Simulación numérica de la serie del actínido en GNU Octave con ecuaciones diferenciales estocásticas

J. Arias[†] and F. Serrano^{*}

[†]Escuela de Física, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de Honduras. jmarias@unah.hn

*Instituto de Investigación en Energía, Universidad Nacional Autónoma de Honduras.

6 de septiembre de 2024

Resumen

Los elementos conocidos en la naturaleza muestran variaciones en su estructura nuclear. De especial interés son los radioisótopos; estos son átomos de un elemento que difieren del resto de su especie por el número de neutrones en su núcleo o por el nivel energético del mismo y que se desintegran hasta obtener una estructura estable. El uranio-235 es un radioisótopo natural. Su desintegración se suscita mediante una reacción en cadena en la que cada producto de fisión es inestable y se descompone en otro elemento en su debido turno. El modelo matemático que describe la reacción en cadena del U-235, también llamada serie del actínido, es las ecuaciones de Bateman. Para que la reacción en cadena tome lugar se requiere una masa mínima de material fisionable conocida como masa crítica. En cada proceso de desintegración se libera una cantidad de energía que puede transformarse en electricidad. Utilizamos GNU Octave para simular la serie del actínido mediante los métodos de Euler-Maruyama, Runge-Kutta y Monte Carlo.

Palabras clave: Desintegración en cadena, serie del actínido, ecuaciones de Bateman, simulación numérica

Objetivos

Objetivo general:

• Simular numéricamente en GNU Octave la desintegración en cadena del uranio-235.

Objetivos particulares:

- Resolver completamente las ecuaciones de Bateman para la serie del actínido mediante los métodos de Euler-Maruyama, Runge-Kutta y Monte Carlo.
- Obtener una comparación de la eficiencia computacional de los métodos elegidos.

Introducción

1. Reacciones nucleares

Las reacciones nucleares —aquellas en las que participan los núcleos atómicos—, explica [1], pueden tener lugar espontáneamente o inducirse. Estas reacciones son mucho más energéticas que las químicas, pero obedecen a las mismas leyes físicas, continúa [1].

La literatura clasifica las reacciones nucleares en dos grupos principales: reacciones de fisión y reacciones de fusión, como se puede revisar en [2, 3, 4, 1] entre otros.

1.1. Reacciones de Fisión

La fisión nuclear es la ruptura de un núcleo espontáneamente o inducida, de acuerdo con [2], en la cual un núcleo pesado se convierte en un sistema de fragmentos más livianos [1]. Tal ruptura implica una liberación de energía hacia el entorno, razón por la cual se identifica esta reacción como exotérmica [2, 1].

Las sustancias radiactivas requieren de un volumen menor de materia que una fuente de combustibles fósiles para generar una cantidad equivalente de energía, de acuerdo con [5].

La mínima cantidad de materia requerida para sustentar una reacción en cadena para una muestra radiactiva cuyos productos se mantienen inestables se llama *masa crítica*, y su estimación es un problema central en física nuclear aplicada como lo muestra [6].

1.2. Reacciones de Fusión

La fusión nuclear, en palabras de [1] es la combinación de dos o más núcleos atómicos en uno más pesado. Estas reacciones también se manifiestan como exotérmicas, en particular, la energía solar que recibe nuestro planeta es esencialmente producida por este fenómeno, explica [2].

2. Desintegración radiactiva

De acuerdo con [5] y [7], se debe entender el proceso mediante el cual un núcleo atómico se separa en fragmentos más pequeños sin un estímulo externo como un proceso de radiactividad. Bajo este mismo razonamiento se dice que el núcleo atómico es radiactivo y que atraviesa una desintegración o decaimiento radiactivo.

Suele identificarse al núcleo original como núcleo padre [5, 7] y sus productos de desintegración se les identifica como hijos o partículas hijas[7, 5].

La radiactividad se cuantifica en términos de *actividad* y su unidad SI es el becquerel (Bq), [7].

2.1. Leyes de la desintegración nuclear

Siguiendo a [4], las leyes de la desintegración radiactiva son:

- 1. Existe la misma probabilidad de que todos los núcleos de un elemento radiactivo se desintegran.
- 2. La tasa de desintegración espontánea de un elemento radiactivo es proporcional al número de núcleos presentes en ese momento.

Matemáticamente, y en concordancia con [7], se puede escribir un modelo para la ley de desintegración radiactiva como:

$$\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}t} \propto N$$

donde N es el número de átomos presentes en el tiempo t. Dicha proporción se traduce en la siguiente ecuación:

$$\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}t} = -\lambda N\tag{1}$$

donde λ es la constante de decaimiento del elemento y dicta una propiedad intrínseca del material independiente de su condición química o física, explica [5] y [7]. El signo negativo indica que a medida que

el tiempo t aumenta, el número de núcleos N disminuye. La ecuación 1 puede resolverse mediante variable separable, notando que

$$\frac{\mathrm{d}N}{N} = -\lambda \,\mathrm{d}t\,,\tag{2}$$

de integrar esto se obtiene:

$$\ln(\lambda) = -\lambda t + C \tag{3}$$

donde C es una constante de integración y se evalúa por el hecho de que en t=0 el número de átomos del elemento radiactivo es N_0 . Debido a esta condición inicial se establece que

$$C = \ln(N_0)$$

Se sigue que

$$ln\left(\frac{N}{N_0}\right) = -\lambda t,$$

la cual es equivalente a

$$N(t) = N_0 \exp(-\lambda t)$$

La relación de N a t se ha representado gráficamente en la figura 1 en los anexos para ^{24}Na , radioisótopo del sodio que presenta un período de semidesintegración $t_{1/2}=15h$.

2.2. Canales de decaimiento

Siguiendo a [3, 2, 4] los canales de desintegración (o *decaimiento*) son los posibles mecanismos en que una partícula puede fraccionarse, estos se muestran en la figura 2 documentada en anexos.

La desintegración radiactiva se produce a través de la emisión de diferentes tipos de radiaciones corpusculares, explican [4, 7, 5]. Los principales son:

- Radiación alfa (α): la partícula emitida corresponde a un núcleo de helio. La masa del nuevo núcleo disminuye en cuatro unidades, con relación al núcleo inicial.
- Radiación beta (β): la partícula emitida es un electrón o un anti-electrón como consecuencia de la transmutación de un neutrón en protón, o al revés. El número atómico de

masa permanece igual. Un neutrino se lleva la energía complementaria liberada en la transformación.

Radiación gamma (γ): es un tipo de radiación electromagnética que transporta el exceso de energía de un núcleo inestable o metaestable.

Los diversos modos de desintegración de un núcleo radiactivo son catalogados de acuerdo con la emisión del núcleo atómico:

■ Decaimiento Alfa:

En este proceso, el núcleo padre se desintegra para dar un núcleo hijo y una partícula α (${}^{4}He$).

■ Decaimiento Beta:

En este proceso, el núcleo padre se desintegra para dar un núcleo hijo y una partícula β . La desintegración β se subdivide en tres categorías, cuya descripción se sigue de la discusión desarrollada en [3, 4, 8, 9]:

- Emisión de electrones o β⁻: al desintegrarse el núcleo padre una partícula β⁻ y un anti-neutrino son expulsados. El número de masa del núcleo hijo es igual al del padre y el número atómico es mayor que el del padre por una unidad.
- Emisión de anti-electrones o β^+ : al decaer el núcleo padre una partícula β^+ y un neutrino son expulsados. El número de masa del núcleo hijo es el mismo que el del padre y el número atómico es una unidad menor que el del padre.
- Captura de electrones: el núcleo padre captura uno de los electrones orbitales emitiendo un neutrino. El número de masa del núcleo hijo es igual al del padre, pero su número atómico disminuye en una unidad.
- Decaimiento Gamma: las desintegraciones alfa y beta de un núcleo radiactivo pueden dejar al núcleo hijo en un estado excitado. Esta energía excedente puede puede perderse en

forma de radiaciones electromagnéticas, llamadas rayos g. Dichos rayos pueden ser absorbidos por electrones orbitales y dar lugar a una creación de pares electrón-antielectrón.

La constante de decaimiento juega un rol importante en la comprensión de radiactividad. Pues, de acuerdo con [5] y [7] este parámetro da una medida de probabilidad bien definida para la desintegración por unidad de tiempo de un isótopo radiactivo.

El recíproco de la constante de decaimiento, $\tau_{1/2}$, se conoce como período de semidesintegración y se reporta en unidades de tiempo (años, días, horas o segundos) [7].

Cualquiera de esos dos parámetros permite no solo caracterizar una entidad radiactividad, pero también sus modos de desintegración.

2.3. Desintegración en cadena

No es raro el evento en la naturaleza en que un núcleo inestable produce hijos inestables que continúan desintegrándose a su propio ritmo, [7] identifica estos procesos como reacciones en cadena o cadenas de desintegración.

Para [5] una secuencia de procesos de decaimiento define una familia radiactiva, estos son radioisótopos que toman parte en la secuencia o cadena.

Muchas familias de decaimiento son estudiadas y explotadas con diversos fines, ver [10] y [11]. Una de especial interés es la desintegración el uranio-235 llamada también serie del actínido [4].

En estos procesos secuenciales se pueda dar una acumulación de núcleos en donde la tasa de decaimiento de un núcleo alcanza a la de otros. En [5], [7] y [4] se discute suficientemente las condiciones de equilibrio y sus instancias así como la ley de radiactividad en el contexto de acumulación de núcleos. La serie del actínido no es la excepción a este modelo, como se verá más adelante.

En una cadena de desintegración no todos los hijos se desintegran por el mismo canal, algunos núcleos incluso presentan bifurcaciones en su proceso de fisión con una probabilidad de decaer por un canal u otro, se dice que la secuencia se ramifica[12, 3, 7] y a la probabilidad de decaer por

un canal u otro se le llama tasa de ramificación [5] o fracción de ramificación [7].

2.4. Ecuaciones de Bateman

Las ecuaciones de Bateman son un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias propuestas por el matemático británico Harry Bateman en 1910 para generalizar las cadenas de desintegración del tipo $Padre \rightarrow Hijo \rightarrow Nieto$ [7].

Debido a que la cantidad de núcleos que participan en el proceso de desintegración es tan grande, podemos suponer que la función N=N(t) que da el número de núcleos en un tiempo t es una función continua, no discreta. De esta manera, es posible aplicar sobre ella las reglas de cálculo como ya las conocemos [7].

Siguiendo a [7], la cadena de desintegración descrita en el modelo de Bateman comprende las siguientes condiciones iniciales:

$$N_1(t)\Big|_{t=0} = N_1(0) \neq 0,$$
 (4)

$$N_2(0) = N_3(0) = \dots = N_i(0) = 0,$$
 (5)

El significado o la implicación de las ecuaciones 4 y 5 es que, en un tiempo inicial, t=0, únicamente se dispone de los núcleos de la muestra padre para desintegración nuclear, mientras que los productos de su fisión permanecen inexistentes [7]. Es solo hasta que el padre ha decaído que los valores de N son distintos de cero para los elementos resultantes de la fisión y los procesos de acumulación [5] son evidentes.

El número de núcleos disponibles en un tiempo t para el k-ésimo producto de fisión viene dado por:

$$N_k(t) = N_1^{(0)} \left(C_1 e^{-\lambda_1 t} + \dots + C_k e^{-\lambda_k t} \right)$$
 (6)

Donde $N_1^{(0)}$ es el número inicial de núcleos de la muestra radiactiva. Para los valores numéricos de los coeficientes C_k de Bateman, Flanagan y Senftle en [13] ofrecen tablas completas de los términos que involucran.

Siguiendo a [14], una generalización más compacta válida para cualquier núcleo en la secuencia está dada como

$$N_m(t) = N_1^{(0)} \prod_{k=1}^{m-1} \lambda_k \sum_{j=1}^m \left(\frac{e^{\lambda_j t}}{\prod_{p=1, p \neq j}^m (\lambda_p - \lambda_j)} \right)$$
(7)

De acuerdo con [15], Bateman habría resuelto sus ecuaciones con transformadas de Laplace, y este método sería efectivo para sistemas lineales bien portados, pero en el caso de reacciones en cadena con bifurcaciones en los productos de desintegración el sistema requiere de un tratamiento matricial numérico.

3. Serie del actínido

Como parte del proceso de desintegración radiactiva, los productos de fisión del uranio emiten neutrones y rayos gamma al atravesar una serie de decaimientos beta y alfa, según [16]. La causa de esta serie de desintegraciones nucleares se debe a la razón de neutrones sobre protones, explica [16].

Es sabido que los núcleos pesados muestran una tendencia a la inestabilidad cuando el número de neutrones supera al de protones [7, 4].

De acuerdo con [16], al momento de analizar una cadena de desintegración compleja se simplifica el problema al resolver la reacción a través de reacciones lineales en las que cada núcleo está relacionado solo a un núcleo padre. No obstante, es apreciable de inmediato que la naturaleza estocástica del proceso es obviada con esta suposición.

El proceso de desintegración del uranio-235 contempla bifurcaciones en varios puntos, esto es: hay productos de desintegración que pueden a su vez producir uno de dos posibles núcleos más estables como se documenta en [12, 17].

En la literatura científica se registran más bifurcaciones o menos para el proceso, en virtud de los valores de las constantes de ramificación, como podemos apreciar en [12, 17, 15, 14].

Para mantener la simulación lo más fiel posible al proceso real, se ha tomado como referencia la cadena presentada en [12], la cual está ilustrada en la imagen 3 replicada para fines de continuidad de la lectura en anexos.

3.1. Ecuaciones de Bateman para la serie del actínido

Tomando en cuenta las condiciones iniciales 4 y 5 y la forma de $N_i(t)$ en 6, las ecuaciones de Bateman para la serie del actínido son:

$$N_1'(t) = -\lambda_1 N_1(t) \tag{8}$$

$$N_2'(t) = \lambda_1 N_1(t) - \lambda_2 N_2(t)$$
 (9)

$$N_3'(t) = \lambda_2 N_2(t) - \lambda_3 N_3(t) \tag{10}$$

$$N_4'(t) = \lambda_3 N_3(t) - \lambda_4 N_4(t) \tag{11}$$

$$N_5'(t) = (1 - f_4)\lambda_4 N_4(t) - \lambda_5 N_5(t)$$
 (12)

$$N_6'(t) = f_4 \lambda_4 N_4(t) - \lambda_6 N_6(t) \tag{13}$$

$$N_7'(t) = \lambda_5 N_5(t) + \lambda_6 N_6(t) - \lambda_7 N_7(t) \tag{14}$$

$$N_8'(t) = \lambda_7 N_7(t) - \lambda_8 N_8(t)$$
 (15)

$$N_9'(t) = \lambda_8 N_8(t) - \lambda_9 N_9(t)$$
 (16)

$$N'_{10}(t) = f_9 \lambda_9 N_9(t) - \lambda_{10} N_{10}(t) \tag{17}$$

$$N'_{11}(t) = (1 - f_9)\lambda_9 N_9(t) - \lambda_{10} N_{11}(t)$$
 (18)

$$N'_{12}(t) = \lambda_{10}N_{10}(t) + \lambda_{11}N_{11}(t) \tag{19}$$

$$-\lambda_{12}N_{12}(t)$$
 (20)

$$N'_{13}(t) = (1 - f_{12})\lambda_{12}N_{12}(t)$$
(21)

$$-\lambda_{13}N_{13}(t) \tag{22}$$

$$N'_{14}(t) = f_{12}\lambda_{12}N_{11}(t) - \lambda_{14}N_{14}(t)$$
 (23)

$$N'_{15}(t) = \lambda_{13}N_{13}(t) + \lambda_{14}N_{14}(t)$$
 (24)

donde f_k son tasas de ramificación. Las $N_i(t)$ se definen de la siguiente manera:

- $N_1(t) \equiv N\'{u}cleos \ de^{235}U$.
- $N_2(t) \equiv N\'{u}cleos \ de^{231}Th$.
- $N_3(t) \equiv N \acute{u} cleos \ de^{231} Pa$.
- $N_4(t) \equiv N \acute{u} cleos \ de^{227} Ac.$
- $N_5(t) \equiv N\'{u}cleos \ de^{227}Th$.
- $N_6(t) \equiv N\'ucleos \ de^{223}Fr.$
- $N_7(t) \equiv N\'{u}cleos \ de^{223}Ra$.
- $N_8(t) \equiv N\'{u}cleos \ de^{219}Rn$.
- $N_9(t) \equiv N \acute{u} cleos \ de^{215} Po.$
- $N_{10}(t) \equiv N\'{u}cleos \ de^{211}Pb$
- $N_{11}(t) \equiv N\'{u}cleos \ de^{215}At$.

- $N_{12}(t) \equiv N\'{u}cleos \ de^{211}Bi$.
- $N_{13}(t) \equiv N\'{u}cleos \ de^{211}Po.$
- $N_{14}(t) \equiv N\'{u}cleos \ de^{207}Tl$.
- $N_{15}(t) \equiv N\'{u}cleos \ de^{207}Pb.$

para los factores de ramificación tenemos:

- $f_4 = \frac{\lambda_{4,\alpha}}{\lambda_{4,\alpha} + \lambda_{4,\beta}}$, donde $\lambda_{4,\alpha}$ es la tasa de desintegración del ²²⁷Ac hacia ²²³Fr, mientras que $\lambda_{4,\beta}$ representa la tasa de desintegración de ²²⁷Ac hacia ²²⁷Th.
- $f_9 = \frac{\lambda_{9,\alpha}}{\lambda_{9,\alpha} + \lambda_{9,\beta}}$, donde $\lambda_{9,\alpha}$ es la tasa de desintegración del ²¹⁵Po hacia ²¹¹Pb, mientras que $\lambda_{9,\beta}$ representa la tasa de desintegración de ²¹⁵Po hacia ²¹⁵At.
- $f_{12} = \frac{\lambda_{12,\alpha}}{\lambda_{12,\alpha} + \lambda_{12,\beta}}$, donde $\lambda_{12,\alpha}$ es la tasa de desintegración del ²¹¹Bi hacia ²⁰⁷Tl, mientras que $\lambda_{12,\beta}$ representa la tasa de desintegración de ²¹¹Bi hacia ²¹¹Po.

De acuerdo con los archivos de National Nuclear Data Center en la base de datos NuDat, las probabilidades para el canal alfa y el beta en el Ac-227 son 0.013800 y 0.98620, respectivamente; para el canal alfa y beta en el Po-215 son, respectivamente, 0.9999977 y 0.0000023; para el canal alfa y el beta en el Bi-211 son 0.99724 y 0.00276, respectivamente. Se infiere que $f_4 = 0.01380$, $f_9 = 0.9999977$ y $f_{11} = 0.99724$.

La constante de decaimiento λ_i para el i-ésimo núcleo depende del período de semi-desintegración $\tau_{1/2}^{(i)}$, estos valores son conocidos y están documentados en la literatura, tal es el caso de [13] y la base datos NuDat. La tabla 1 muestra las constantes de decaimiento de cada núcleo en las ecuaciones 9 hasta 24 junto con el período de semi-desintegración que le concierne según NuDat.

Lo que no se muestra en la tabla 1 es las constantes de decaimiento correspondientes a los canales específicos α y β en la desintegración del 227Ac , 215Po , y 211Bi . De la definición de razón de fraccionamiento y los registros mencionados en el párrafo anterior, se puede deducir que

$$\lambda_{4,\alpha} = 0.4394 \times 10^{-3} a^{-1}$$

$$\lambda_{4,\beta} = 3.140 \times 10^{-3} a^{-1}$$

$$\lambda_{9,\alpha} = 1.227 \times 10^{10} a^{-1}$$

$$\lambda_{9,\beta} = 2.822 \times 10^{4} a^{-1}$$

$$\lambda_{11,\alpha} = 2.180 \times 10^{11} a^{-1}$$

$$\lambda_{11,\beta} = 6.033 \times 10^{8} a^{-1}$$

son las constantes de decaimiento que caracterizan los canales de desintegración observados en la serie del actínido.

Hay que señalar que en este modelo, las ecuaciones de Bateman tienen una forma determinista. Bajo la perspectiva de un modelo estocástico diferencial, vemos que la solución del sistema sería la solución esperada para el caso determinista más un término perturbativo que es en sí una variable aleatoria dependiente del tiempo, de acuerdo con [18].

En la literatura se reportan métodos analíticos para resolver sistemas de ecuaciones como el planteado aquí empleando transformadas de Laplace o exponenciales de matrices. En este ensayo, se emplea el método de eigenvectores para establecer la solución general del sistema. Al notar que el sistema de ecuaciones puede representarse con una ecuación matricial de la forma

$$\mathbf{N}'(t) = \Lambda \mathbf{N}(t) \tag{25}$$

donde $\mathbf{N}(t)$ es un vector cuya iésima componente es la función $N_i(t)$ del iésimo núcleo en la cadena. El vector derivada $\mathbf{N}'(t)$ es el vector que contiene las derivadas de las funciones iésima. La matriz Λ de dimensión 15×15 se da en la ecuación 7.1 en los anexos.

La matriz Λ cumple con ser una matriz triangular (inferior), y en ese sentido sus eigenvalores son los elementos de la diagonal principal, es inmediato verificar que tales eigenvalores son distintos y reales, bajo estas condiciones [19] sostiene que la solución de un sistema de la forma de 25 viene dada como una combinación lineal de los eigenvectores de Λ :

$$\mathbf{N}(t) = \sum_{i=1}^{15} \kappa_i e^{-\lambda_i t} \mathbf{V}_{\lambda_i}$$

Las constantes de integración κ_i son determinadas por las condiciones iniciales $\mathbf{N}(0) = \begin{bmatrix} N_1^{(0)} & 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix}^T$.

3.1.1. Cálculo de los coeficientes de Bateman

De acuerdo con la ecuación 7, podemos emplear las constantes de decaimiento en el cuadro 1 para determinar los coeficientes de Bateman de la serie del actínido. No obstante, estas soluciones corresponden a los casos donde la serie de desintegración no presenta ramificaciones, la existencia de tales bifurcaciones en el proceso agrega términos sobre la ecuación 7 que no están contemplados en esta forma general.

Una solución simbólica de las ecuaciones por medio de Laplace y Laplace Inverso demuestra que las constantes de decaimiento correspondientes a cada ramificación se combinan de forma alternada en las soluciones deterministas de acuerdo con la aparición de estas bifurcaciones en la cadena.

En el método de eigenvectores primero se obtiene una serie de coeficientes de linealización que acompañan a los vectores linealmente independientes que conforman la solución del sistema, estas constantes se resumen en la tabla 2.

Multiplicando tales coeficientes con los vectores solución (eigenvectores) se recuperan los coeficientes de Bateman para esta serie. Se resumen los resultados en los cuadros 3 al 5. Donde $C_k^* = C_k/N_1^{(0)}$ para simplicidad.

3.2. Modelo estocástico matricial

En el contexto de las ecuaciones diferenciales de Itô, siguiendo el esquema propuesto en [20], se define un sistema de ecuaciones de la forma

$$d\mathbf{N}(t,\omega) = \mathbf{L}(t,\mathbf{N}(t,\omega)) dt + \mathbf{G}(t,\mathbf{N}(t,\omega)) d\mathbf{W}(t,\omega)$$
 (26)

donde \mathbf{L} es un vector de dimensión 15×1 y \mathbf{G} es una matriz de 15×15 que multiplica al diferencial del proceso de Wiener de dimensión 15×1 , \mathbf{W} .

El modelado de una cadena de desintegración con ruido estocástico fue tratado por [18]. De acuerdo con este trabajo, la matriz $\mathbf{L}(t, \mathbf{N}(t, \omega))$ es sustituida por el vector de medias $\mu_t(N(t)) = E(\Delta \mathbf{N})$; mientras que la matriz $\mathbf{G}(t, \mathbf{N}(t, \omega))$ es tomada como la raíz cuadrada de la matriz de covarianza $\Sigma_t(N(t)) = E(\Delta \mathbf{N} \Delta \mathbf{N}^T)$.

Donde

$$\Delta \mathbf{N} = \left\{ \left[\Delta N_1 \cdots \Delta N_{15} \right]_j^T \right\}_{i=1}^{15}$$

es una familia de vectores en la que cada componente refleja una transición detectable de un núcleo k al núcleo k+1 en la ausencia de bifurcaciones. Por comprensión, las componentes de estos vectores se definen como abajo, en el caso de que existan bifurcaciones:

$$\Delta N_k = -1$$

$$\Delta N_{k+1} = 1$$

$$\Delta N_{k+2} = 1$$
 para bifurcaciones.

para
$$k = 1, \dots, n - 1$$
.

La distribución de probabilidad asociada a la desintegración nuclear es muchas veces la de Poisson [18], aunque es posible modelar el proceso con la distribución binomial [21]. Dado que la distribución de Poisson ofrece una buena aproximación a la binomial, se utilizará este esquema.

En este sentido, si N_k es el número de núcleos de la k-ésima muestra radiactiva en la cadena en un instante t, entonces

$$P_k(N_k = x) = \frac{(\lambda_k \Delta t)^x}{x!} exp(-\lambda_k \Delta t)$$

es la probabilidad de que x núcleos decaigan en ese instante t.

La probabilidad de observar exactamente un decaimiento para la k-ésima muestra es equivalente a la probabilidad de medir una transición $\Delta N_k = -1$ hacia el siguiente núcleo, el cual registra demás una transición de la forma $\Delta N_{k+1} = 1$ está dada como

$$P_k = \frac{(\lambda_k \Delta t)^1}{1!} e^{-\lambda_k \Delta t} = \lambda_k \Delta t e^{-\lambda_k \Delta t} = \lambda_k \Delta t N_k,$$

donde la cantidad $\lambda \Delta t$ corresponde al número medio de observaciones registradas en un intervalo de tiempo Δt a una tasa medida de observaciones λ .

El vector de medias es:

$$\mu_t = \sum_{j=1}^{15} \Delta \mathbf{N}_j P_j = \Lambda \mathbf{N}(t),$$

en tanto que la matriz de covarianza es

$$\Sigma_t = \sum_{k=1}^{14} P_k \Delta \mathbf{N}_k(t) \Delta \mathbf{N}_k(t)^T,$$

que por depender del parámetro de tiempo, t, cobran valores distintos en cada instante de la evolución de la cadena. La forma de esta matriz está dada en los anexos por la expresión 7.1.

La ecuación diferencial de Itô es entonces:

$$d\mathbf{N} = \mu_t(\mathbf{N}) dt + \sqrt{\Sigma_t(\mathbf{N})} d\mathbf{W}_t$$
 (27)

4. Implementación en GNU Octave

El método de eigenvectores basado en la discusión de [19] se puede aplicar con el algoritmo listing

Listing 1: Cálculo de las soluciones deterministas mediante eigenvectores

IN: Matriz de coeficientes del sistema dinamico, M. Vector de condiciones iniciales, NO.

$$[V, l] = eig(M);$$

 $C = linsolve(V, N0);$

for
$$i = 1:15$$

 $S(:, i) = C(i)*V(:,i);$
endfor

donde el arreglo V corresponde a los eigenvectores de M y l a sus eigenvalores. El arreglo C recoge las

constantes de integración que satisfacen las condiciones iniciales en ecuaciones 4 y 5. Los vectores solución del sistema se almacenan en las columnas del arreglo S.

La obtención del vector μ_t y la matriz Σ_t se concretó con el algoritmo de cálculo simbólico en el listing 2

Listing 2: Código para obtener la matriz de covarianza

IN: Vector horizontal de simbolos, Pi.

Matriz de transiciones, DeltaN.

mut = DeltaN*P';

sigmat = zeros(15, 15);
for i = 1:15
 sigmat = sigmat +
 P(i)*DeltaN(1:15,i)*DeltaN(1:15,i)';
endfor

4.1. Método de Runge-Kutta Estocástico

4.2. Método de Euler-Maruyama

Para la aplicación del algoritmo de Euler-Maruyama truncado en tiempo discreto se reescribe la ecuación 27 de acuerdo con la discusión en [22] y [18] de la siguiente manera:

$$\mathbf{N}_{t+1} = (\mathbf{I} + \mathbf{\Lambda} \Delta t) \mathbf{N}_t + \mathbf{\Sigma}_t^{\frac{1}{2}} (\mathbf{W}_{t+1} - \mathbf{W}_t)$$
 (28)

la cual se conoce como método de Euler-Maruyama explícito, una forma implícita más favorable computacionalmente para problemas rígidos es la ecuación 29

$$\mathbf{N}_{t+1} = (\mathbf{I} - \mathbf{\Lambda} \Delta t)^{-1} \left[\mathbf{N}_t + \mathbf{\Sigma}_t^{\frac{1}{2}} (\mathbf{W}_{t+1} - \mathbf{W}_t) \right]$$
(29)

4.3. Monte Carlo

5. Análisis y discusión de los resultados

6. Conclusiones

7. Anexos

7.1. Matrices del sistema

La matriz Λ de coeficientes de desintegración del sistema es un arreglo disperso. A continuación se muestra dejando en blanco aquellos elementos valuados en 0:

$$\begin{pmatrix}
-\lambda_{1} & -\lambda_{2} & & & & & & \\
\lambda_{1} & -\lambda_{2} & & & & & & \\
\lambda_{2} & -\lambda_{3} & & & & & & \\
& \lambda_{3} & -\lambda_{4} & & & & & & \\
& & \lambda_{4,\beta} & -\lambda_{5} & & & & & \\
& & \lambda_{4,\alpha} & 0 & -\lambda_{6} & & & & \\
& & & \lambda_{5} & \lambda_{6} & -\lambda_{7} & & & & \\
& & & \lambda_{5} & \lambda_{6} & -\lambda_{7} & & & & \\
& & & & \lambda_{8} & -\lambda_{9} & & & & \\
& & & & \lambda_{9,\alpha} & -\lambda_{10} & & & \\
& & & & \lambda_{9,\beta} & 0 & -\lambda_{11} & & & \\
& & & & \lambda_{12,\beta} & -\lambda_{13} & & \\
& & & & \lambda_{12,\alpha} & 0 & -\lambda_{14} & & \\
& & & & \lambda_{13} & \lambda_{14} & 0
\end{pmatrix}$$

$$(30)$$

La matriz Σ_t de covarianzas para el proceso estocástico de acuerdo con la ecuación de Itô y [18]. A continuación se muestra dejando en blanco aquellos elementos valuados en 0:

$$\begin{pmatrix} P_{1} & -P_{1} \\ -P_{1} & P_{1} + P_{2} & -P_{2} \\ -P_{2} & P_{2} + P_{3} & -P_{3} \\ -P_{2} & P_{2} + P_{3} & -P_{4} \\ -P_{3} & P_{3} + P_{4} & -P_{4} \\ -P_{4} & P_{4} + P_{5} & P_{4} & -P_{5} \\ -P_{4} & P_{4} & P_{4} + P_{6} & -P_{6} \\ -P_{5} & -P_{6} & P_{5} + P_{6} + P_{7} & -P_{7} \\ -P_{7} & P_{7} + P_{8} & -P_{8} \\ -P_{8} & P_{8} + P_{9} & -P_{9} & -P_{9} \\ -P_{9} & P_{9} + P_{10} & P_{9} & -P_{10} \\ -P_{9} & P_{9} & P_{9} + P_{11} & -P_{11} \\ -P_{10} & -P_{11} & P_{10} + P_{11} + P_{12} & -P_{12} & -P_{13} \\ -P_{12} & P_{12} + P_{14} & -P_{14} \\ -P_{13} & -P_{14} & P_{14} + P_{14} \end{pmatrix}$$

7.2. Tablas de coeficientes

Los cuadros a continuación presentan las constantes de decaimiento de los radionúclidos de la serie del actínido, los coeficientes de linealización de la combinación lineal de los eigenvectores del sistema, y los coeficientes de Bateman de la serie, en ese orden.

Radionúclido	$ au_{1/2}$	$\lambda (a^{-1})$
^{235}U	$7.04 \times 10^8 \mathrm{a}$	9.846×10^{-10}
^{231}Th	$25.52\mathrm{h}$	1.786×10^{-3}
^{231}Pa	$3.276 \times 10^4 \mathrm{a}$	2.116×10^{-5}
^{227}Ac	21.772 a	3.184×10^{-2}
^{227}Th	18.697 d	1.353×10^{1}
^{223}Fr	$22.00\mathrm{min}$	1.656×10^4
^{223}Ra	11.43 d	2.213×10^{1}
^{219}Rn	$3.96\mathrm{s}$	5.520×10^{6}
^{215}Po	$1.781 \times 10^{-3} \mathrm{s}$	1.227×10^{10}
^{211}Pb	36.1 min	1.009×10^4
^{215}At	$0.10 \times 10^{-3} \mathrm{s}$	2.186×10^{11}
^{211}Bi	$2.14\mathrm{min}$	1.702×10^5
^{211}Po	$0.516\mathrm{s}$	4.236×10^{7}
^{207}Tl	$4.77\mathrm{min}$	7.638×10^4
^{207}Pb	∞	0.0000

Cuadro 1: Períodos de semidesintegración y constantes de decaimiento para cada radionúclido en la cadena del uranio-235. Datos según NuDat.

κ -ésimo coeficiente	valor aproximado
k-esimo coenciente	valor aproximado
κ_1	1.0000
κ_2	-1.7112×10^{-32}
κ_3	6.7401×10^{-34}
κ_4	-1.5322×10^{-30}
κ_5	-3.1814×10^{-29}
κ_6	4.3028×10^{-42}
κ_7	-4.0795×10^{-35}
κ_8	2.6946×10^{-32}
κ_9	6.7765×10^{-24}
κ_{10}	1.5548×10^{-24}
κ_{11}	1.3446×10^{-29}
κ_{12}	-1.7296×10^{-12}
κ_{13}	-6.6619×10^{-5}
κ_{14}	-7.8436×10^{-7}
κ_{15}	1.4142

Cuadro 2: Constantes de integración del sistema 25 bajo la condición inicial, ecuaciones 4 y 5.

N_i	C_1^*	C_2^*	C_3^*	C_4^*	C_5^*
N_1	1.0000	0	0	0	0
N_2	5.5129×10^{-7}	-5.5129×10^{-7}	0	0	0
N_3	4.6533×10^{-5}	5.5790×10^{-7}	-4.7091×10^{-5}	0	0
N_4	3.0925×10^{-8}	3.9280×10^{-10}	-3.1316×10^{-8}	-1.2221×10^{-12}	0
N_5	1.0043×10^{-12}	1.2758×10^{-14}	-1.0170×10^{-12}	-3.9781×10^{-17}	0
N_6	5.8639×10^{-14}	7.4481×10^{-16}	-5.9381×10^{-14}	-2.3173×10^{-18}	9.5014×10^{-30}
N_7	4.4494×10^{-11}	5.6519×10^{-13}	-4.5057×10^{-11}	-1.7609×10^{-15}	-9.5141×10^{-30}
N_8	1.7838×10^{-16}	2.2659×10^{-18}	-1.8064×10^{-16}	-7.0595×10^{-21}	-3.8257×10^{-35}
N_9	8.0248×10^{-20}	1.0194×10^{-21}	-8.1264×10^{-20}	-3.1759×10^{-24}	-1.7211×10^{-38}
N_{10}	9.7586×10^{-14}	1.2396×10^{-15}	-9.8822×10^{-14}	-3.8621×10^{-18}	3.2640×10^{-32}
N_{11}	1.0360×10^{-26}	1.3160×10^{-28}	-1.0491×10^{-26}	-4.1000×10^{-31}	-2.2219×10^{-45}
N_{12}	5.7852×10^{-15}	7.3488×10^{-17}	-5.8585×10^{-15}	-2.2896×10^{-19}	2.1436×10^{-33}
N_{13}	2.3181×10^{-17}	2.9446×10^{-19}	-2.3474×10^{-17}	-9.1739×10^{-22}	8.5923×10^{-36}
N_{14}	3.5580×10^{-17}	4.5197×10^{-19}	-3.6031×10^{-17}	-1.4081×10^{-21}	1.6833×10^{-35}
N_{15}	-1.0000	-7.0032×10^{-9}	4.7123×10^{-5}	1.2239×10^{-12}	-2.2056×10^{-32}

Cuadro 3: Coeficientes de Bateman obtenidos mediante eigenvectores parte 1.

N_i	C_6^*	C_7^*	C_8^*	C_9^*	C_{10}^*
N_1	0	0	0	0	0
N_2	0	0	0	0	0
N_3	0	0	0	0	0
N_4	0	0	0	0	0
N_5	4.8886×10^{-25}	0	0	0	0
N_6	0	0	0	0	0
N_7	7.6910×10^{-25}	4.7861×10^{-24}	0	0	0
N_8	3.0834×10^{-30}	1.9188×10^{-29}	1.9032×10^{-32}	0	0
N_9	1.3871×10^{-33}	8.6322×10^{-33}	8.5660×10^{-36}	-2.8847×10^{-35}	0
N_{10}	1.6891×10^{-27}	1.0520×10^{-26}	-1.9076×10^{-32}	2.8847×10^{-35}	0
N_{11}	1.7908×10^{-40}	1.1144×10^{-39}	1.1059×10^{-42}	-3.9455×10^{-42}	3.0425×10^{-42}
N_{12}	1.0014×10^{-28}	6.2376×10^{-28}	3.5932×10^{-35}	4.6572×10^{-41}	-3.0425×10^{-42}
N_{13}	4.0126×10^{-31}	2.4993×10^{-30}	1.6555×10^{-37}	-6.4646×10^{-46}	2.3628×10^{-48}
N_{14}	6.1601×10^{-31}	3.8373×10^{-30}	-3.1007×10^{-39}	-1.7830×10^{-48}	6.5381×10^{-51}
N_{15}	-1.2597×10^{-24}	-4.7973×10^{-24}	-1.2704×10^{-36}	2.2318×10^{-48}	-4.5786×10^{-52}

Cuadro 4: Coeficientes de Bateman obtenidos mediante eigenvectores parte 2.

N_i	C_{11}^{*}	C_{12}^{*}	C_{13}^{*}	C_{14}^{*}	C_{15}^{*}
N_1	0	0	0	0	0
N_2	0	0	0	0	0
N_3	0	0	0	0	0
N_4	0	0	0	0	0
N_5	0	0	0	0	0
N_6	0	0	0	0	0
N_7	0	0	0	0	0
N_8	0	0	0	0	0
N_9	0	0	0	0	0
N_{10}	-2.1770×10^{-29}	0	0	0	0
N_{11}	0	0	0	0	0
N_{12}	-1.3719×10^{-30}	-1.0839×10^{-30}	0	0	0
N_{13}	-5.4985×10^{-33}	-4.3606×10^{-33}	4.7659×10^{-34}	0	0
N_{14}	-9.7221×10^{-33}	5.4271×10^{-33}	0	-1.2010×10^{-32}	0
N_{15}	2.3158×10^{-29}	1.0829×10^{-30}	-4.7659×10^{-34}	1.2010×10^{-32}	1.0000

Cuadro 5: Coeficientes de Bateman obtenidos mediante eigenvectores parte 3.

7.3. Gráficas y diagramas complementarios

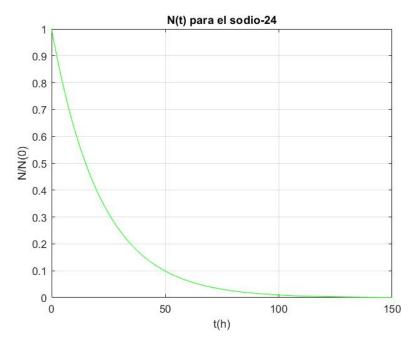


Figura 1: Gráfica del decaimiento exponencial del sodio-24 en en un intervalo de 150 horas.

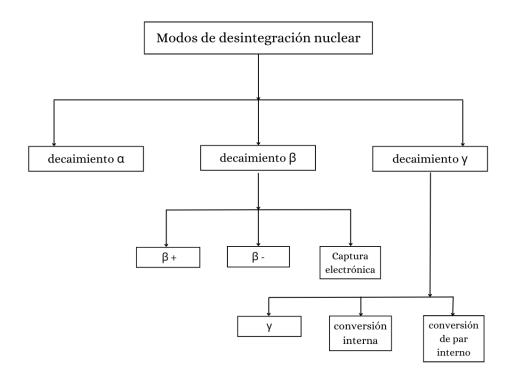


Figura 2: Canales de desintegración para un radionúclido.

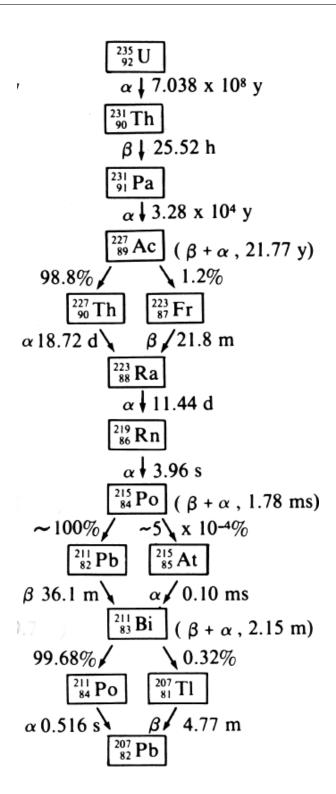


Figura 3: Cadena de desintegración del U235 hasta Pb207. Tomada de [12].

7.4. Gráficas de las soluciones del sistema

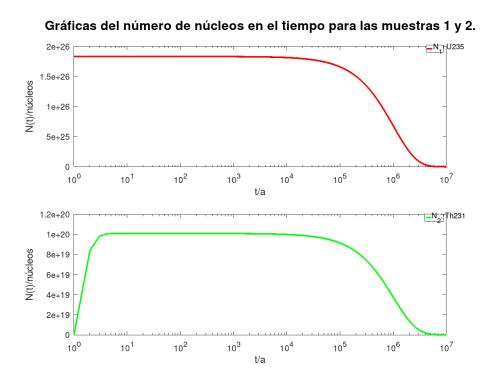


Figura 4: Curvas de desintegración de los núcleos N_1 y N_2 generadas por GNU Octave.

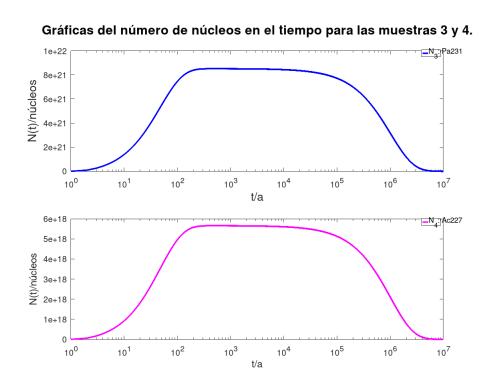


Figura 5: Curvas de desintegración de los núcleos N_3 y N_4 generadas por GNU Octave.

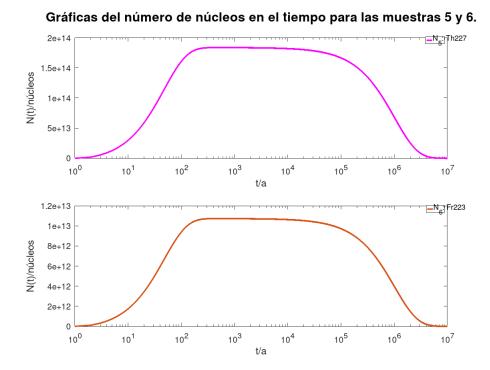


Figura 6: Curvas de desintegración de los núcleos N_5 y N_6 generadas por GNU Octave.

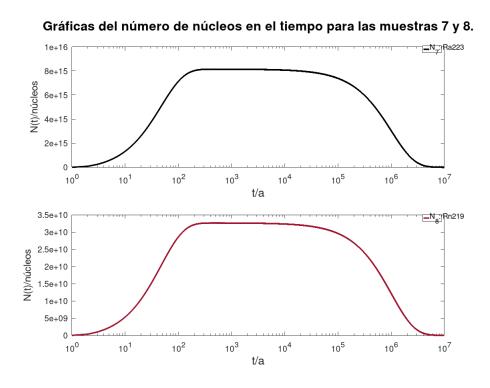


Figura 7: Curvas de desintegración de los núcleos N_7 y N_8 generadas por GNU Octave.

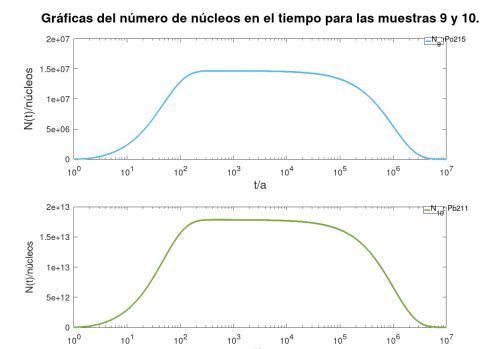


Figura 8: Curvas de desintegración de los núcleos N_9 y N_{10} generadas por GNU Octave.

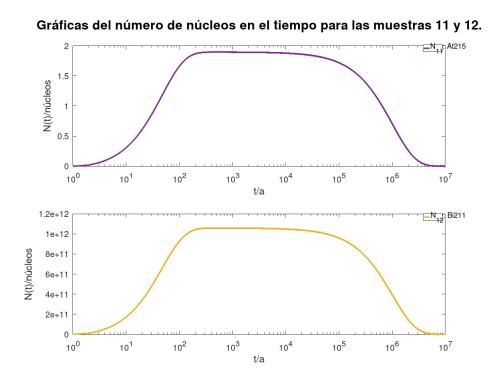


Figura 9: Curvas de desintegración de los núcleos N_{11} y N_{12} generadas por GNU Octave.

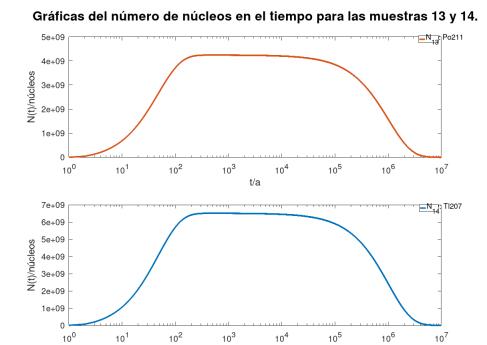


Figura 10: Curvas de desintegración de los núcleos N_{13} y N_{14} generadas por GNU Octave.



Figura 11: Curva de desintegración del núcleo N_{15} generada por GNU Octave.

Bibliografía

- [1] R. L. Murray and K. E. Holbert, Nuclear energy: An introduction to the concepts, systems, and applications of nuclear processes. Oxford England and Cambridge MA: Butterworth-Heinemann, 8va. ed., 2020.
- [2] J. L. Basdevant, J. Rich, and M. Spiro, Fundamentals in nuclear physics: From nuclear structure to cosmology. New York: Springer, 2005.
- [3] An introduction to nuclear physics. Cambridge and New York: Cambridge University Press, 2nd ed. ed., 2001.
- [4] K. S. Krane and D. Halliday, *Introductory nuclear physics*. New York: Wiley, 3ra. ed., 1987.
- [5] E. de Sanctis, S. Monti, and M. Ripani, *Energy from nuclear fission: An introduction*. New York NY: Springer Berlin Heidelberg, 2016.
- [6] J. A. Morales Bolio, Cálculo de la masa crítica, flujo de neutrones y distribución de temperaturas en el núcleo de un reactor nuclear de potencia, PWR. Tesis, Universidad Nacional Autónoma de México, México, D.F., 1974.
- [7] E. B. Podgoršak, *Radiation physics for medical physicists*. New York NY: Springer Berlin Heidelberg, 3ra. ed., 2016.
- [8] A. Das and T. Ferbel, *Introduction to nuclear and particle physics*. New Jersey: World Scientific, 2da. ed., 2009.
- [9] B. R. Martin, Nuclear and particle physics. Chichester U.K.: Wiley, 2da. ed., 2009.
- [10] D. Eidemüller, Nuclear Power Explained. Cham: Springer International Publishing, 2021.
- [11] Y. Koizumi, T. Okawa, and S. Mori, Fundamentals of thermal and nuclear power generation. JSME series in thermal and nuclear power generation, Amsterdam: Elsevier, 2021.
- [12] S. Hübener, "Actinide elements," in *Encyclopedia of Physical Science and Technology (Third Edition)* (R. A. Meyers, ed.), pp. 211–236, New York: Academic Press, third edition ed., 2003.
- [13] F. J. Flanagan and F. E. Senftle, "Tables for evaluating bateman equation coefficients for radioactivity calculations," *Analytical Chemistry*, vol. 26, pp. 1595–1600, Oct. 1954.
- [14] G. G. Loch, G. Hiromoto, O. Rodríguez Jr., and J. S. Bevilacqua, "Analysis of numerical solutions for bateman equations," *Regional Congress of IRPA on radiological and nuclear safety*, 2013.
- [15] A. P. Pratiwi, T. Prihandono, and S. H. B. Prastowo, "Numerical solution of radioactive core decay activity rate of actinium series using matrix algebra method," *Jurnal Penelitian Pendidikan IPA*, vol. 7, no. 3, pp. 395–400, 2021.
- [16] H. Guo, C. Tian, X. Wang, N. Lv, M. Ma, and Y. Wei, "Decay chain deduction of uranium fission products," *Health physics*, vol. 111, no. 1, pp. 17–21, 2016.
- [17] International Atomic Energy Agency, Measurement and calculation of radon releases from NORM residues. Technical reports series, Vienna, Austria: IAEA, June 2013.

- [18] D. Suescún-Díaz, M. Ibáñez-Paredes, and J. Chala-Casanova, "Stochastic radioactive decay," *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 626, p. 129109, 2023.
- [19] M. W. Hirsch, S. Smale, and R. L. Devaney, Differential Equations, Dynamical Systems and an Introduction to Chaos. San Diego, California: Elsevier Academic Press, 2da. ed., 2004.
- [20] Allen, E., Modelling with Itô Stochastic Differential Equations. Mathematical Modelling: Theory and Applications, The Netherlands: Springer, 2007.
- [21] A. Sitek and A. M. Celler, "Limitations of poisson statistics in describing radioactive decay," *Physica Medica*, vol. 31, no. 2015, p. 1105–1107, 2015.
- [22] X. Mao, "Convergence rates of the truncated euler-maruyama method for stochastic differential equations," *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 2015.