



**Narodowe Centrum
Badań Jądrowych**
Świerk

Metoda wyznaczania zmian koncentracji nuklidów promieniotwórczych w czasie

(a.k.a. Program do Rozpadów Liczenia)

Tomasz Machtyl

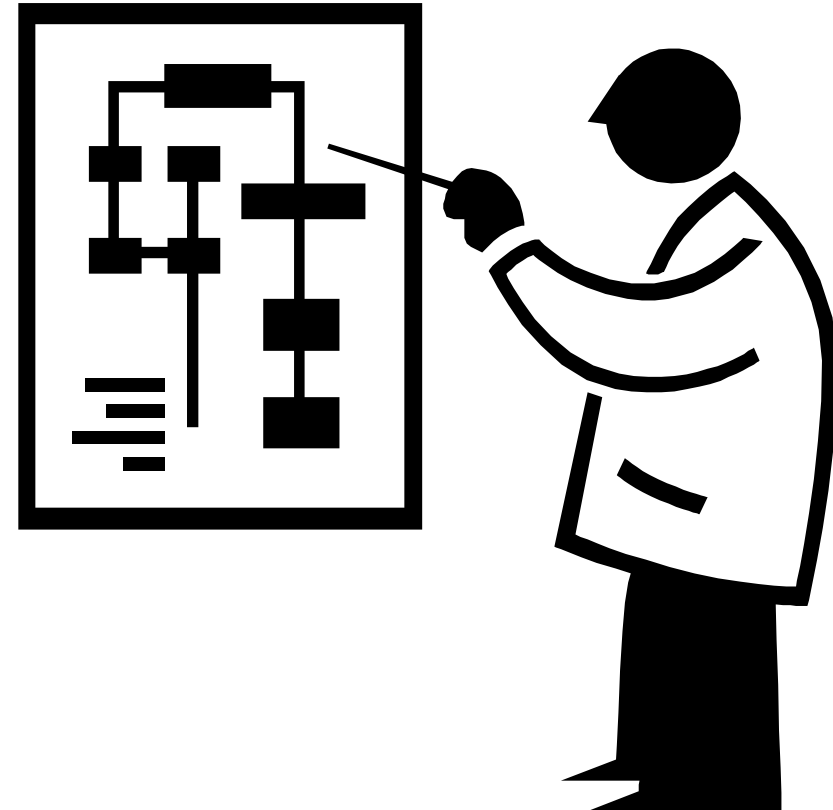
Seminarium

Zakładu UZ3

2 lutego 2016 r.

Plan prezentacji

1. Powiązane artykuły
2. Podstawy
3. Łącuchy
4. Łącuchy rozgałęzione
5. Łącuchy ST
6. Biblioteka
7. Świat wg ENDF
8. Świat wg ENDF (ZZLB)
9. Co dalej?



Artykuły



Artykuły o zbliżonej tematyce:

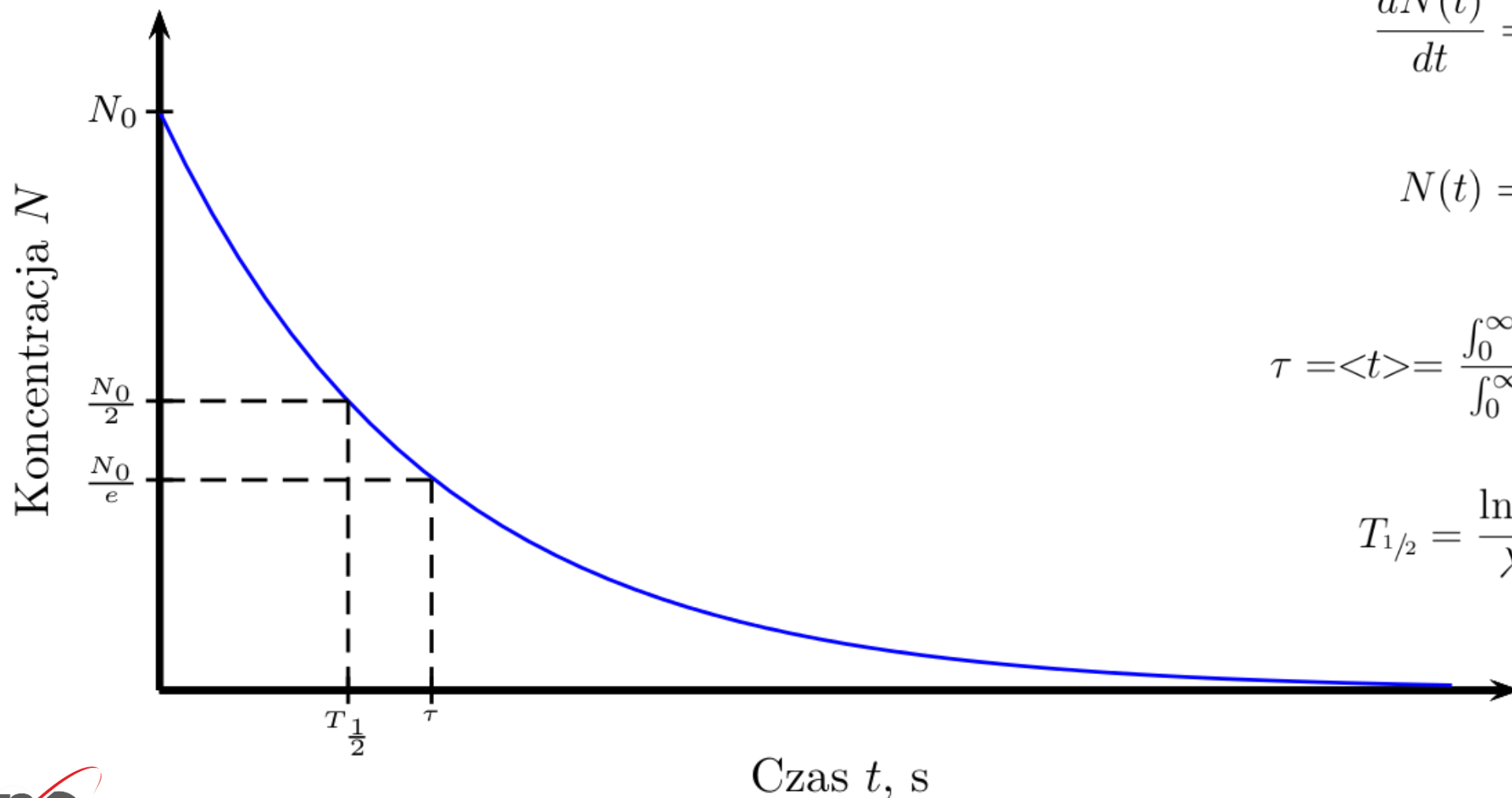
- Bateman H., *The solution of a system of differential equations occurring in the theory of radio-active transformations*, Acta Mathematica, 1910.
- Yuan D., Kernan W., *Explicit solutions for exit-only radioactive decay chains*, Journal Of Applied Physics, 2007.
- Cetnar J., *General solution of Bateman equations for nuclear transmutations*, Annals of Nuclear Energy, 2006.



Podstawy



Prawo rozpadu naturalnego



$$\frac{dN(t)}{dt} = -\lambda N(t)$$

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

$$\tau = \langle t \rangle = \frac{\int_0^\infty t N_0 e^{-\lambda t} dt}{\int_0^\infty N_0 e^{-\lambda t} dt} = \frac{1}{\lambda}$$

$$T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda} = \tau \ln 2$$



Łańcuchy



Zmiany koncentracji nuklidów

$$\frac{dN_0}{dt} = -\lambda_0 N_0$$

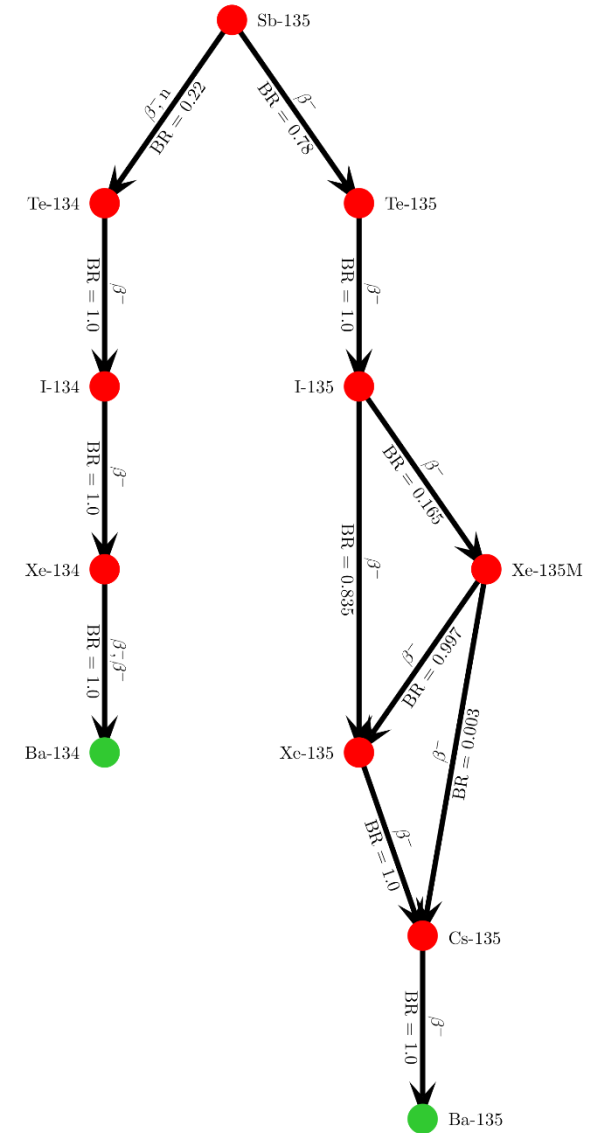
$$N_0 = C_0 \cdot e^{-\lambda_0 \cdot t}$$

$$C_0 = N_{0,0}$$

$$\frac{dN_1}{dt} = \lambda_0 N_0 - \lambda_1 N_1$$

$$N_1 = C_0 \frac{\lambda_0}{\lambda_1 - \lambda_0} e^{-\lambda_0 t} + C_1 e^{-\lambda_1 t}$$

$$C_1 = N_{1,0} - C_0 \frac{\lambda_0}{\lambda_1 - \lambda_0}$$



Zmiany koncentracji nuklidów

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

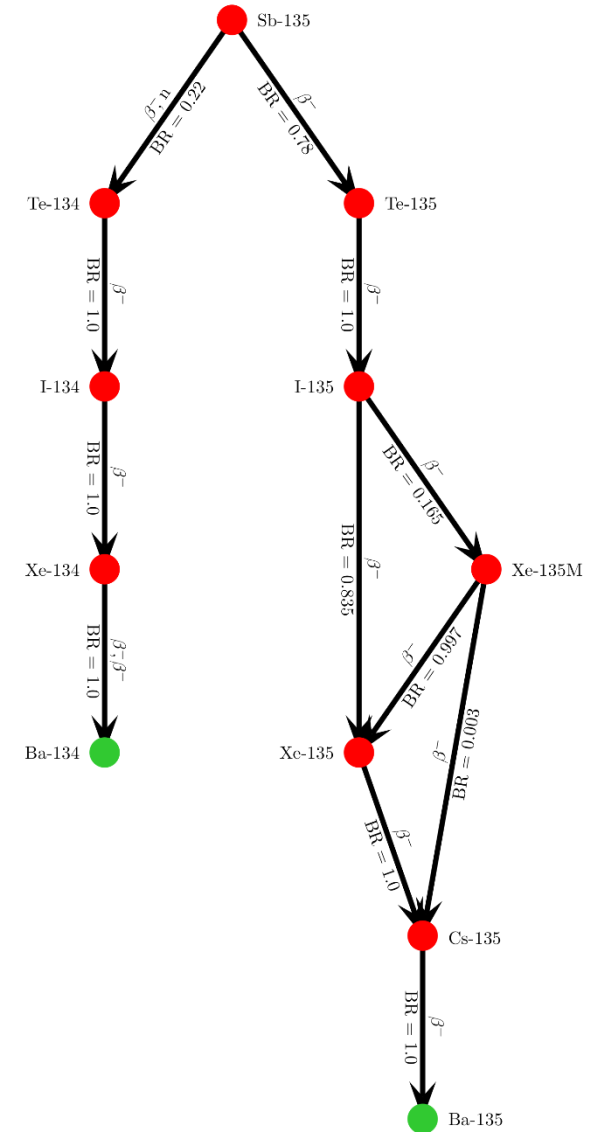
$$N_2 = C_0 \frac{\lambda_0}{\lambda_1 - \lambda_0} \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_0} e^{-\lambda_0 t} + C_1 \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} e^{-\lambda_1 t} + C_2 e^{-\lambda_2 t}$$

$$C_2 = N_{2,0} - C_0 \frac{\lambda_0}{\lambda_1 - \lambda_0} \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_0} - C_1 \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1}$$

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

$$N_3 = C_0 \frac{\lambda_0}{\lambda_1 - \lambda_0} \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_0} \frac{\lambda_2}{\lambda_3 - \lambda_0} e^{-\lambda_0 t} + C_1 \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} \frac{\lambda_2}{\lambda_3 - \lambda_1} e^{-\lambda_1 t} + C_2 \frac{\lambda_2}{\lambda_3 - \lambda_2} e^{-\lambda_2 t} + C_3 e^{-\lambda_3 t}$$

$$C_3 = N_{3,0} - C_0 \frac{\lambda_0}{\lambda_1 - \lambda_0} \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_0} \frac{\lambda_2}{\lambda_3 - \lambda_0} - C_1 \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} \frac{\lambda_2}{\lambda_3 - \lambda_1} - C_2 \frac{\lambda_2}{\lambda_3 - \lambda_2}$$



$$N_0 \xrightarrow{BR_{01}, \lambda_0} N_1 \xrightarrow{BR_{12}, \lambda_1} N_2 \xrightarrow{BR_{23}, \lambda_2} N_3 \xrightarrow{BR_{34}, \lambda_3} N_4 \xrightarrow{BR_{45}, \lambda_4} N_5 \xrightarrow{BR_{56}, \lambda_5} \dots$$

DC consts

$$\begin{aligned}
 & C_0 \left[\frac{BR_{01}\lambda_0}{\lambda_1 - \lambda_0} \times \frac{BR_{12}\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_0} \times \frac{BR_{23}\lambda_2}{\lambda_3 - \lambda_0} \times \frac{BR_{34}\lambda_3}{\lambda_4 - \lambda_0} \times \frac{BR_{45}\lambda_4}{\lambda_5 - \lambda_0} \right] \times e^{-\lambda_0 t} \\
 & C_1 \left[\frac{BR_{12}\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} \times \frac{BR_{23}\lambda_2}{\lambda_3 - \lambda_1} \times \frac{BR_{34}\lambda_3}{\lambda_4 - \lambda_1} \times \frac{BR_{45}\lambda_4}{\lambda_5 - \lambda_1} \right] \times e^{-\lambda_1 t} \\
 & C_2 \left[\frac{BR_{23}\lambda_2}{\lambda_3 - \lambda_2} \times \frac{BR_{34}\lambda_3}{\lambda_4 - \lambda_2} \times \frac{BR_{45}\lambda_4}{\lambda_5 - \lambda_2} \right] \times e^{-\lambda_2 t} \\
 & C_3 \left[\frac{BR_{34}\lambda_3}{\lambda_4 - \lambda_3} \times \frac{BR_{45}\lambda_4}{\lambda_5 - \lambda_3} \right] \times e^{-\lambda_3 t} \\
 & C_4 \left[\frac{BR_{45}\lambda_4}{\lambda_5 - \lambda_4} \right] \times e^{-\lambda_4 t} \\
 & C_5 e^{-\lambda_5 t}
 \end{aligned}$$

+

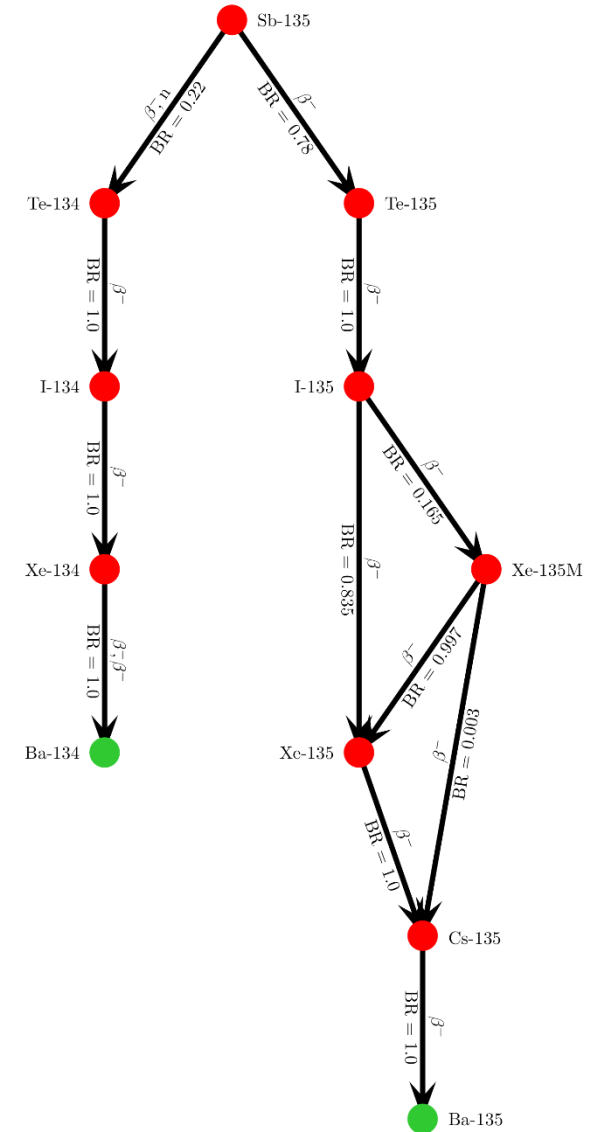
N_5



Zmiany koncentracji nuklidów

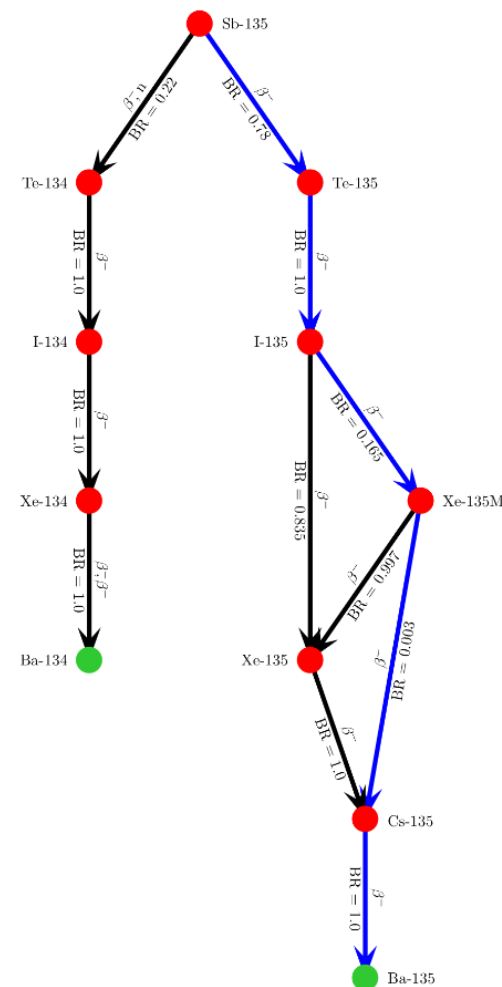
$$N_n = \sum_{i=0}^{n-1} C_i e^{-\lambda_i t} \prod_{j=i}^{n-1} \frac{BR_{j \rightarrow j+1} \lambda_j}{\lambda_{j+1} - \lambda_i} + C_n e^{-\lambda_n t}$$

$$C_n = N_{n_0} - \sum_{i=0}^{n-1} C_i \prod_{j=i}^{n-1} \frac{BR_{j \rightarrow j+1} \lambda_j}{\lambda_{j+1} - \lambda_i}$$



łańcuchy rozgałęzienie





Koncentracje nuklidów w łańcuchach rozgałęzionych

$$N_n = \sum_{\text{precursors}} C_i e^{-\lambda_i t} \sum_{\text{paths}} \prod_{j=i}^{n-1} \frac{BR_{j \rightarrow j+1} \lambda_j}{\lambda_{j+1} - \lambda_i} + C_n e^{-\lambda_n t}$$

$$C_n = N_{n,0} - \sum_{\text{precursors}} C_i \sum_{\text{paths}} \prod_{j=i}^{n-1} \frac{BR_{j \rightarrow j+1} \lambda_j}{\lambda_{j+1} - \lambda_i}$$



łańcuchy z nuklidami o takich samych stałych rozpadu



$$N_0 \xrightarrow{BR_{01}, \lambda_0} N_1 \xrightarrow{BR_{12}, \lambda_1} N_2 \xrightarrow{BR_{23}, \lambda_2} N_3 \xrightarrow{BR_{34}, \lambda_3} N_4 \xrightarrow{BR_{45}, \lambda_4} N_5 \xrightarrow{BR_{56}, \lambda_5} \dots$$

$$C_0 \frac{BR_{01}\lambda_0}{\lambda_1 - \lambda_0} \times \frac{BR_{12}\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_0} \times \frac{BR_{23}\lambda_2}{\lambda_3 - \lambda_0} \times \frac{BR_{34}\lambda_3}{\lambda_4 - \lambda_0} \times \frac{BR_{45}\lambda_4}{\lambda_5 - \lambda_0} \times e^{-\lambda_0 t}$$

$$C_1 \frac{BR_{12}\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} \times \frac{BR_{23}\lambda_2}{\lambda_3 - \lambda_1} \times \frac{BR_{34}\lambda_3}{\lambda_4 - \lambda_1} \times \frac{BR_{45}\lambda_4}{\lambda_5 - \lambda_1} \times e^{-\lambda_1 t}$$

$$C_2 \frac{BR_{23}\lambda_2}{\lambda_3 - \lambda_2} \times \frac{BR_{34}\lambda_3}{\lambda_4 - \lambda_2} \times \frac{BR_{45}\lambda_4}{\lambda_5 - \lambda_2} \times e^{-\lambda_2 t}$$

$$C_3 \frac{BR_{34}\lambda_3}{\lambda_4 - \lambda_3} \times \frac{BR_{45}\lambda_4}{\lambda_5 - \lambda_3} \times e^{-\lambda_3 t}$$

$$C_4 \frac{BR_{45}\lambda_4}{\lambda_5 - \lambda_4} \times e^{-\lambda_4 t}$$

$$C_5 e^{-\lambda_5 t}$$

Dla $\lambda_1 = \lambda_3$:

$$\frac{BR_{23}\lambda_2}{\lambda_3 - \lambda_1} = \frac{BR_{23}\lambda_2}{0}$$

+

N_5



$$A \int e^{bt} dt = A \frac{1}{b} e^{bt} + c$$



$$A \int \frac{1}{a!} t^a e^{bt} dt = A \left[\sum_{k=0}^a \frac{1}{(a-k)!} t^{a-k} \cdot (-1)^k \left(\frac{1}{b} \right)^{(k+1)} \right] e^{bt} + c$$

$$A \int \frac{1}{a!} t^a dt = A \frac{1}{(a+1)!} t^{a+1} + c$$



Wyrażenie ogólne

$$N_n = \sum_{\text{precursors}} C_i e^{-\lambda_i t} \sum_{\text{paths}} f(t, \mathbf{path}) + C_n e^{-\lambda_n t}$$

$$C_n = N_{n_0} - \sum_{\text{precursors}} C_i \sum_{\text{paths}} f(t=0, \mathbf{path})$$

$$f(t, \mathbf{path}) = A_n \frac{1}{n!} t^n - A_{(n-1)} \frac{1}{(n-1)!} t^{n-1} + A_{(n-1)} \frac{1}{(n-2)!} t^{n-2} - \dots$$



Biblioteka



Informacje ogólne

Biblioteki zewnętrzne:

- networkx
- glob
- math (log)
- numpy (multiply)
- decimal (Decimal)
- mpi4py
- sys
- pandas
- matplotlib.pyplot

Podstawowe funkcje:

- Tworzenie łańcuchów (grafów)
- Obsługa bazy danych ENDF
- Wyznaczanie koncentracji
- Wyznaczanie aktywności i mocy cieplnej
- Analiza wyników



Wyznaczanie aktywności i mocy cieplnej

$$A(t) = \left| \frac{dN(t)}{dt} \right| = \left| \frac{dN_0 e^{-\lambda t}}{dt} \right| = \lambda N_0 e^{-\lambda t} = \lambda N(t)$$

$$P(t) = \frac{\sum_{\text{Decay_modes}} BR \cdot Q_{decay}}{\sum_{\text{Decay_modes}} BR} \cdot A(t) = A(t) \cdot \sum_{\text{Decay_modes}} BR \cdot Q_{decay}$$



Algorytm obliczeń

decay_chain_maker

- Utworzenie grafu reprezentującego łańcuch rozpadów.

DC_consts

- określenie dla każdego nuklidu zależności pomiędzy nim a jego poprzednikami.

C_consts

- określenie warunków brzegowych ($t = 0$, $N = N_0$).

calculate_N

- wyznaczenie koncentracji nuklidów w chwili/chwilach t .

Wyznaczanie wartości pochodnych i analiza wyników

- wyznaczenie aktywności, mocy cieplnej, tworzenie wykresów.



Świat wg ENDF B-VII.0 i ENDF B-VII.1

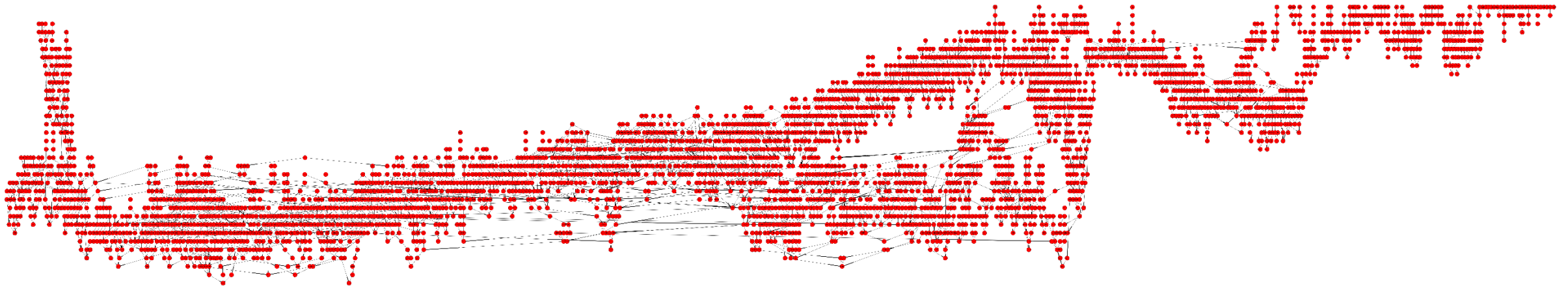


ENDF – Evaluated Nuclear Data File

	ENDF-B-VII.0	ENDF-B-VII.1
Liczba nuklidów w bazie	3838	3821
Liczba brakujących nuklidów	9	7
Liczba „początkowych” nuklidów	1141	1119
Liczba „końcowych” nuklidów	$280 - 9 = 271$	$271 - 7 = 264$
Liczba niezależnych łańcuchów rozpadu	49	34
Liczba nuklidów to takich samych $T_{1/2}$	18/19	15/16



Graf – ENDF-B-VII.0



Graf – ENDF-B-VII.1



Brakujące nuklidy:

ENDF-B-VII.0
Mt-274 → Bh-270
Hs-273 → Sg-269
Rg-281 → Mt-277
Hs-271 → Sg-267
Rg-282 → Mt-278
Rg-273 → Mt-269
Bh-274 → Db-270
Mt-273 → Bh-269
Mt-272 → Bh-268

ENDF-B-VII.1
Ni-48 → Co-48
Cf-256 → Cm-252
Rf-253 → No-249
Ds-279M → Hs-275
Es-240 → Bk-236
Es-258 → Cf-258
Cf-239 → Bk-239
Es-243 → Bk-239



Nuklidy o tych samych $T_{1/2}$:

ENDF-B-VII.0	ENDF-B-VII.1
Ar-49 (Cl-49)	
Ar-51 (Cl-51)	
	Cl-29 (Ar-30)
Cl-48 (S-48, S-49)	
Co-51 (Ni-51)	
Es-258 (Md-262)	
Ho-159M (Os-171)	
I-142 (Te-142)	
In-122 (Ag-122M)	
Lr-260 (Db-264)	
Lu-154 (Hf-154)	

ENDF-B-VII.0	ENDF-B-VII.1
Mg-38 (Mg-39)	
	Os-179 (Pt-183)
	Pm-136 (Sm-136)
	Re-168 (Ir-172)
	S-48 (S-49)
	Sg-269 (Hs-273)
Sg-272 (Hs-276)	
	Ta-188 (Hf-188)
	Tm-149 (Lu-153)
	Yb-151 (Yb-151M)

nuklid (poprzednik/poprzednicy)



Niezależne łańcuchy rozpadu

ENDF-B-VII.0:

- Liczba : 49
- Liczba nuklidów w łańcuchach:

3 102	22	3×4
415	15	7×3
70	2×9	8×2
46	8	14×1
28	3×6	
27	3×5	

ENDF-B-VII.1:

- Liczba : 34
- Liczba nuklidów w łańcuchach:

3 100	27	2×5
427	19	3×3
87	10	5×2
51	3×9	12×1
33	6	



Liczba krawędzi do przejścia pomiędzy nuklidami

	ENDF-B-VII.0	ENDF-B-VII.1
Całkowita długość	1 319 678	2 356 503
Maksymalna liczba ścieżek łączących dwa nuklidy	276 (Db-255, Pb-207)	1 108 (Ds-267, Pb-207)
Maksymalna długość ścieżek pomiędzy dwoma nuklidami	5136 (Db-255, Pb-207)	24 932 (Ds-267, Pb-207)



Liczba krawędzi do przejścia pomiędzy nuklidami a ich poprzednikami (Top 10)

ENDF-B-VII.0:

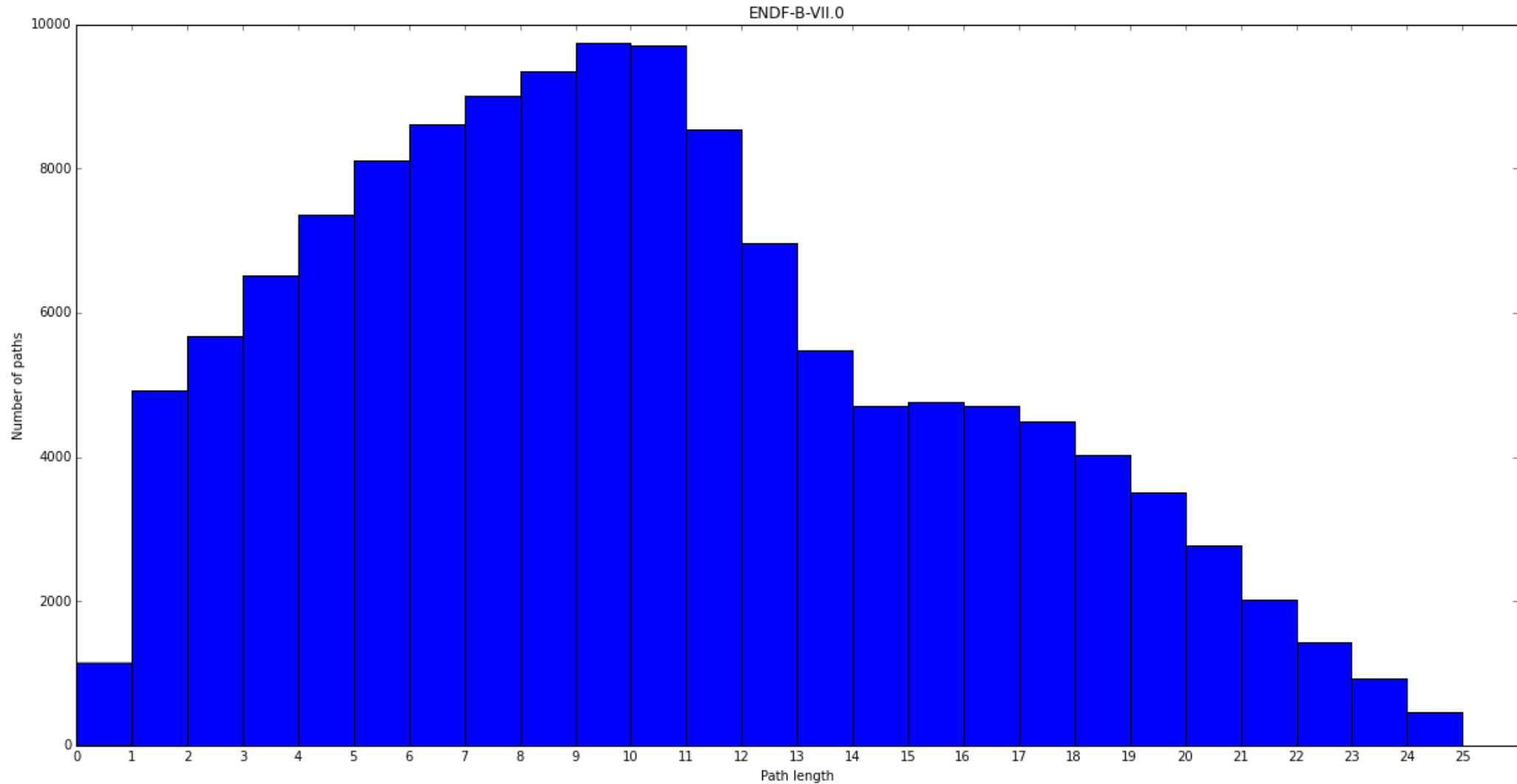
Nuklid	Dł. ścieżek do przejścia
Pb-207	82 951
Pb-206	64 574
Tl-206	40 308
Po-211	38 909
Tl-207	38 776
Bi-209	38 577
Bi-211	36 446
Pb-209	35 955
Pb-211	33 975
Po-215	31 673

ENDF-B-VII.1:

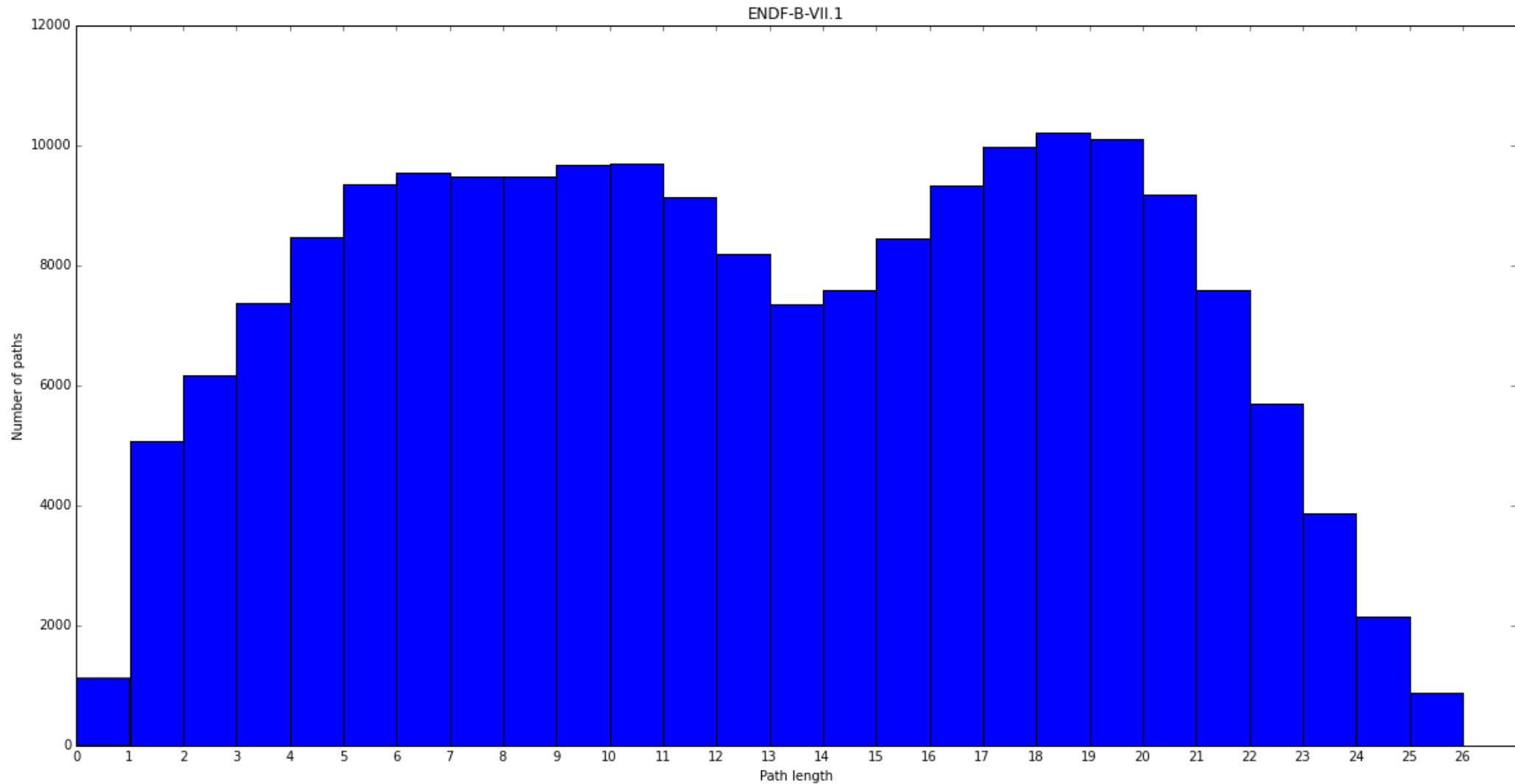
Nuklid	Dł. ścieżek do przejścia
Pb-207	337 453
Po-211	159 822
Tl-207	159 689
Bi-211	150 869
Pb-206	107 265
At-215	71 070
Pb-211	70 982
Tl-206	67 502
Po-215	66 582
Tl-205	51 004



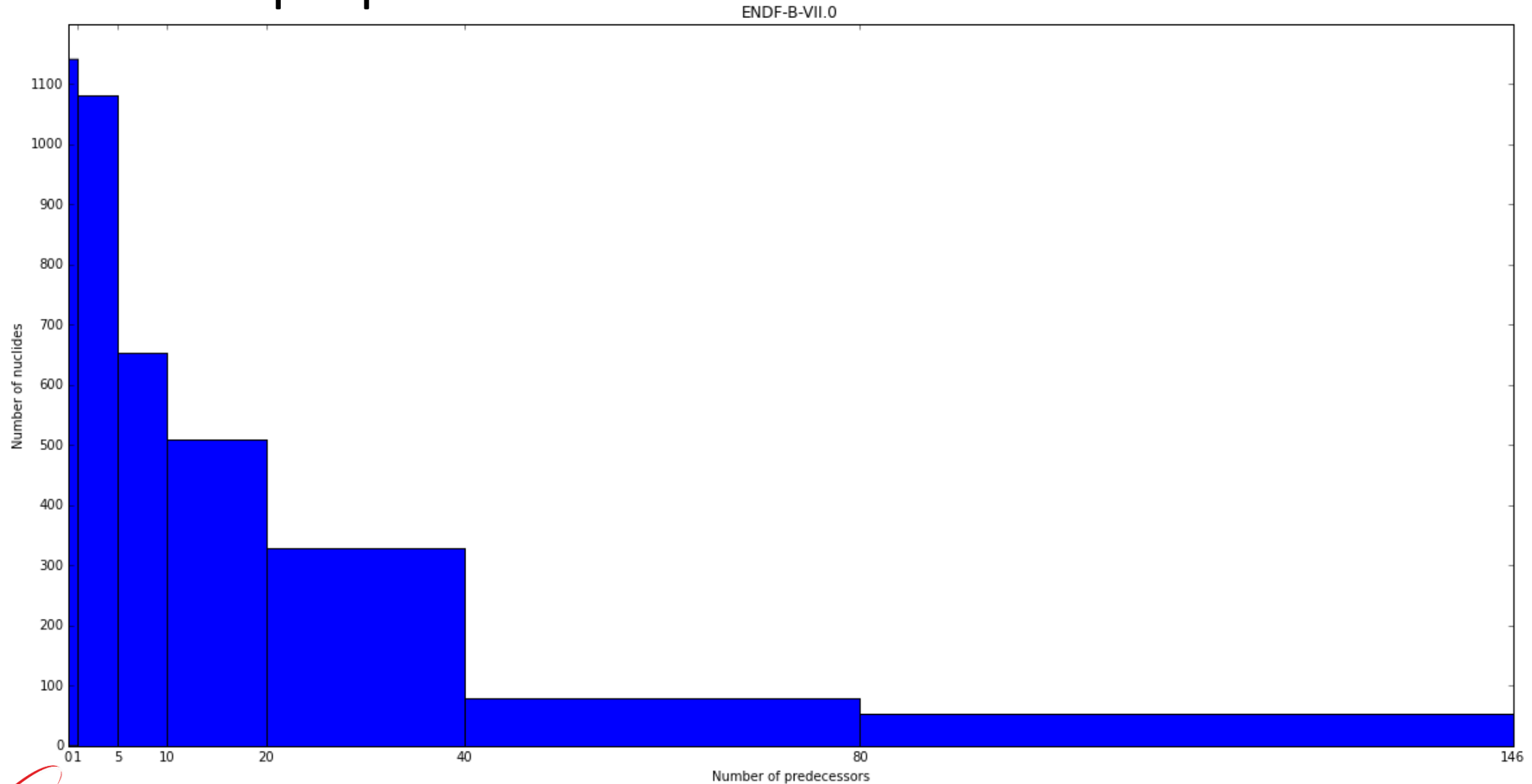
Długości ścieżek - ENDF-B-VII.0



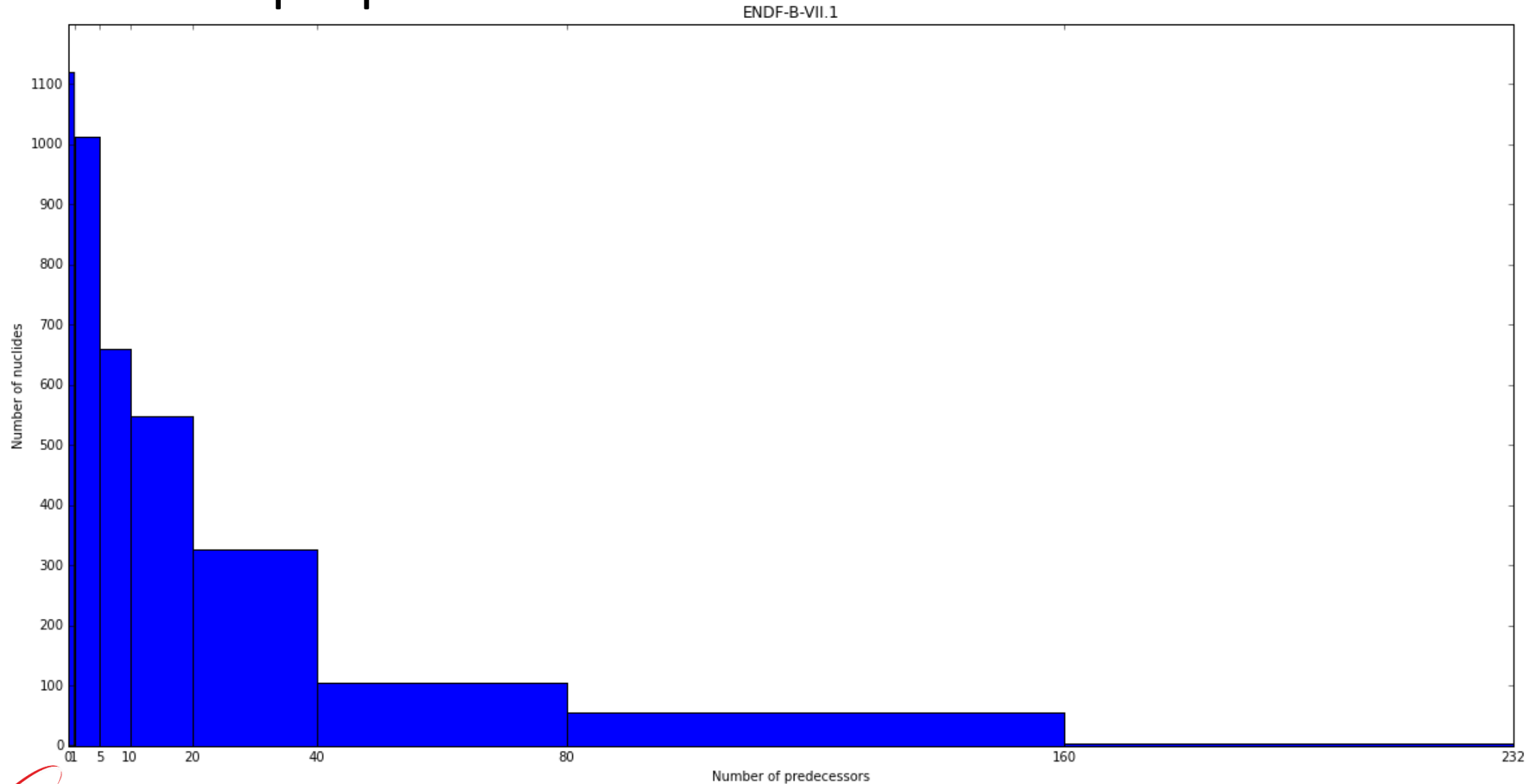
Długości ścieżek - ENDF-B-VII.1



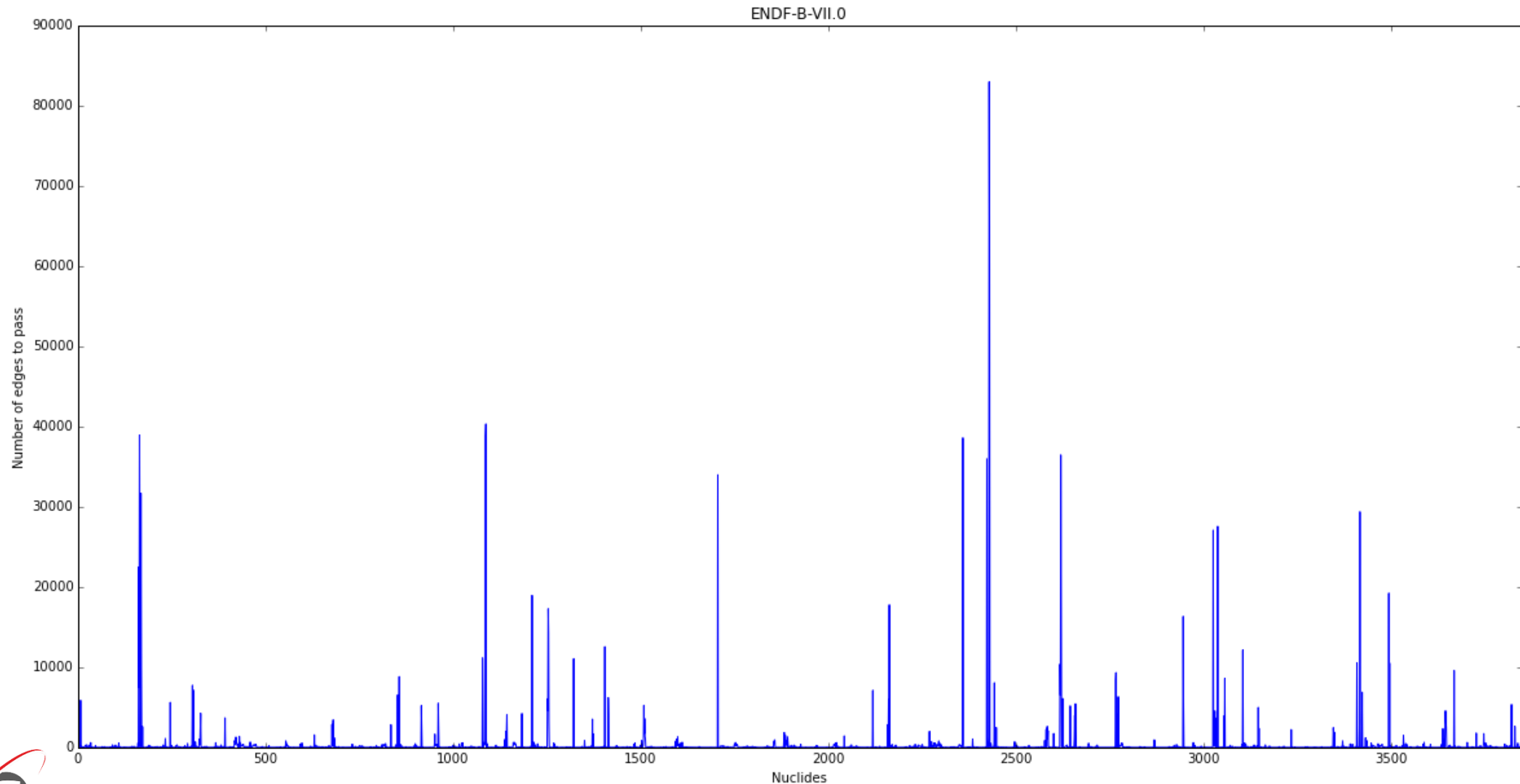
Liczba poprzedników - ENDF-B-VII.0



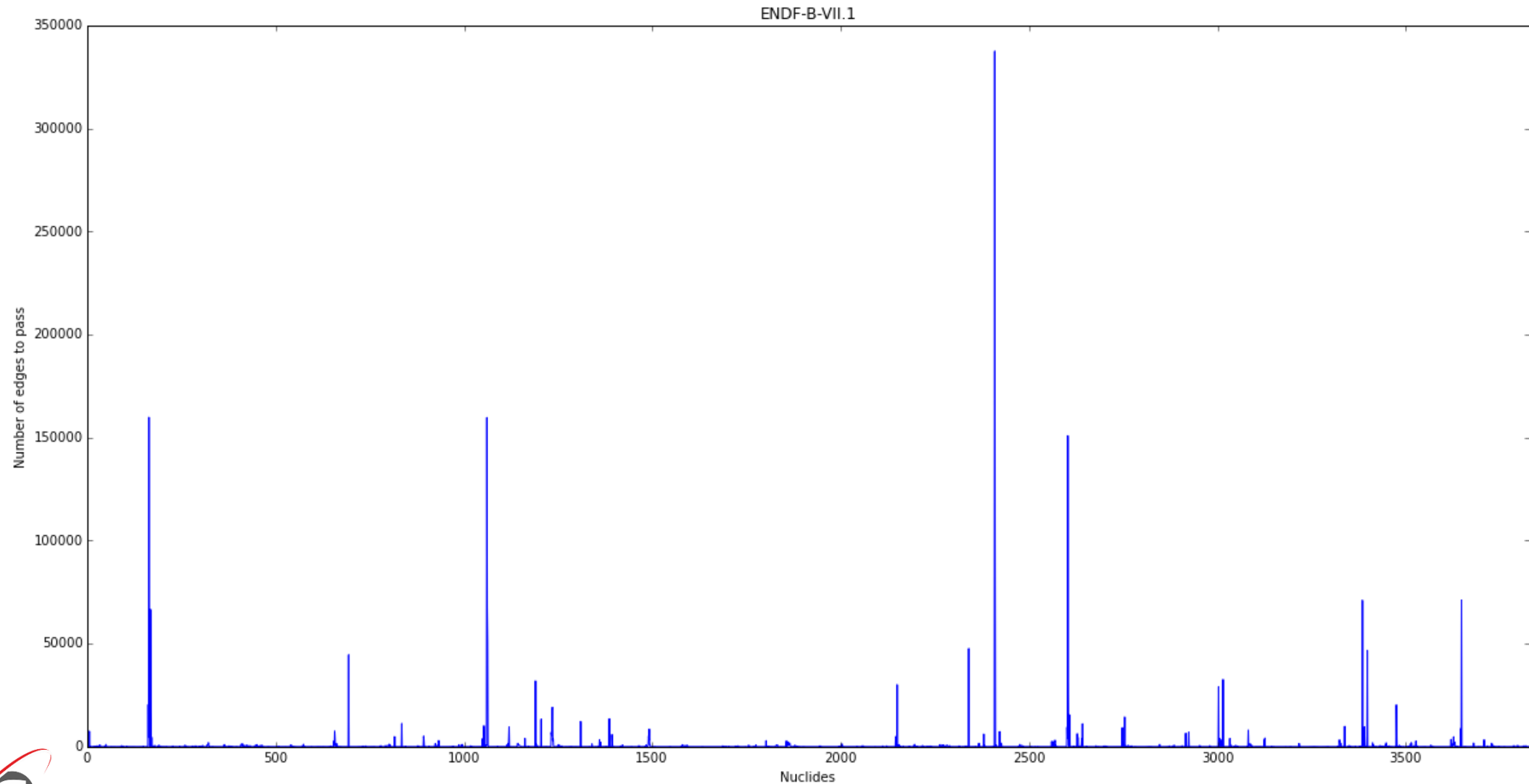
Liczba poprzedników - ENDF-B-VII.1



Liczba krawędzi do przejścia - ENDF-B-VII.0



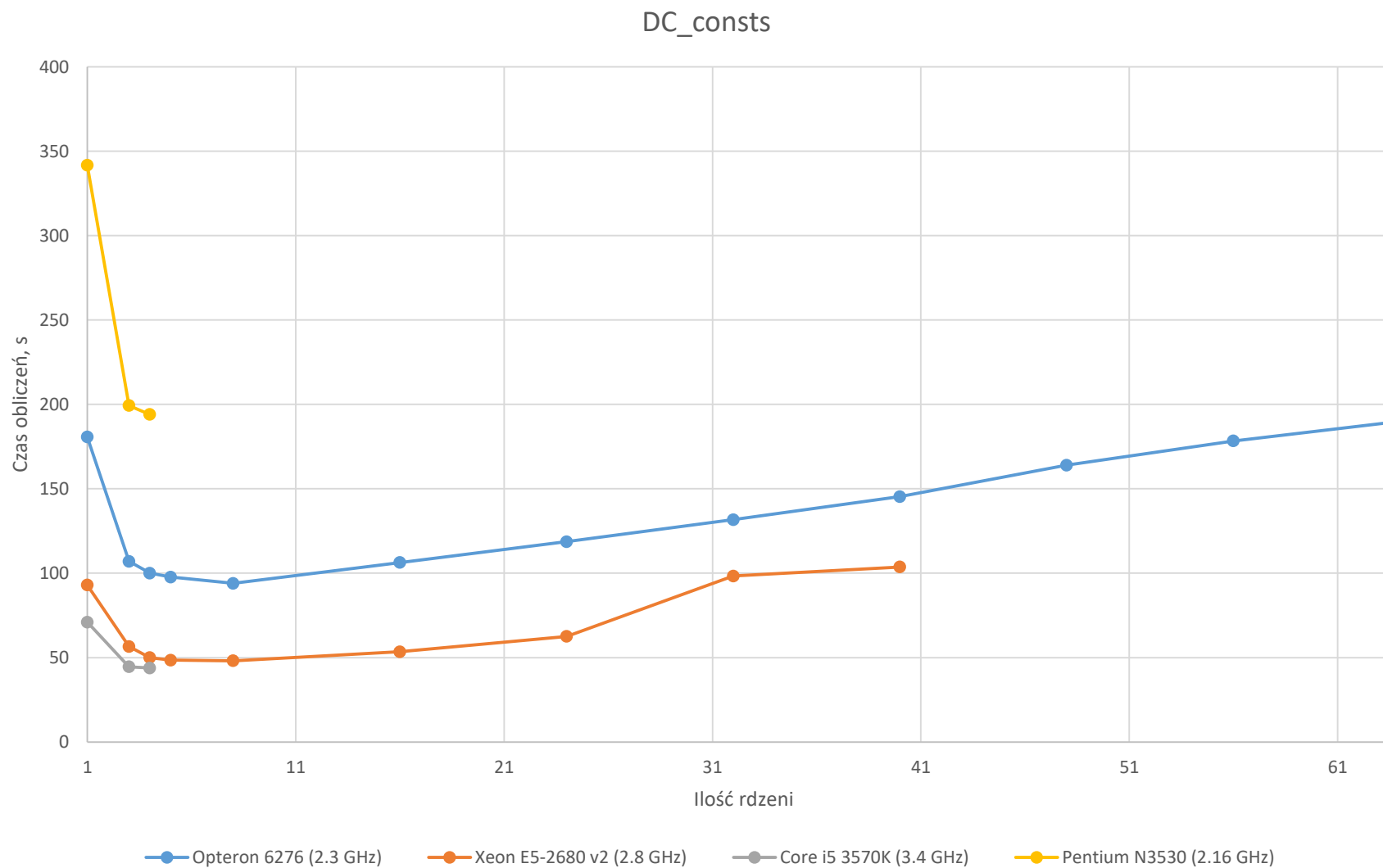
Liczba krawędzi do przejścia - ENDF-B-VII.1



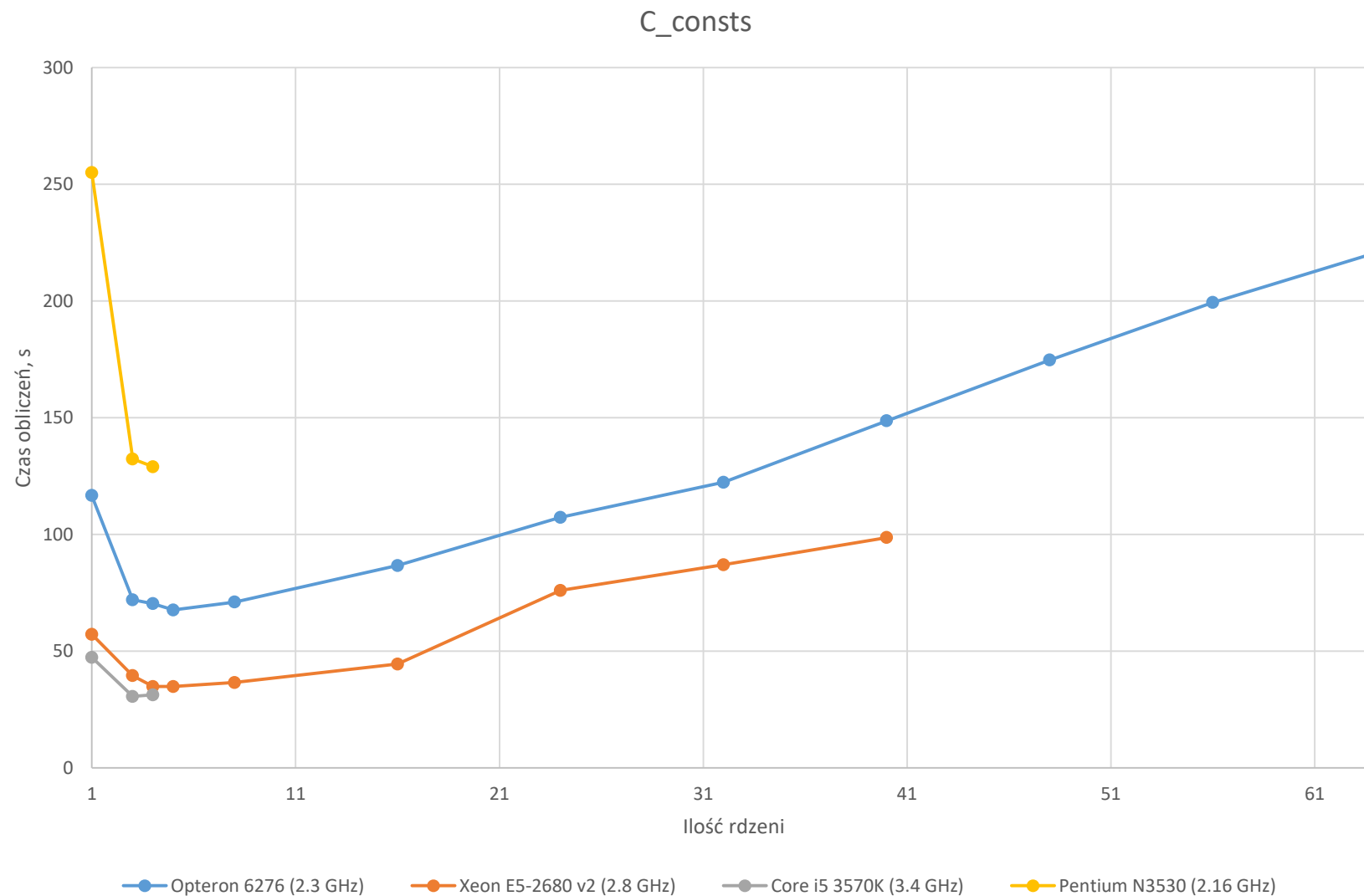
Czas obliczeń



Funkcja DC_consts – czas obliczeń



Funkcja C_consts – czas obliczeń



Świat wg ENDF B-VII.0 i ENDF B-VII.1

(prawie spełniający Zasadę Zachowania Liczby Barionowej)



Niespełnienie Zasady Zachowania Liczby Barionowej

(i przy okazji „Zasady” Zachowania Masy)

Jest:

$$\sum N_i = \text{const.}$$

a powinno być :

$$\sum N_i A_i = \text{const.}$$

- Jest to „wada” łańcucha rozpadów a nie metody liczenia.
- Wynika z nieuwzględnienia:
 - rozpadów z emisją n , p i α
 - rozszczepienia spontanicznego

Możliwe rozwiązanie (częściowe):

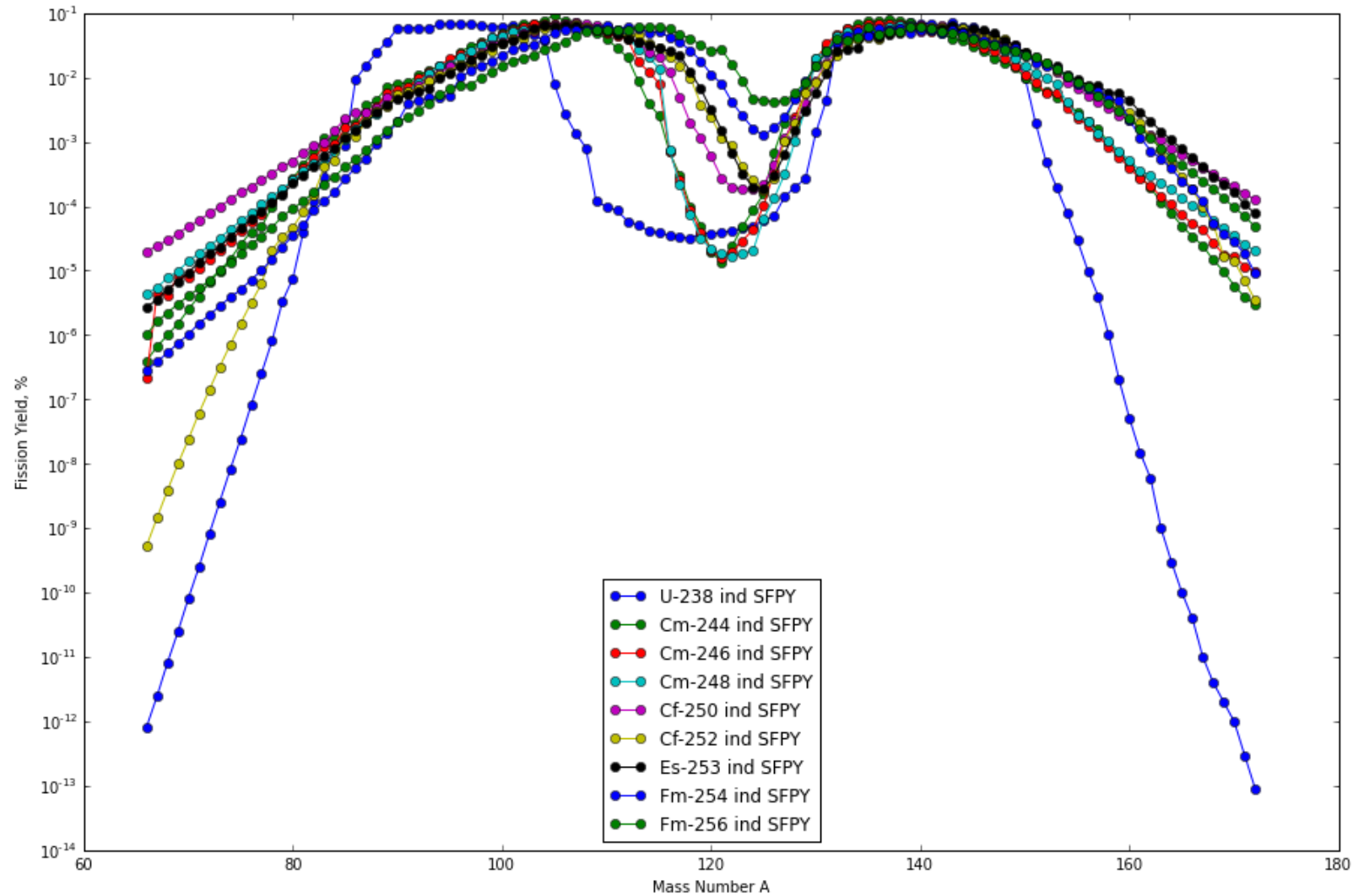
- uwzględnienie emisji n , p i α 😊
- uwzględnienie SF (np. w 9/124)

Konsekwencje:

- skomplikowanie łańcucha
- wielokrotne wydłużenie czasu obliczeń



Spontaneous Fission Product Yields



	ENDF-B-VII.1	+ EP	+ SPFY	+ EP + SPFY
Liczba nuklidów w grafie	3 828		3 990	
Liczba brakujących nuklidów	7		169	
Liczba „początkowych” nuklidów	1 119		887	
Liczba „końcowych” nuklidów	$271 - 7 = 264$		$433 - 169 = 264$	
Liczba niezależnych łańcuchów rozpadu	34	20	30	17
Liczba nuklidów to takich samych $T_{1/2}$	15/16		31/34	
Liczba rozpadów (krawędzi w grafie)	5 203	6 666	16 303	17 766
Całkowita długość	2 356 503	3 527 344	68 097 238	79 111 689
Maksymalna liczba ścieżek łączących dwa nuklidy	1 108 (Ds-267, Pb-207)	2 525 (Ds-267, He-4)	5 428 (Bh-262, Ru-99)	25 955 (Bh-262M, Nn-1)
Maksymalna długość ścieżek pomiędzy dwoma nuklidami	24 932 (Ds-267, Pb-207)	49 124 (Ds-267, He-4)	88 546 (Mt-266M, Ru-99)	326 491 (Mt-266M, H-1)



Czasy obliczeń

- Xeon E5-2680 v2 (2.8-3.6 GHz), 1 rdzeń

	ENDF-B-VII.1	+ EP	+ SPFY	+ EP + SPFY
Wielkość grafu	3 829	3 829	3 991	3 991
Liczba krawędzi	5 203	6 666	16 303	17 766
Całkowita. dł. ścieżek	2 356 503	3 527 344	68 097 238	79 111 689
Tworzenie grafu	20.3 s	25.8s	24.6s	24.3s
DC_consts	2m / 10s *	5m 5s / 13.4s *	1h 21m 46s / 1m 51s *	2h 0m 12s / 2m 3s *
C_consts	1m 13s / 2.34s *	3m 21s / 2.53s *	55m 58s / 11.1s *	1h 20m 2s / 11.7s *
calculate_N	5.6s	6.4s	25s	27.5s

* PRL_MPI/fastPRL



Czasy obliczeń

- Xeon E5-2680 v2 (2.8-3.6 GHz), 1 rdzeń

	ENDF-B-VII.1	+ EP	+ SPFY	+ EP + SPFY
Wielkość grafu	3 829	3 829	3 991	3 991
Liczba krawędzi	5 203	6 666	16 303	17 766
Całkowita. dł. ścieżek	2 356 503	3 527 344	68 097 238	79 111 689
Tworzenie grafu	20.3 s	25.8s	24.6s	24.3s
DC_consts			41m 5s / 1m 57s *	53m 57s / 2m 6s *
C_consts			10m 54s / 11.2s *	25m 57s / 11.4s *
calculate_N			37.5s	38s

* PRL_MPI/fastPRL



Co dalej?

- Optymalizacja!!!
- Dodanie możliwości wyznaczania rozkładów widmowych promieniowania gamma.
- Rozbudowa metody o aktywację nuklidów strumieniem neutronów
 - Zero wymiarowy, jedno lub wielogrupowy (ze względu na energię) model transmutacji z uwzględnieniem rozszczepienia indukowanego neutronami
 - Uwzględnienie *Neutron-Induced Fission Product Yields* dla 31 nuklidów z bazy ENDF.
 - Uwzględnienie innych reakcji wywołanych neutronami (dla 423 nuklidów z bazy ENDF) lub innymi cząstkami (p, g)



Wzory na koncentracje nuklidów

(nieuwzględniające identycznych λ)

$$\frac{dN_n}{dt} = \left(\sum_m \sum_F \sum_E \sigma_m^{FE} \phi^{FE} N_m + \sum_p BR_{p \rightarrow n} \lambda_p N_p \right) - \left(\sum_F \sum_E \sigma_n^{FE} \phi^{FE} + \lambda_n N_n \right)$$

$$N_n = \sum_{\text{precursors}} C_i e^{-(\lambda_i + \sum_k \sigma_i^k \phi^k)t} \sum_{\text{paths}} \prod_{j=i}^{n-1} \frac{(BR_{j \rightarrow j+1} \lambda_j) \vee (\sigma_j \phi)}{(\lambda_{j+1} + \sum_k \sigma_{j+1}^k \phi^k) - (\lambda_i + \sum_k \sigma_i^k \phi^k)} + C_n e^{-(\lambda_n + \sum_k \sigma_n^k \phi^k)t},$$

$$C_n = N_{n,0} - \sum_{\text{precursors}} C_i \sum_{\text{paths}} \prod_{j=i}^{n-1} \frac{(BR_{j \rightarrow j+1} \lambda_j) \vee (\sigma_j \phi)}{(\lambda_{j+1} + \sum_k \sigma_{j+1}^k \phi^k) - (\lambda_i + \sum_k \sigma_i^k \phi^k)},$$



Wyrażenie ogólne na koncentracje nuklidów

$$N_n = \sum_{\text{precursors}} C_i e^{-(\lambda_i + \sum_k \sigma_i^k \phi^k)t} \sum_{\text{paths}} f(t, \mathbf{path}) + C_n e^{-(\lambda_n + \sum_k \sigma_n^k \phi^k)t},$$

$$C_n = N_{n_0} - \sum_{\text{precursors}} C_i \sum_{\text{paths}} f(t=0, \mathbf{path}),$$

$$f(t, \mathbf{path}) = A_n \frac{1}{n!} t^n - A_{(n-1)} \frac{1}{(n-1)!} t^{n-1} + A_{(n-2)} \frac{1}{(n-2)!} t^{n-2} - \dots$$



Dziękuję za uwagę.

