær likevekt. I tillegg, siden vi velger $P_A = 3P_B$, får vi for $\frac{\tau_B}{\tau_A} = \frac{\lambda_{BA}}{\lambda_{CB}} = \frac{1}{4}$, situasjonen som er beskrevet i kapittel 4.5. Det betyr at i dette tilfellet blir den relative aktiviteten $\frac{A_B}{A_A} = \frac{4}{3}$.

5.3 Invertere en tidsuavhengig transformasjonsmatrise

En annen mulighet for å løse oppgaven numerisk finner vi, hvis vi går tilbake til kapittel 3.2 og definisjonen (3.12 og (3.15) til matrisefunksjonene, som var

$$e^{\lambda(t-t_0)} = \mathbb{I} + \lambda(t-t_0) + \frac{1}{2}\lambda^2(t-t_0)^2 + \dots, \quad (5.11)$$

$$f_P(\lambda(t-t_0)) = \mathbb{I} + \frac{1}{2}\lambda(t-t_0) + \frac{1}{6}\lambda^2(t-t_0)^2 + \dots \quad (5.12)$$

Slike potensrekker lar seg enkelt summere hvis matrisen i funksjonsargumentet er diagonal. Hvis vi antar en diagonal matrise \mathbf{D} med diagonalelementene $\{d_i\}$, så blir $e^{\mathbf{D}}$, eller generelt, enhver analytisk funksjon $f(\mathbf{D})$ også en diagonal matrise med diagonalelementene $\{e^{d_i}\}$, eller generelt $\{f(d_i)\}$.

Nå kan vi ved hjelp av en egnet transformasjonsmatrise \mathbf{T} relatere en generell matrise λ med sin diagonal matrise ved $\mathbf{T}^{-1}\lambda\mathbf{T} = \mathbf{D}$, eller omvendt $\lambda = \mathbf{T}\mathbf{D}\mathbf{T}^{-1}$. Dette er alltid mulig hvis λ

har n lineært uavhengige egenvektorer.¹³ I så fall er nemlig søylevektorene til \mathbf{T} lik de normerte egenvektorene og diagonalelementene til \mathbf{D} er lik egenverdiene til λ . Videre, så garanterer lineær uavhengighet til egenvektorene at \mathbf{T}^{-1} eksisterer. Høyere potenser av matrisen λ kan så formuleres som $\lambda^k = \mathbf{T}\mathbf{D}^k\mathbf{T}^{-1}$, siden $\mathbf{T}^{-1}\mathbf{T} = \mathbf{T}\mathbf{T}^{-1} = \mathbb{I}$. Dermed kan potensrekkeformuleringer som

$$e^{\lambda(t-t_0)} = \mathbf{T} \left[\mathbb{I} + \mathbf{D}(t-t_0) + \frac{1}{2}\mathbf{D}^2(t-t_0)^2 + \dots \right] \mathbf{T}^{-1}, \quad (5.13)$$

$$f_P(\lambda(t-t_0)) = \mathbf{T} \left[\mathbb{I} + \frac{1}{2}\mathbf{D}(t-t_0) + \frac{1}{6}\mathbf{D}^2(t-t_0)^2 + \dots \right] \mathbf{T}^{-1}, \quad (5.14)$$

eller simpelthen

$$e^{\lambda(t-t_0)} = \mathbf{T}e^{\mathbf{D}(t-t_0)}\mathbf{T}^{-1}, \quad (5.15)$$

$$f_P(\lambda(t-t_0)) = \mathbf{T}f_P(\mathbf{D}(t-t_0))\mathbf{T}^{-1}, \quad (5.16)$$

der vi står igjen med funksjonsuttrykk av kun diagonale matriser på høyre siden. Med disse resultatene kan løsningen for en konstant produksjonsrate, gitt ved likning (3.14) skrives som

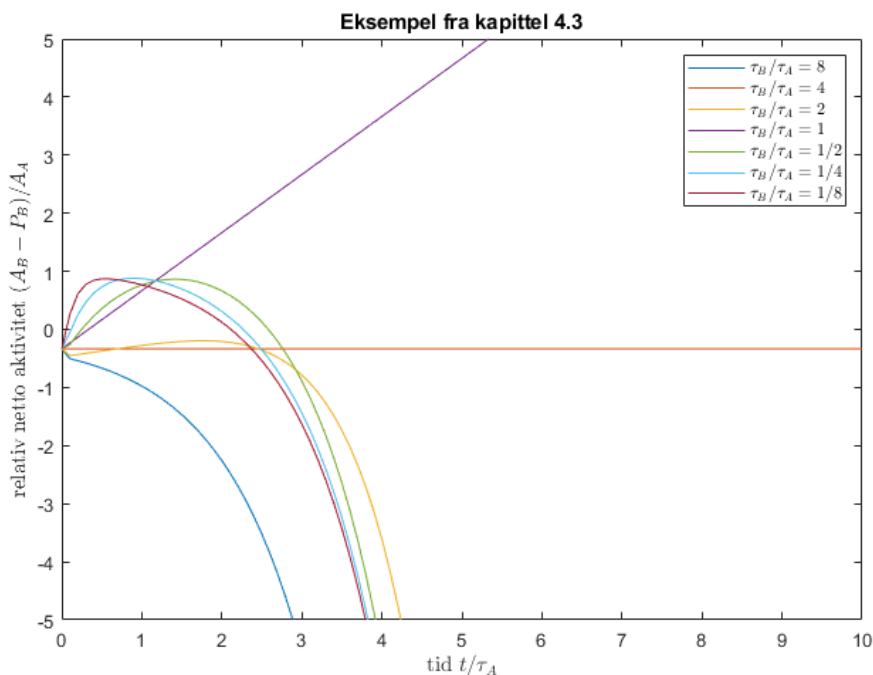
$$\vec{N}(t) = (t-t_0)\mathbf{T}f_P(\mathbf{D}(t-t_0))\mathbf{T}^{-1} \cdot \vec{P}_0 + \mathbf{T}e^{\mathbf{D}(t-t_0)}\mathbf{T}^{-1} \cdot \vec{N}_0. \quad (5.17)$$

Transformasjonsmatrisen \mathbf{T} er tidsuavhengig, siden det ikke spiller noen rolle om man transformerer $\mathbf{T}^{-1}\lambda\mathbf{T} = \mathbf{D}$ eller $\mathbf{T}^{-1}[\lambda(t-t_0)]\mathbf{T} = [\mathbf{D}(t-t_0)]$, det vil si om man ganger λ med en skalar faktor $(t-t_0)$. Dermed behøver man å beregne \mathbf{T} og dens inverse \mathbf{T}^{-1} kun én gang, som gjør også denne algoritmen effisient.

5.4 Numerisk algoritme

En effisient numerisk algoritme ved hjelp av en tidsuavhengig transformasjonsmatrise under antakelsen av en konstant produksjonsrate består av følgende trinn

1. Sette opp matrisen λ som beskriver nettverket av henfall (se kapittel 2) og startbetingelsene \vec{P}_0 og \vec{N}_0 ved t_0 .
2. Finne settet med alle egenverdier $\{\nu_m\}$ til λ (egenverdiene er diagonalelementene hvis matrisen er triangulær, se kapittel 2) samt alle tilsvarende egenvektorer $\{\vec{v}_m\}$.
3. Sette opp diagonalmatrisen \mathbf{D} der diagonalelementene er lik egenverdiene $\{\nu_m\}$ (som er lik diagonalelementene til λ hvis λ er triangulær).
4. Sette opp transformasjonsmatrisen $\mathbf{T} = (\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_n)$, der søylevektorene til \mathbf{T} er lik egenvektorene $\{\vec{v}_m\}$.
5. Beregne den inverse matrisen \mathbf{T}^{-1} .
6. Beregne for hvert ønsket tidspunkt t
 - (a) De diagonale matrisene $e^{\mathbf{D}(t-t_0)}$ og $f_P(\mathbf{D}(t-t_0))$.
 - (b) Løsningen $\vec{N}(t)$ ved hjelp av likning (5.17).
 - (c) Spesiell aktivitet til et isotop ved å gange tilsvarende stoffmengde med overgangsrater.



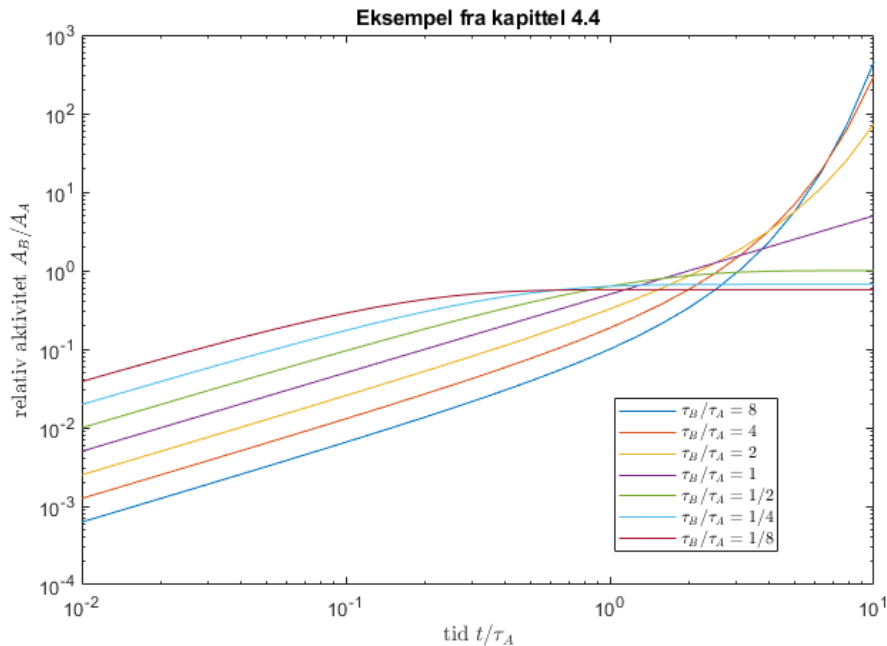
Figur 5.3 Relativ netto aktivitet (aktivitet til isotop B minus dens produksjonsrate delt med aktivitet til isotop A) som funksjon av tid for eksempelet i kapittel 4.3. τ_A er levetid til isotop A og τ_B er levetid til isotop B.

Det største problemet med algoritmen er å invertere transformasjonsmatrisen. Hvis ikke alle egenverdier er forskjellige er det ingen garanti at det i det hele tatt finnes n lineær uavhengige egenvektorer. Og selv om alle egenverdier er forskjellige og dermed alle egenvektorer lineær uavhengige, så kan det hende at noen av egenvektorene er tilnærmet parallelle slik at transformasjonsmatrisen ikke kan inverteres numerisk med tilstrekkelig presisjon.

Også denne algoritmen demonstrerer vi ved å beregne numeriske verdier tilsvarende eksempler fra kapittel 4.3 og 4.4. For figur 5.3 bruker vi i tillegg $\frac{N_A}{\tau_A} = 3P_B$. Denne betingelsen fører til at for $\frac{\tau_B}{\tau_A} = \frac{\lambda_{BA}}{\lambda_{CB}} = 4$, får man akkurat situasjonen som er beskrevet i kapittel 4.5. Videre, ved å plote relativ netto aktivitet $\frac{A_B - P_B}{A_A}$, kan man lett kontrollere at de to spesialtilfellene med $\frac{\tau_B}{\tau_A} = 4$ (fra kapittel 4.5) og $\frac{\tau_B}{\tau_A} = 1$ (doble egenverdier) gir riktig resultat som er henholdsvis $\frac{A_B - P_B}{A_A} = -\frac{1}{3}$ og $\frac{A_B - P_B}{A_A} = \frac{t}{\tau_A} - \frac{1}{3}$. Det hører med å opplyse om at de to spesialtilfellene ikke kan beregnes med denne algoritmen. For $\frac{\tau_B}{\tau_A} = 1$ finner man ikke nok lineær uavhengige egenvektorer for å danne en transformasjonsmatrise. For $\frac{\tau_B}{\tau_A} = 4$ er ikke algoritmen nøyaktig nok for å resultere i en vannrett linje. Disse tilfellene blir derfor evaluert med algoritmen fra kapittel 5.2.

For resultatene som er vist i figur 5.4, bruker vi i tillegg $\lambda_{BA} = \lambda_{CA}$, som betyr at for $\tau_A = \tau_B$, det vil si $\lambda_{BA} + \lambda_{CA} = \lambda_{CB}$, blir den relative aktiviteten $\frac{A_A}{A_B} = \frac{t}{2\tau_A}$.

¹³En tilstrekkelig, men ikke nødvendig betingelse for dette er hvis λ har n forskjellige egenverdier.



Figur 5.4 Relativ aktivitet (aktivitet til isotop B delt med aktivitet til isotop A) som funksjon av tid for eksempelet i kapittel 4.4. τ_A er levetid til isotop A og τ_B er levetid til isotop B.

5.5 Padé approksimasjon

I tillegg til forskjellige muligheter for å beregne matrisefunksjonene $e^{\lambda(t-t_0)}$ og $f_P(\lambda(t-t_0))$ eksakt, finnes det et stort utvalg av tilnærminger. En av de mer populære er Padé approksimasjonen, der man tilnærmer en funksjon ved en kvotient av to polynomer P og Q med henholdsvis gradene n og m , det vil si

$$f(x) \approx \frac{P_n(x)}{Q_m(x)}. \quad (5.18)$$

Polynomene er valgt slik, at begge sider har identiske verdier opptil den $n + m$ -te deriverte ved $x = 0$. For at polynomene skal være entydige, krever man at den laveste orden til $Q_m(x)$ er lik 1. I tilfelle $m = 0$ får man for eksempel Taylorrekken til $f(x)$ opptil n -te orden.

Interessant for oss i denne sammenhengen er Padé approksimasjonen til eksponentialfunksjonen for $n = m$.¹⁴ Her får vi nemlig

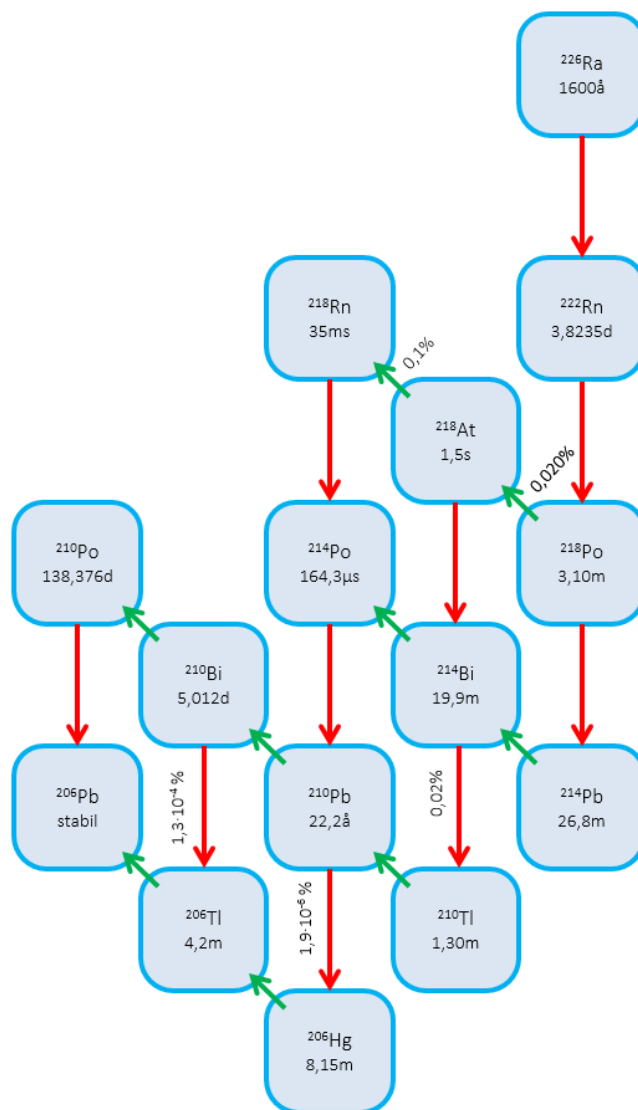
$$e^x \approx \frac{1 + \sum_{k=1}^n a_k x^k}{1 + \sum_{k=1}^n a_k (-x)^k}. \quad (5.19)$$

Dette resultatet kan vi bruke for å beregne Padé approksimasjonen til funksjonen $f_p(x) = \frac{e^x - 1}{x}$, som blir

$$f_p(x) \approx \frac{2 \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n-1}{2} \rfloor} a_{2k+1} x^{2k}}{1 + \sum_{k=1}^n a_k (-x)^k}. \quad (5.20)$$

¹⁴En Padé approksimasjon med $n = m$ er også kalt en diagonal Padé approksimasjon.

På denne måten behøver man kun å beregne et sett av koeffisienter $\{a_m\}$ (for en gitt n) for å approksimere begge funksjoner.



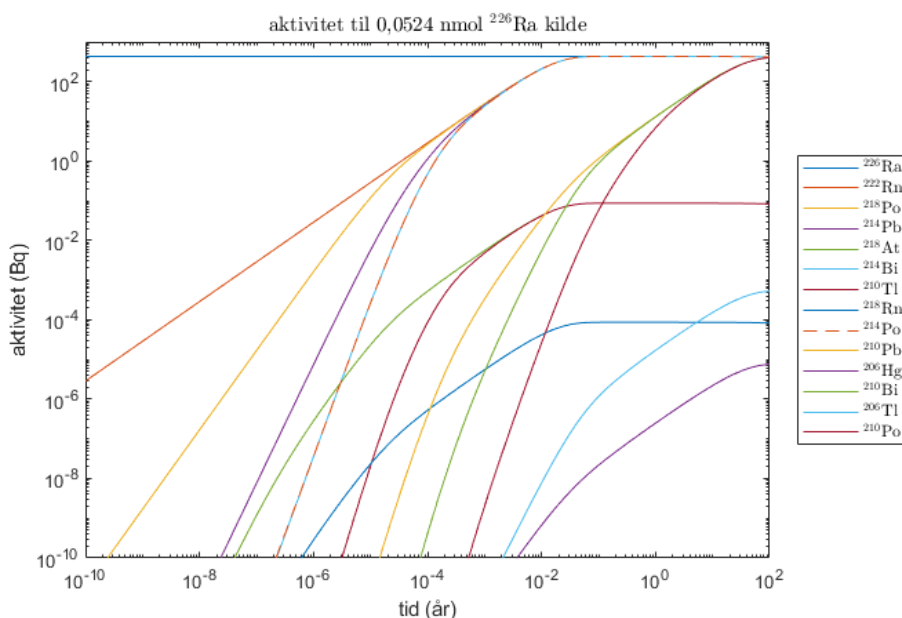
Figur 5.5 Henfallsrekken til ^{226}Ra . Røde og grønne piler indikerer henholdsvis α - og β^- -henfall. Hvis to henfall er mulig for samme isotop er andelen til den svakere forgreningen angitt.

For Padé approksimasjonen diskuterer vi ikke noe spesiell numerisk algoritme. Gnu Octave har faktisk allerede implementert en Padé approksimasjon for å beregne eksponentialfunksjonen til en matrise. Manualen til denne funksjonen refererer til en artikkel til Moler og Van Loan Nineteen Dubious Ways to Compute the Exponential of a Matrix"(SIAM Review 1978), og spesifiserer at implementeringen som brukes baserer seg på en diagonal Padé approksimasjon med tretrinns pre-kondisjoneringen til Ward (SIAM Journal of Numerical Analysis 1977). Det er denne implementeringen vi kommer til å bruke i neste eksemplet.

5.6 Alder til en ^{226}Ra kilde

I figur 5.5 er henfallsrekken til ^{226}Ra reproduisert. Nettverket av henfall består av 15 forskjellige isotoper og vi finner 5 forgreninger, det vil si isotoper som kan henfalle til to forskjellige datterkjerner. Rekken egner seg utmerket som et realistisk eksempel.

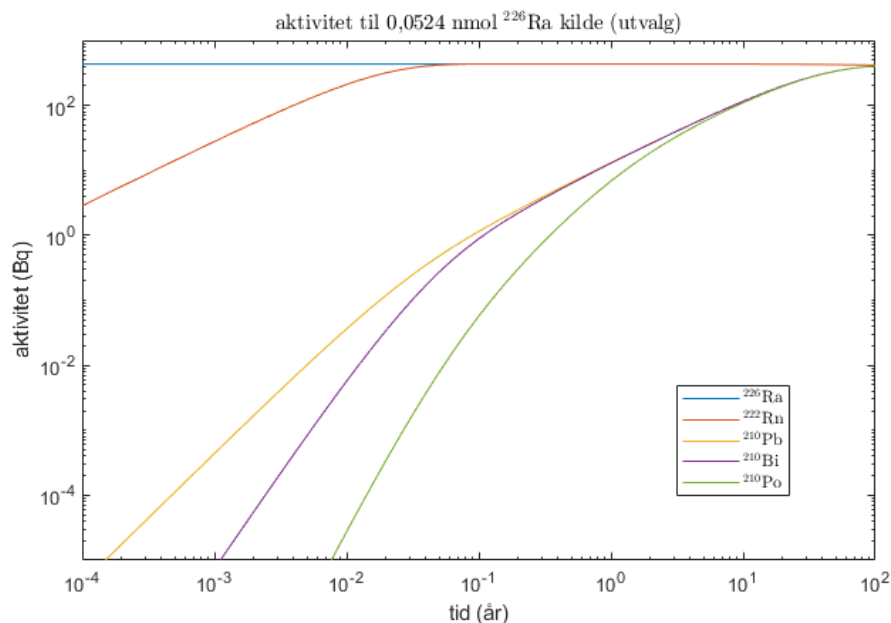
Halveringstidene varierer fra mer enn tusen år for selve ^{226}Ra helt ned til en tidel av et millisekund for ^{214}Po . At alle halveringstider er forskjellige og varierer over mange størrelsesordener er ganske typisk for realistiske eksempler. Derfor er også algoritmen fra kapittel 5.4 (som forutsetter forskjellige halveringstider) generelt egnet til bruk for realistiske eksempler. Nettverket modelleres av en 15×15 matrise (inkludert det stabile ^{206}Pb) som settes opp i henhold til kapittel 2. Det viser seg at algoritmen fra kapittel 5.2 feiler, siden Vandermondematriksen ikke lar seg invertere numerisk. De to andre algoritmene derimot virker. Siden de gir nesten identiske resultater viser vi kun resultater for Padé approksimasjonen i figur 5.6.



Figur 5.6 Aktivitet til en ^{226}Ra kilde beregnet med algoritmen fra kapittel 5.5. Kun 14 av de 15 inkluderte isotoper er radioaktive.

Figur 5.6 viser resultatene, som er beregnet med Padé approksimasjonen fra kapittel 5.5. Man ser at etter 100 år, er aktivitetene til de ni isotoper som ligger langs hovedforgreiningen i sekulær likevekt. I hovedforgreiningen er den første tidssinken som samler opp fire isotoper under seg ^{222}Rn med sin halveringstid på 3,8235 dager (aktiviteten til det ytterst kortlivete ^{214}Po med sin halveringstid på $164,3 \mu\text{s}$ er markert med en stiplet linje siden den overlapper fullstendig med aktiviteten til ^{214}Bi). Den neste tidssinken som samler opp to isotoper under seg er ^{210}Pb med en halveringstid på 22,2 år. Aktiviteten til alle de andre isotoper i de mindre forgreininger har også flatet ut etter 100 år, men på et mye lavere nivå som tilsvarende forgreiningensprosenten.

Basert på dette kan man også tenke seg en tilnærming til problemet, der man kun tar med isotoper



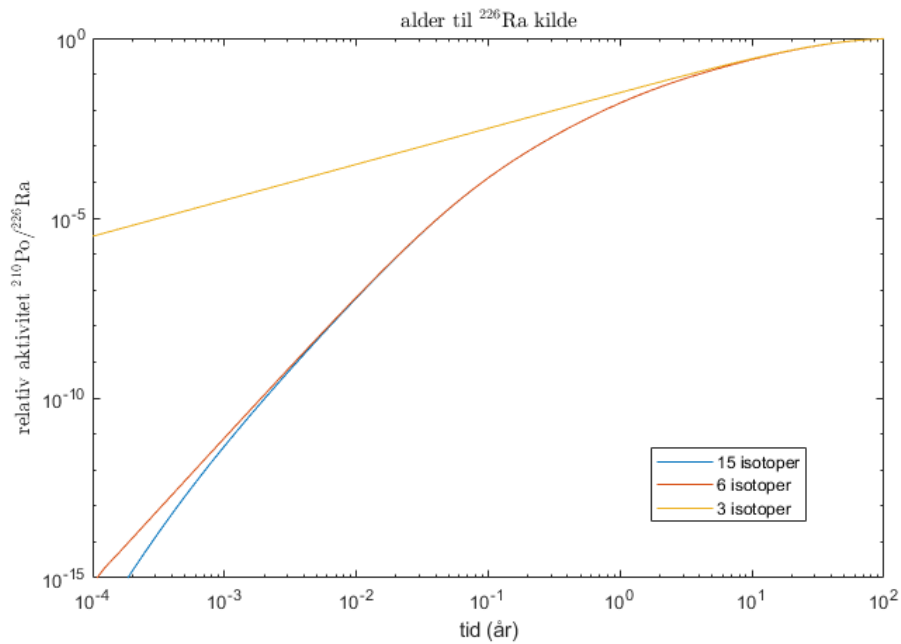
Figur 5.7 Aktivitet til en ^{226}Ra kilde beregnet med algoritmen fra kapittel 5.2, der kun isotoper med halveringstider større enn én dag er tatt hensyn til.

med en halveringstid over en viss grense, for eksempel én dag. Hvis man gjør det, sitter man igjen med seks isotoper (fem radioaktive og én stabil en), og uten noen forgreininger. Også dette problemet løses numerisk, og denne gangen virker alle tre algoritmer og gir tilnærmet identiske løsninger. Løsningen basert på algoritmen fra kapittel 5.2 er vist i figur 5.7.

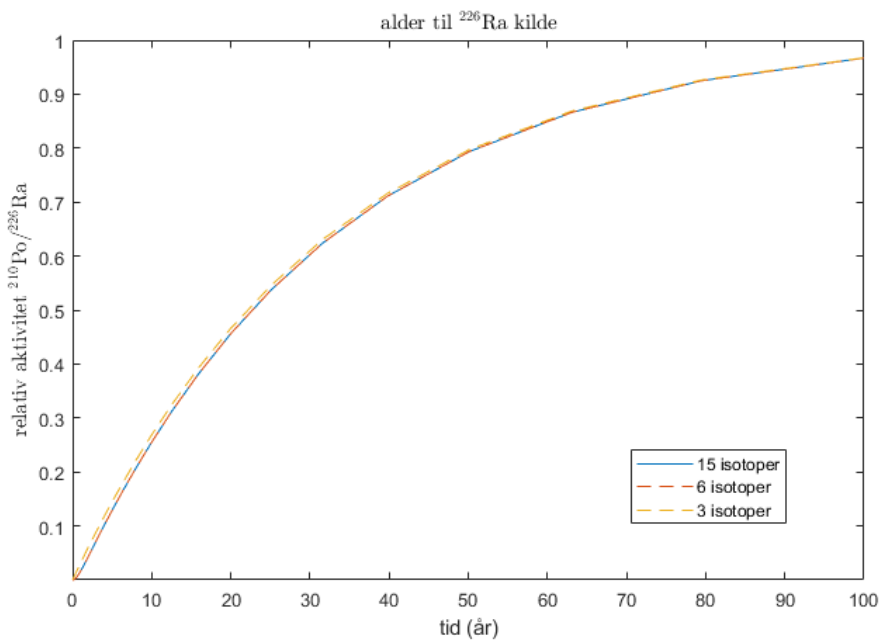
En enda grovere tilnærming får man hvis man hever grensen på relevant halveringstid opp til ett år. Her sitter man igjen med tre isotoper, to radioaktive (^{226}Ra og ^{210}Pb) og én stabil en, som er ^{206}Pb . I så fall beregner man heller ikke lenger aktiviteten til ^{210}Po , men man antar (i tråd med forenklingen) at aktivitetene til ^{210}Pb og ^{210}Po er like, altså at likevekt er etablert med det samme.

For en aldersbestemmelse til en ^{226}Ra kilde måler man gjerne forholdet av α -aktivitet fra selve ^{226}Ra (eller isotopene med α -aktivitet i likevekt, som er ^{222}Rn , ^{218}Po og ^{214}Po) med α -aktivitet fra ^{210}Po . Den sistnevnte er ikke i likevekt med de andre på grunn av den langlivete isotopen ^{210}Pb , som ligger imellom disse i henfallsrekken. Figur 5.8 viser det beregnede forholdet når man tar hensyn til hele nettverket (blå linje) eller når man bruker et forenklet nettverk der man tar hensyn kun til isotoper med en halveringstid over en viss grense (én dag for den røde linjen og ett år for den gule linjen). Man ser at resultatene skiller seg for tider som ligger under grensen for den relevante halveringstiden. Etter omtrent én dag (tilsvarende 10^{-3} år), sammenfaller den røde med den blå linjen. Etter ett år, sammenfaller også den gule linjen med de andre to. I praksis er ikke forskjellene særlig relevante (se figur 5.9), siden man sjeldent har en så fersk kilde og så er det uansett vanskelig å måle et aktivitetsforhold mindre enn 1% – 1‰.

Siden alderen til kilden lar seg godt bestemme basert på en så grovt forenklet beregning, er det blitt en ganske populær lab-øvelse for studenter av kjernefysikk.



Figur 5.8 Beregnet relativ aktivitet av to isotoper i henfallsrekken som funksjon av alder til kilden. Beregningen ble utført med hele nettverket (blå linje), kun med isotoper med halveringstid lengre enn én dag (rød linje) og kun med isotoper med halveringstid lengre enn ett år (gul linje).



Figur 5.9 Samme som figur 5.8, men på en lineær skala.

6 Konklusjon

Hensikten med rapporten er å formulere stoffmengde og aktivitet i et nettverk av reaksjoner i lukket form, altså ved en likning tilsvarende det eksponentielle henfallet av en enkel isotop. Formelt finner vi en slik løsning i kapittel 3, men løsningen er gitt ved en eksponentialfunksjon til en matrise. I utgangspunktet er en slik funksjon av en matrise definert ved sin Taylorrekke, altså en uendelig potensrekke, men ved hjelp av Cayley-Hamilton teoremet kan man finne en eksakt løsning i form av en endelig potensrekke. Koeffisientene til denne potensrekken finner man ved å invertere en Vandermondematrise eller tilsvarende, hvis den opprinnelige matrisen har doble eller mangedoble egenverdier. Prosedyren er demonstrert ved flere analytiske eksempler i kapittel 4.

For større nettverk og matriser der egenverdiene er vidt forskjellige, er denne metoden numerisk ustabil. Vi diskuterer derfor enda en metode for å beregne eksponentialfunksjonen til en matrise. Denne baserer seg på å først diagonalisere matrisen ved en egnet transformasjon. En eksponentialfunksjon til en diagonal matrise kan nemlig beregnes enkelt ved å sette alle diagonalelementer i eksponenten. Transformasjonen og dens inverse eksisterer hvis den opprinnelige matrisen kun har forskjellige egenverdier. Prosedyren er numerisk mer stabil enn den forrige, men den er mindre anvendelig siden den krever at matrisen, som man skal beregne eksponentialfunksjonen av, ikke kan ha doble eller mangedoble egenverdier. Denne og den forrige algoritmen er testet i kapittel 5 ved at de reproducerer de analytiske eksemplene fra kapittel 4.

Til slutt diskuterer vi en tilnærmet metode for å beregne eksponentialfunksjonen til en matrise ved Padé approksimasjonen. Denne er numerisk veldig stabil og stiller ikke noe krav til egenverdiene til matrisen. Denne algoritmen (sammen med de andre der de gir resultater) blir testet ved å beregne de forskjellige aktivitetene til en ^{226}Ra kilde. Her diskuterer vi også mulige forenklinger for aldersbestemmelsen til en slik kilde ved å begrense antall isotoper i nettverket til kun de med en halveringstid over en viss grense.

Matematisk sett, har vi modellert et nettverk av reaksjoner som et system av sammenkoblede autonome lineære førsteordens differensiallikninger. Vi har formulert en løsning til et slikt system i lukket form ved hjelp av matrisefunksjoner. Vi har videre formulert eksakte og tilnærmete uttrykk til slike matrisefunksjoner og implementert noen numeriske algoritmer. Metoden er trolig ikke begrenset til slike enkle tilfeller som vi har diskutert så langt. Ved siden av større og mere kompliserte nettverk av reaksjoner i for eksempel kjernefysikken, kunne man tenke seg at metoden også kan anvendes i for eksempel vibrasjonsanalyse, der man diskuterer liknende differensiallikningssystemer.

Vi ønsker å takke John F. Moxnes for grundig gjennomlesning av rapporten og for å komme med mange gode forslag om forbedring.

Om FFI

Forsvarets forskningsinstitutt ble etablert 11. april 1946. Instituttet er organisert som et forvaltningsorgan, med særskilte fullmakter underlagt Forsvarsdepartementet.

FFIs formål

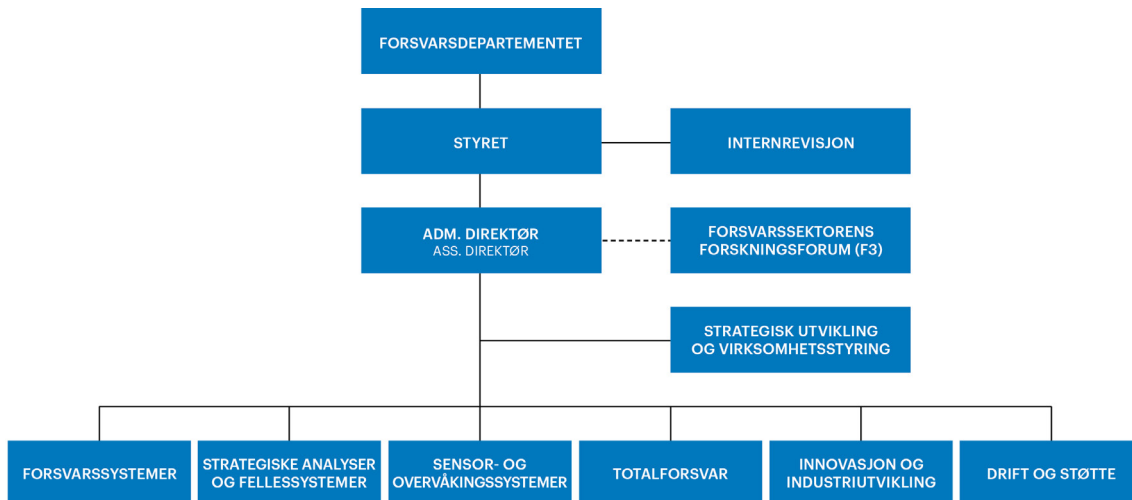
Forsvarets forskningsinstitutt er Forsvarets sentrale forskningsinstitusjon og har som formål å drive forskning og utvikling for Forsvarets behov. Videre er FFI rådgiver overfor Forsvarets strategiske ledelse. Spesielt skal instituttet følge opp trekk ved vitenskapelig og militærteknisk utvikling som kan påvirke forutsetningene for sikkerhetspolitikken eller forsvarsplanleggingen.

FFIs visjon

FFI gjør kunnskap og ideer til et effektivt forsvar.

FFIs verdier

Skapende, drivende, vidsynt og ansvarlig.



Forsvarets forskningsinstitutt (FFI)
Postboks 25
2027 Kjeller

Besøksadresse:
Kjeller: Instituttveien 20, Kjeller
Horten: Nedre vei 16, Karljohansvern, Horten

Telefon: 91 50 30 03
E-post: post@ffi.no
ffi.no

Norwegian Defence Research Establishment (FFI)
PO box 25
NO-2027 Kjeller
NORWAY

Visitor address:
Kjeller: Instituttveien 20, Kjeller
Horten: Nedre vei 16, Karljohansvern, Horten

Telephone: +47 91 50 30 03
E-mail: post@ffi.no
ffi.no/en