

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.

8 de mayo 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 [4, 2, 5, 1] entre otros.

1.1. Reacciones de Fisión

La fisión nuclear es la ruptura de un núcleo espontáneamente o inducida, de acuerdo con [4], 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 [4, 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 [3]. 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 [19].

1.2. Reacciones de Fusión

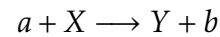
La fusión nuclear, en palabras de [1] es la combinación de dos o más núcleos atómicos en uno más pesado. Estas reacciones también se manifiestan como exotérmicas, en particular, la energía solar que recibe nuestro planeta es esencialmente producida por este fenómeno, explica [4].

Hasta ahora, un dispositivo práctico de energía de fusión no ha sido demostrado, y

considerable investigación y desarrollo será necesario para alcanzar ese objetivo. [1]

1.3. Energía de desintegración

Siguiendo la notación empleada en [5], una reacción nuclear general se puede expresar como:



X e Y representan núcleos atómicos, mientras que a y b son partículas que interceden en la reacción ya sea induciendo el proceso o siendo generadas por el proceso. La ley de la conservación de la energía dicta, en el régimen relativista, la siguiente correspondencia entre el antes y el después del proceso nuclear:

$$m_X c^2 + T_x + m_a c^2 + T_a = m_Y c^2 + T_Y + m_b c^2 + T_b,$$

donde T representa la energía cinética de las partículas. Las emes, m_X , m_a , m_Y , m_b , representan las masas de las partículas en cuestión. Se define el valor Q (energía de la reacción o energía de desintegración) como:

$$Q = (m_{inicial} - m_{final})c^2,$$

o como el exceso de la energía final de los productos.

$$Q = T_{final} - T_{inicial}$$

2. Modos de desintegración nuclear

2.1. Canales de decaimiento y tasas de ramificación

Siguiendo a [2, 4, 5] los canales de desintegración (*decaimiento*) son los posibles mecanismos en que una partícula puede fraccionarse, estos se muestran en la figura 1.

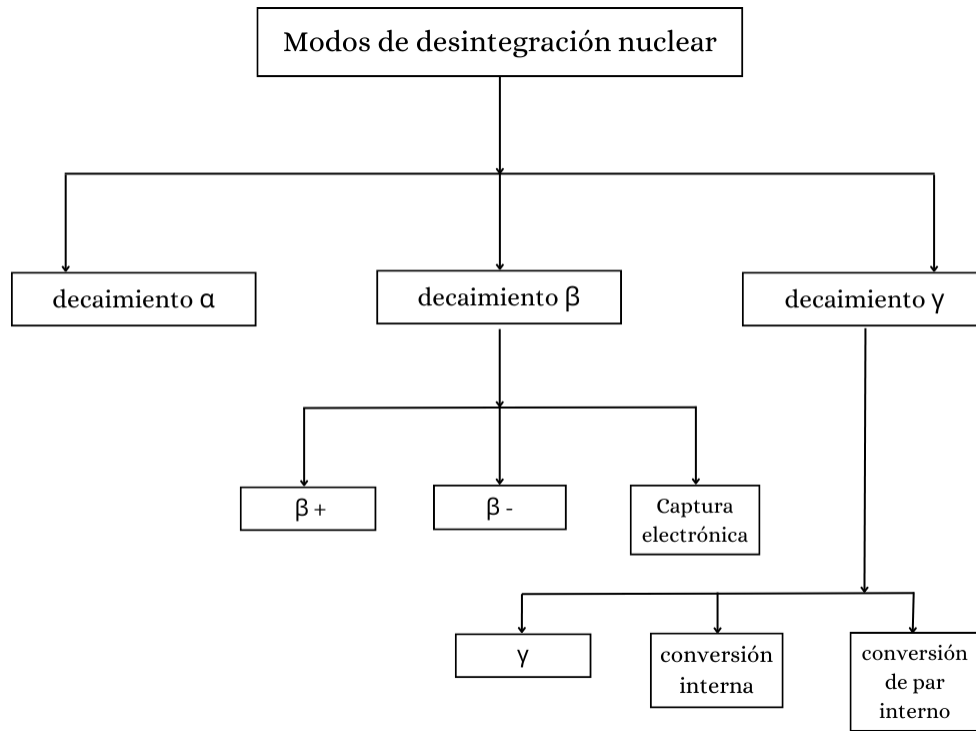


Figura 1: Canales de desintegración para un radionúclido.

La desintegración radiactiva se produce a través de la emisión de diferentes tipos de radiaciones corpusculares, explica [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 (${}^4\text{He}$).

■ 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 [2, 5, 13, 15]:

- **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 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.

2.2. Leyes de la desintegración nuclear

Siguiendo a [5], 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 [6], se puede escribir un modelo para la ley de desintegración radiactiva como:

$$\frac{dN}{dt} \propto N$$

donde N es el número de átomos presentes en el tiempo t . Eliminando el signo de proporcionalidad, obtenemos:

$$\frac{dN}{dt} = -\lambda N \quad (1)$$

Donde λ se conoce como constante de decaimiento del elemento. 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

$$\frac{dN}{N} = -\lambda dt, \quad (2)$$

de integrar esto se obtiene:

$$\ln(\lambda) = -\lambda t + C \quad (3)$$

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 2 para ^{24}Na , radioisótopo del sodio que presenta un período de semidesintegración $t_{1/2} = 15h$.

2.3. Desintegración en cadena

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* [6]. 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

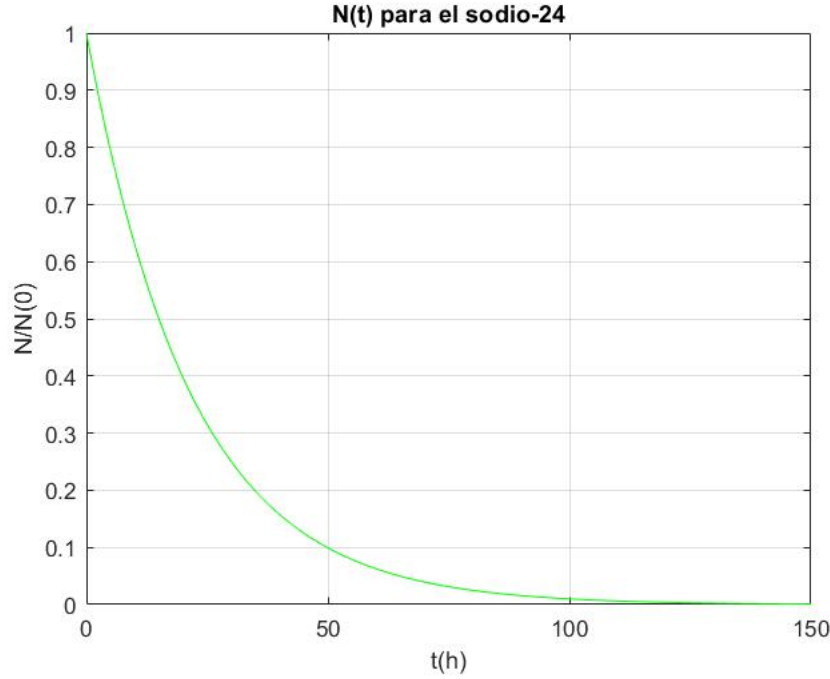


Figura 2: Gráfica del decaimiento exponencial del sodio-24 en un intervalo de 150 horas.

esta manera, es posible aplicar sobre ella las reglas de cálculo como ya las conocemos [6]. Siguiendo a *Podgorsak* en [6], tenemos que la cadena de desintegración descrita en el modelo de Bateman comprende las siguientes condiciones iniciales:

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

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

como conveniencia para futuras referencias llamaremos a la ecuación 4 *condición inicial del núcleo padre* y a 5, *condición inicial de los productos*.

El significado o la implicación de las ecuaciones 4 y 5 es que, en un tiempo inicial, $t = 0$, únicamente disponemos de los núcleos de la muestra padre para desintegración nuclear, mientras que los productos de su fisión permanecen inexistentes. Es solo hasta que el padre ha decaído que comenzamos a ver valores de N distintos de cero para los elementos resultantes de la fisión.

El número de núcleos disponibles en un

tiempo t para el k -ésimo producto de fisión viene dado por:

$$N_k(t) = N_1(0)e^{-\lambda_1 t} + C_2 e^{-\lambda_2 t} + \dots + C_k e^{-\lambda_k t} \quad (6)$$

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 [7] ofrecen tablas completas de los términos que involucran.

En general, [8] ofrece una generalización más compacta válida para cualquier núcleo en la secuencia:

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

De acuerdo con *Pratiwi et al* en [9], 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 sumado a constantes de desintegración diferentes para cada producto, el sistema requiere de un tratamiento matricial numérico.

3. Serie del actínido

La desintegración en cadena del ^{235}U se conoce como la serie del actínido en [6], esto debido a cuestiones históricas, pues el uranio se entendió como una especie química distinta años después de los trabajos sobre el 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 [10]. La causa de esta serie de desintegraciones nucleares se debe a la razón de neutrones sobre protones, y es mediante el canal beta que estos núcleos logran la estabilidad, explica [10].

De acuerdo con [10], 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 [11, 12].

La literatura observa más o menos bifurcaciones para el proceso, como podemos apreciar en [11, 12, 9, 8], por mencionar algunos ejemplos. Para mantener la simulación lo más fiel posible al proceso real, se ha tomado como referencia la cadena presentada en [11], la cual está ilustrada en la imagen 3.

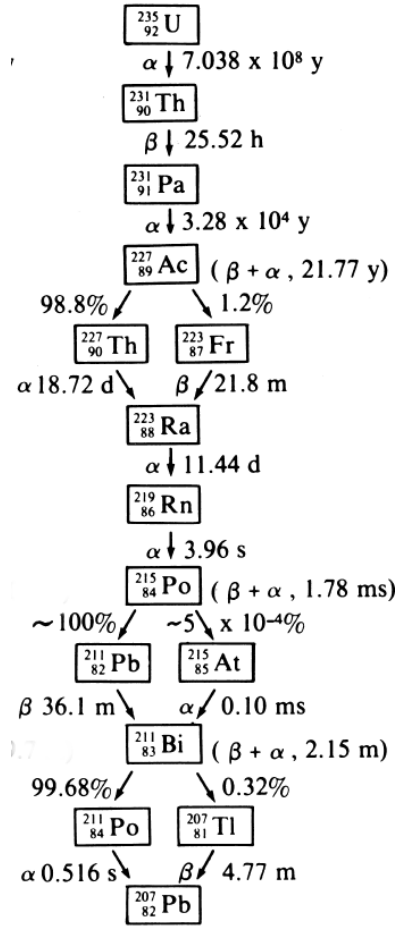


Figura 3: Cadena de desintegración del U235 hasta Pb207. Tomada de [11]

Contemplar el proceso de enriquecimiento del material fisionable complica en gran manera la resolución del problema, es por esto que se ignora esta etapa del proceso.

3.1. Ecuaciones de Bateman para la serie del actínido

Es posible modelar las ecuaciones de Bateman en una notación matricial contemplando un sistema de ecuaciones para cada posible bifurcación [9]. Nuestra intención en este estudio es más bien contemplar las bifurcaciones mediante un modelo diferencial estocástico.

Tomando en cuenta las condiciones iniciales 4 y 5 y la forma de $N_i(t)$ en 6, podemos plantear las ecuaciones de Bateman de la siguiente

forma:

$$N_1'(t) = -\lambda_1 N_1(t) \quad (8)$$

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

$$N_3'(t) = \lambda_2 N_2(t) - \lambda_3 N_3(t) \quad (10)$$

$$N_4'(t) = \lambda_3 N_3(t) - \lambda_4 N_4(t) \quad (11)$$

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

$$N_6'(t) = f_4 \lambda_4 N_4(t) - \lambda_6 N_6(t) \quad (13)$$

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

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

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

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

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

$$N_{12}'(t) = \lambda_{10} N_{10}(t) + \lambda_{11} N_{11}(t) - \lambda_{12} N_{12}(t) \quad (19)$$

$$N_{13}'(t) = (1 - f_{12}) \lambda_{12} N_{12}(t) - \lambda_{13} N_{13}(t) \quad (20)$$

$$N_{14}'(t) = f_{12} \lambda_{12} N_{12}(t) - \lambda_{14} N_{14}(t) \quad (21)$$

$$N_{15}'(t) = \lambda_{13} N_{13}(t) + \lambda_{14} N_{14}(t) \quad (22)$$

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

- $N_1(t) \equiv \text{Núcleos de } ^{235}\text{U}.$
- $N_2(t) \equiv \text{Núcleos de } ^{231}\text{Th}.$
- $N_3(t) \equiv \text{Núcleos de } ^{231}\text{Pa}.$
- $N_4(t) \equiv \text{Núcleos de } ^{227}\text{Ac}.$
- $N_5(t) \equiv \text{Núcleos de } ^{227}\text{Th}.$
- $N_6(t) \equiv \text{Núcleos de } ^{223}\text{Fr}.$
- $N_7(t) \equiv \text{Núcleos de } ^{223}\text{Ra}.$
- $N_8(t) \equiv \text{Núcleos de } ^{219}\text{Rn}.$
- $N_9(t) \equiv \text{Núcleos de } ^{215}\text{Po}.$
- $N_{10}(t) \equiv \text{Núcleos de } ^{211}\text{Pb}.$
- $N_{11}(t) \equiv \text{Núcleos de } ^{215}\text{At}.$
- $N_{12}(t) \equiv \text{Núcleos de } ^{211}\text{Bi}.$
- $N_{13}(t) \equiv \text{Núcleos de } ^{211}\text{Po}.$
- $N_{14}(t) \equiv \text{Núcleos de } ^{207}\text{Tl}.$

- $N_{15}(t) \equiv \text{Núcleos de } ^{207}\text{Pb}.$

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

Las tasas de ramificación pueden verse como una medida de probabilidad para la ocurrencia de un canal de desintegración. 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. De manera que $f_4 = 0.01380$, $f_9 = 0.9999977$ y $f_{12} = 0.99724$.

La constante de decaimiento λ_i para el i -ésimo núcleo depende del período de semi-desintegración $T_{1/2}^{(i)}$, estos valores son conocidos y están documentados en la literatura, tal es el caso de [7] y la base de datos *NuDat*. La tabla 1 muestra las constantes de decaimiento de cada núcleo en las ecuaciones 9 hasta 22 junto con el período de semi-desintegración que le concierne según *NuDat*.

| Radionúclido | $T_{1/2}$ | λ (a^{-1}) |
|--------------|--------------------------|-------------------------|
| ^{235}U | 7.04×10^8 a | 9.846×10^{-10} |
| ^{231}Th | 25.52 h | 1.786×10^{-3} |
| ^{231}Pa | 3.276×10^4 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 min | 1.656×10^4 |
| ^{223}Ra | 11.43 d | 2.213×10^1 |
| ^{219}Rn | 3.96 s | 5.520×10^6 |
| ^{215}Po | 1.781×10^{-3} s | 1.227×10^{10} |
| ^{211}Pb | 36.1 min | 1.009×10^4 |
| ^{215}At | 0.10×10^{-3} s | 2.186×10^{11} |
| ^{211}Bi | 2.14 min | 1.702×10^5 |
| ^{211}Po | 0.516 s | 4.236×10^7 |
| ^{207}Tl | 4.77 min | 7.638×10^4 |
| ^{207}Pb | ∞ | 0 |

Cuadro 1: Períodos de semidesintegración y constantes de decaimiento para cada radionúclido en la cadena del uranio-235. Datos 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 ^{227}Ac , ^{215}Po , y ^{211}Bi . De la definición de razón de fraccionamiento, 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.

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 el presente, utilizamos 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

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

Donde $\mathbf{N}(t)$ es un vector cuya i -ésima componente es la función $N_i(t)$ del i -ésimo núcleo en la cadena. El vector derivada $\mathbf{N}'(t)$ es el vector que contiene las derivadas de las funciones i -ésima. La matriz Λ es triangular inferior de dimensión 15×15 , dada como 7.1 en los anexos.

De tal forma que las soluciones del sistema vienen dados como combinación lineal de los eigenvectores de Λ :

$$\mathbf{N}(t) = \kappa_1 e^{-\lambda_1 t} \mathbf{V}_{\lambda_1} + \kappa_2 e^{-\lambda_2 t} \mathbf{V}_{\lambda_2} + \dots + \kappa_{15} e^{-\lambda_{15} t} \mathbf{V}_{\lambda_{15}}$$

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 elementos de los vectores solución (eigenvectores) se recuperan los coeficientes de Bateman para esta serie. Resumimos los resultados en los cuadros 3 al 6. Donde $C_k^* = C_k/N_1^{(0)}$ para simplicidad.

| κ -ésimo coeficiente | valor aproximado |
|-----------------------------|-------------------------------|
| κ_1 | 1.00000000 |
| κ_2 | $-1.71116548 \times 10^{-32}$ |
| κ_3 | $6.74007050 \times 10^{-34}$ |
| κ_4 | $-1.53215678 \times 10^{-30}$ |
| κ_5 | $-3.18135206 \times 10^{-29}$ |
| κ_6 | $4.30275079 \times 10^{-42}$ |
| κ_7 | $-4.07954307 \times 10^{-35}$ |
| κ_8 | $2.69462401 \times 10^{-32}$ |
| κ_9 | $6.77647316 \times 10^{-24}$ |
| κ_{10} | $1.55481575 \times 10^{-24}$ |
| κ_{11} | $1.34460356 \times 10^{-29}$ |
| κ_{12} | $-1.72955189 \times 10^{-12}$ |
| κ_{13} | $-6.66193143 \times 10^{-5}$ |
| κ_{14} | $-7.84358235 \times 10^{-7}$ |
| κ_{15} | 1.41424688 |

Cuadro 2: Coeficientes de Bateman mediante método de eigenvectores.

3.2. Modelo estocástico matricial

Un modelo estocástico matricial del sistema se puede construir usando una matriz determinista alternativa \mathcal{L} más tres matrices \mathcal{X} , \mathcal{Y} y \mathcal{Z} que conjuntamente representan un ruido estocástico sobre \mathcal{L} . El sistema matricial es

$$\mathcal{N}'(t) = (\mathcal{L} + x\mathcal{X} + y\mathcal{Y} + z\mathcal{Z})\mathcal{N}(t) \quad (23)$$

donde los parámetros x, y , y z son variables aleatorias discretas que pueden ser 0 o 1, no necesariamente todas a la vez, y dictan la ocurrencia de una bifurcación en la cadena. La forma explícita de estos cuatro arreglos puede verse en los anexos en las ecuaciones 7.1, 7.1, 7.1 y 7.1. El vector \mathcal{N} corresponde al vector de funciones del número de núcleos por unidad de tiempo para cada especie química en la cadena bajo el esquema estocástico.

4. Implementación en GNU Octave

4.1. Método de Runge-Kutta Estocástico

4.2. Método de Euler-Maruyama

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:

$$\Lambda = \begin{pmatrix} -\lambda_1 & & & & & & & & & & & & & & \\ \lambda_1 & -\lambda_2 & & & & & & & & & & & & & \\ & \lambda_2 & -\lambda_3 & & & & & & & & & & & & \\ & & \lambda_3 & -\lambda_4 & & & & & & & & & & & \\ & & & \lambda_{4,\beta} & -\lambda_5 & & & & & & & & & & \\ & & & & \lambda_{4,\alpha} & & -\lambda_6 & & & & & & & & \\ & & & & & \lambda_5 & \lambda_6 & -\lambda_7 & & & & & & & \\ & & & & & & \lambda_7 & -\lambda_8 & & & & & & & \\ & & & & & & & \lambda_8 & -\lambda_9 & & & & & & \\ & & & & & & & & \lambda_{9,\alpha} & -\lambda_{10} & & & & & \\ & & & & & & & & & \lambda_{9,\beta} & & -\lambda_{11} & & & \\ & & & & & & & & & & \lambda_{10} & \lambda_{11} & -\lambda_{12} & & \\ & & & & & & & & & & & \lambda_{12,\beta} & -\lambda_{13} & & \\ & & & & & & & & & & & & \lambda_{12,\alpha} & -\lambda_{14} & \\ & & & & & & & & & & & & & \lambda_{13} & \lambda_{14} & 0 \end{pmatrix} \quad (24)$$

Para la versión estocástica del sistema, se toma como término determinista la matriz \mathcal{L} y las matrices estocásticas \mathcal{X} , \mathcal{Y} y \mathcal{Z} dadas por los siguientes arreglos dispersos:

$$\mathcal{L} = \begin{pmatrix} -\lambda_1 & & & & & & & & & & & & & & \\ \lambda_1 & -\lambda_2 & & & & & & & & & & & & & \\ & \lambda_2 & -\lambda_3 & & & & & & & & & & & & \\ & & \lambda_3 & -\lambda_4 & & & & & & & & & & & \\ & & & \lambda_{4,\alpha} & -\lambda_6 & & & & & & & & & & \\ & & & & \lambda_6 & -\lambda_7 & & & & & & & & & \\ & & & & & \lambda_7 & -\lambda_8 & & & & & & & & \\ & & & & & & \lambda_8 & -\lambda_9 & & & & & & & \\ & & & & & & & \lambda_{9,\beta} & -\lambda_{11} & & & & & & \\ & & & & & & & & \lambda_{11} & -\lambda_{12} & & & & & \\ & & & & & & & & & \lambda_{12,\beta} & -\lambda_{14} & & & & \\ & & & & & & & & & & \lambda_{14} & 0 & & & \end{pmatrix} \quad (25)$$

$$\mathcal{X} = \begin{cases} (\lambda_4 - 2\lambda_{4,\alpha}) & \text{En la fila 5, columna 4.} \\ -\lambda_5 + \lambda_6 & \text{En la fila 5, columna 5.} \\ \lambda_5 - \lambda_6 & \text{En la fila 6, columna 5.} \end{cases} \quad (26)$$

$$\mathcal{Y} = \begin{cases} -(\lambda_9 - 2\lambda_{9,\alpha}) & \text{En la fila 9, columna 8.} \\ -\lambda_{10} + \lambda_{11} & \text{En la fila 9, columna 9.} \\ \lambda_{10} - \lambda_{11} & \text{En la fila 10, columna 9.} \end{cases} \quad (27)$$

$$\mathcal{Z} = \begin{cases} (\lambda_{12} - 2\lambda_{12,\alpha}) & \text{En la fila 11, columna 10.} \\ -\lambda_{13} + \lambda_{14} & \text{En la fila 11, columna 11.} \\ \lambda_{13} - \lambda_{14} & \text{En la fila 12, columna 11.} \end{cases} \quad (28)$$

donde se suponen 0 todos los elementos no especificados.

7.2. Tablas de coeficientes

A continuación se presentan los coeficientes obtenidos para la serie del actínido mediante la simulación por GNU Octave bajo el esquema de eigenvectores.

| N_i | C_1^* | C_2^* | C_3^* | C_4^* |
|----------|------------------------------|------------------------------|-------------------------------|-------------------------------|
| N_1 | 1.00000000 | 0 | 0 | 0 |
| N_2 | $5.51288098 \times 10^{-7}$ | $-5.51288098 \times 10^{-7}$ | 0 | 0 |
| N_3 | $4.65333818 \times 10^{-5}$ | $5.57897907 \times 10^{-7}$ | $-4.70912797 \times 10^{-5}$ | 0 |
| N_4 | $3.09248238 \times 10^{-8}$ | $3.92796956 \times 10^{-10}$ | $-3.13163987 \times 10^{-8}$ | $-1.22207337 \times 10^{-12}$ |
| N_5 | $1.00429565 \times 10^{-12}$ | $1.27579176 \times 10^{-14}$ | $-1.01701378 \times 10^{-12}$ | $-3.97809227 \times 10^{-17}$ |
| N_6 | $5.86387844 \times 10^{-14}$ | $7.44810663 \times 10^{-16}$ | $-5.93812778 \times 10^{-14}$ | $-2.31726572 \times 10^{-18}$ |
| N_7 | $4.44937366 \times 10^{-11}$ | $5.65191533 \times 10^{-13}$ | $-4.50571672 \times 10^{-11}$ | $-1.76087766 \times 10^{-15}$ |
| N_8 | $1.78377969 \times 10^{-16}$ | $2.26588562 \times 10^{-18}$ | $-1.80636795 \times 10^{-16}$ | $-7.05946067 \times 10^{-21}$ |
| N_9 | $8.02482795 \times 10^{-20}$ | $1.01937152 \times 10^{-21}$ | $-8.12644752 \times 10^{-20}$ | $-3.17589429 \times 10^{-24}$ |
| N_{10} | $9.75861373 \times 10^{-14}$ | $1.23960972 \times 10^{-15}$ | $-9.88218850 \times 10^{-14}$ | $-3.86206702 \times 10^{-18}$ |
| N_{11} | $1.03599574 \times 10^{-26}$ | $1.31599652 \times 10^{-28}$ | $-1.04911471 \times 10^{-26}$ | $-4.10004175 \times 10^{-31}$ |
| N_{12} | $5.78523143 \times 10^{-15}$ | $7.34881961 \times 10^{-17}$ | $-5.85849067 \times 10^{-15}$ | $-2.28956247 \times 10^{-19}$ |
| N_{13} | $2.31805658 \times 10^{-17}$ | $2.94456320 \times 10^{-19}$ | $-2.34741047 \times 10^{-17}$ | $-9.17393781 \times 10^{-22}$ |
| N_{14} | $3.55803094 \times 10^{-17}$ | $4.51966849 \times 10^{-19}$ | $-3.60308682 \times 10^{-17}$ | $-1.40812647 \times 10^{-21}$ |
| N_{15} | -1.00004712 | $-7.00318644 \times 10^{-9}$ | $4.71226424 \times 10^{-5}$ | $1.22388044 \times 10^{-12}$ |

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

| N_i | C_5^* | C_6^* | C_7^* | C_8^* |
|----------|-------------------------------|-------------------------------|-------------------------------|-------------------------------|
| N_1 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| N_2 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| N_3 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| N_4 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| N_5 | 0 | $4.88856388 \times 10^{-25}$ | 0 | 0 |
| N_6 | $9.50138278 \times 10^{-30}$ | 0 | 0 | 0 |
| N_7 | $-9.51409697 \times 10^{-30}$ | $7.69096154 \times 10^{-25}$ | $4.78609631 \times 10^{-24}$ | 0 |
| N_8 | $-3.82573383 \times 10^{-35}$ | $3.08335862 \times 10^{-30}$ | $1.91878144 \times 10^{-29}$ | $1.90321436 \times 10^{-32}$ |
| N_9 | $-1.72111485 \times 10^{-38}$ | $1.38713444 \times 10^{-33}$ | $8.63217083 \times 10^{-33}$ | $8.56599161 \times 10^{-36}$ |
| N_{10} | $3.26399237 \times 10^{-32}$ | $1.68909355 \times 10^{-27}$ | $1.05202483 \times 10^{-26}$ | $-1.90755340 \times 10^{-32}$ |
| N_{11} | $-2.22193897 \times 10^{-45}$ | $1.79077407 \times 10^{-40}$ | $1.11440298 \times 10^{-39}$ | $1.10588725 \times 10^{-42}$ |
| N_{12} | $2.14355861 \times 10^{-33}$ | $1.00143055 \times 10^{-28}$ | $6.23756480 \times 10^{-28}$ | $3.59322574 \times 10^{-35}$ |
| N_{13} | $8.59228100 \times 10^{-36}$ | $4.01258523 \times 10^{-31}$ | $2.49930117 \times 10^{-30}$ | $1.65548072 \times 10^{-37}$ |
| N_{14} | $1.68328476 \times 10^{-35}$ | $6.16008576 \times 10^{-31}$ | $3.83733666 \times 10^{-30}$ | $-3.10073991 \times 10^{-39}$ |
| N_{15} | $-2.20564442 \times 10^{-32}$ | $-1.25974588 \times 10^{-24}$ | $-4.79726585 \times 10^{-24}$ | $-1.27035860 \times 10^{-36}$ |

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

| N_i | C_9^* | C_{10}^* | C_{11}^* | C_{12}^* |
|----------|-------------------------------|-------------------------------|-------------------------------|-------------------------------|
| N_1 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| N_2 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| N_3 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| N_4 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| N_5 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| N_6 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| N_7 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| N_8 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| N_9 | $-2.88467470 \times 10^{-35}$ | 0 | 0 | 0 |
| N_{10} | $2.88467044 \times 10^{-35}$ | 0 | $-2.17703376 \times 10^{-29}$ | 0 |
| N_{11} | $-3.94554377 \times 10^{-42}$ | $3.04250308 \times 10^{-42}$ | 0 | 0 |
| N_{12} | $4.65721718 \times 10^{-41}$ | $-3.04250545 \times 10^{-42}$ | $-1.37194870 \times 10^{-30}$ | $-1.08392039 \times 10^{-30}$ |
| N_{13} | $-6.46462136 \times 10^{-46}$ | $2.36278724 \times 10^{-48}$ | $-5.49850503 \times 10^{-33}$ | $-4.36062925 \times 10^{-33}$ |
| N_{14} | $-1.78300791 \times 10^{-48}$ | $6.53807648 \times 10^{-51}$ | $-9.72206436 \times 10^{-33}$ | $5.4271346 \times 10^{-33}$ |
| N_{15} | $2.23180703 \times 10^{-48}$ | $-4.57859868 \times 10^{-52}$ | $2.31575069 \times 10^{-29}$ | $1.08285388 \times 10^{-30}$ |

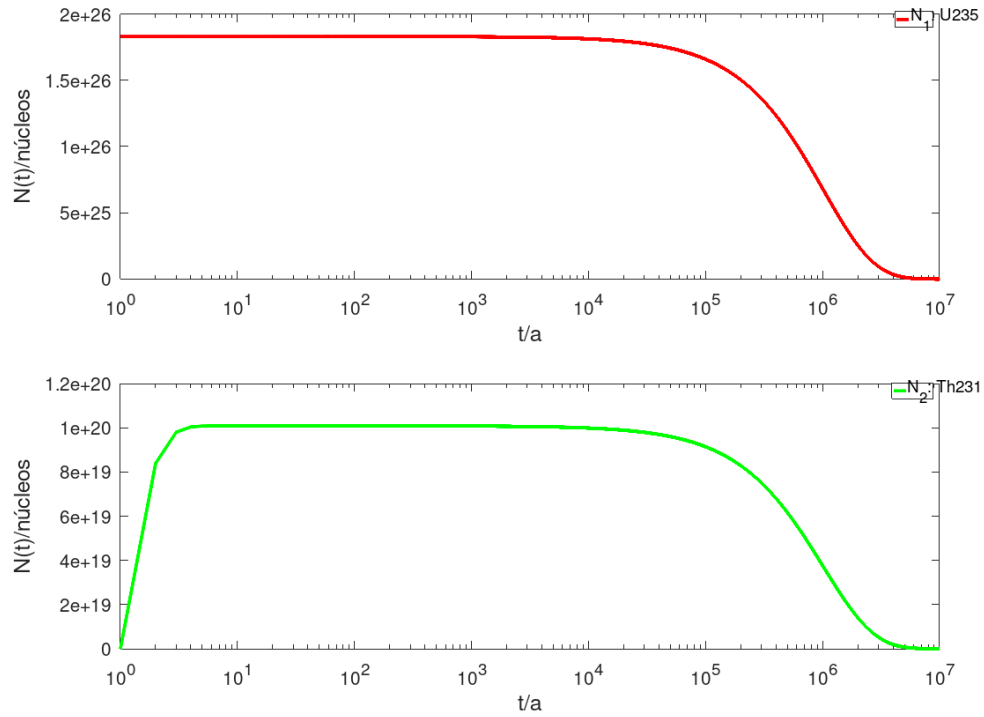
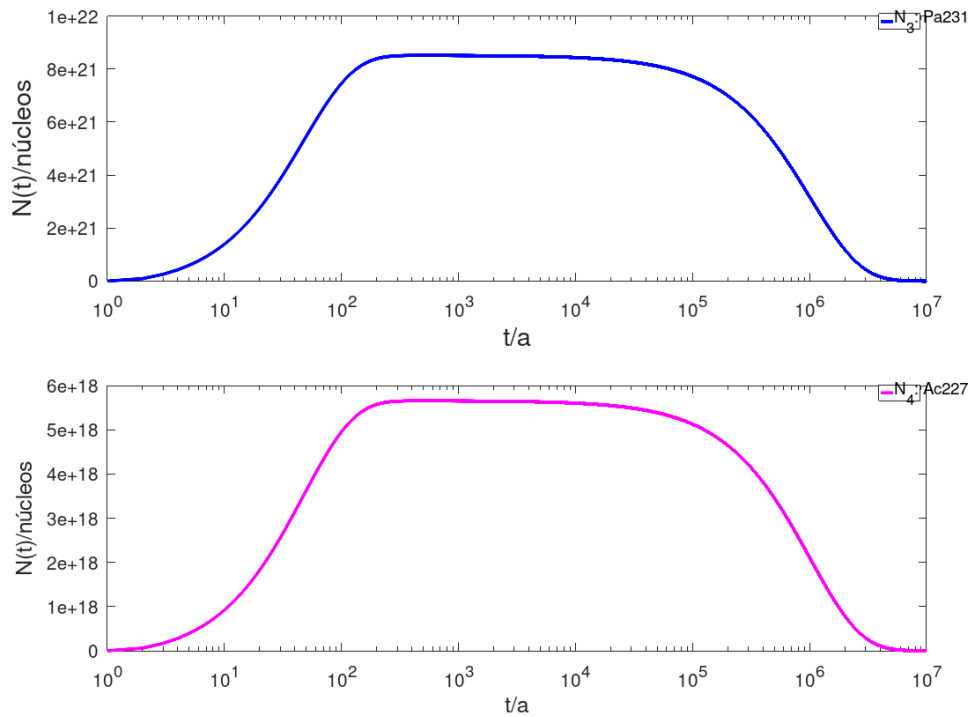
Cuadro 5: Coeficientes de Bateman obtenidos mediante mediante eigenvectores. Parte 3

| N_i | C_{13}^* | C_{14}^* | C_{15}^* |
|----------|-------------------------------|-------------------------------|------------|
| N_1 | 0 | 0 | 0 |
| N_2 | 0 | 0 | 0 |
| N_3 | 0 | 0 | 0 |
| N_4 | 0 | 0 | 0 |
| N_5 | 0 | 0 | 0 |
| N_6 | 0 | 0 | 0 |
| N_7 | 0 | 0 | 0 |
| N_8 | 0 | 0 | 0 |
| N_9 | 0 | 0 | 0 |
| N_{10} | 0 | 0 | 0 |
| N_{11} | 0 | 0 | 0 |
| N_{12} | 0 | 0 | 0 |
| N_{13} | $4.76594956 \times 10^{-34}$ | 0 | 0 |
| N_{14} | 0 | $-1.20997671 \times 10^{-32}$ | 0 |
| N_{15} | $-4.76594956 \times 10^{-34}$ | $1.20997671 \times 10^{-32}$ | 1.00000000 |

Cuadro 6: Coeficientes de Bateman obtenidos mediante mediante eigenvectores. Parte 4

7.3. Gráficas de las soluciones del sistema

Se presentan las gráficas de las soluciones generadas por Octave en el marco de eigenvectores.

Gráficas del número de núcleos en el tiempo para las muestras 1 y 2.Figura 4: Curvas de desintegración de los núcleos N_1 y N_2 generadas por GNU Octave.**Gráficas del número de núcleos en el tiempo para las muestras 3 y 4.**Figura 5: Curvas de desintegración de los núcleos N_3 y N_4 generadas por GNU Octave.

Gráficas del número de núcleos en el tiempo para las muestras 5 y 6.

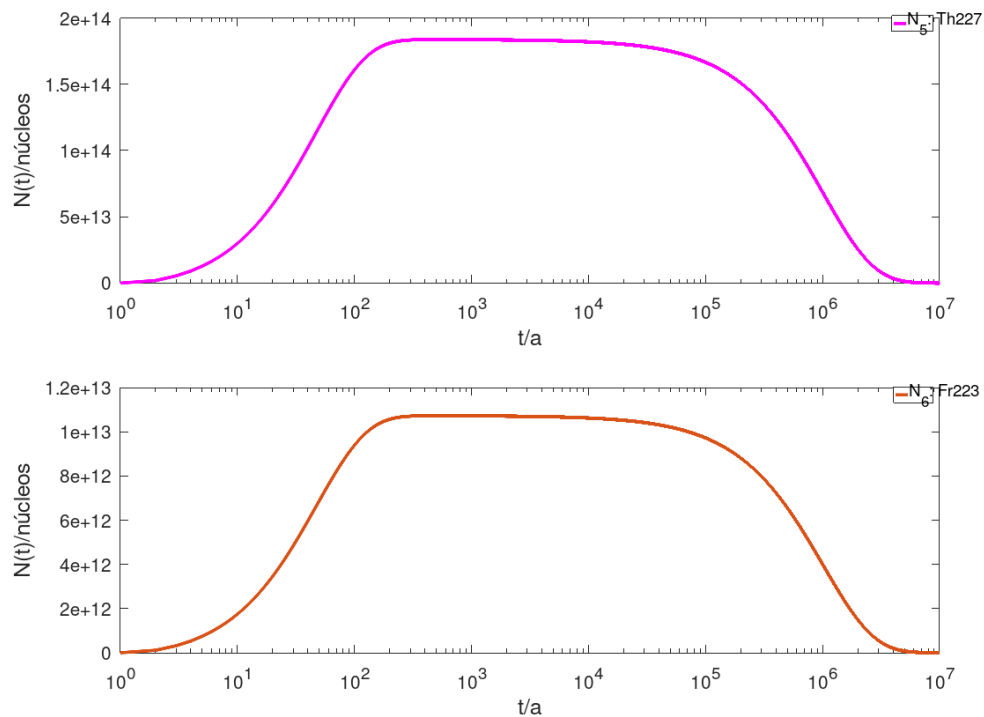


Figura 6: Curvas de desintegración de los núcleos N_5 y N_6 generadas por GNU Octave.

Gráficas del número de núcleos en el tiempo para las muestras 7 y 8.

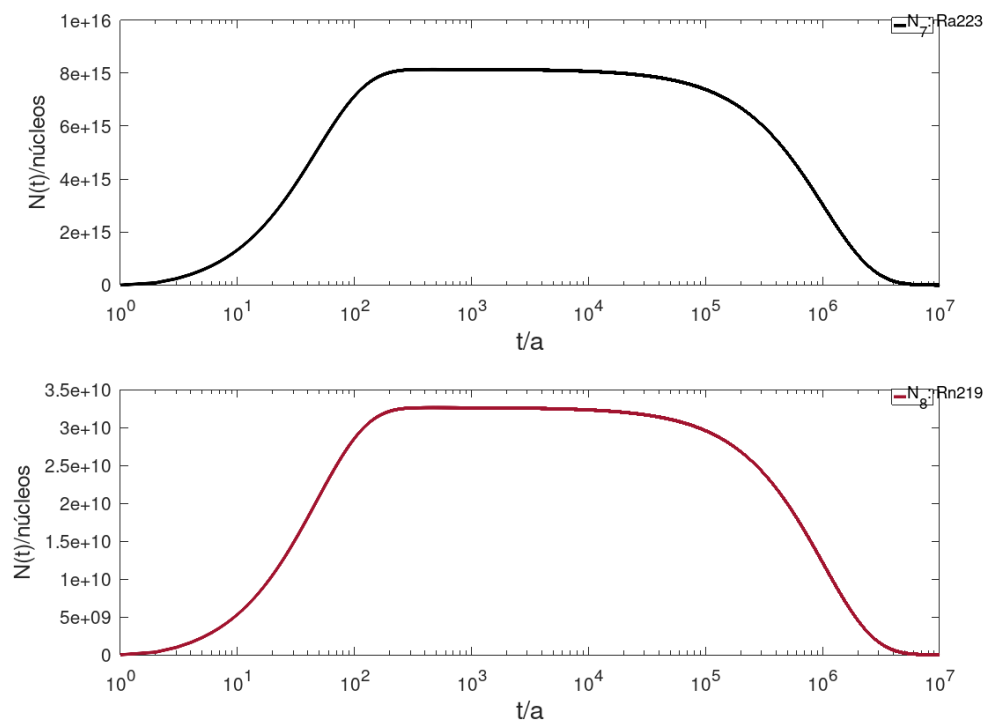
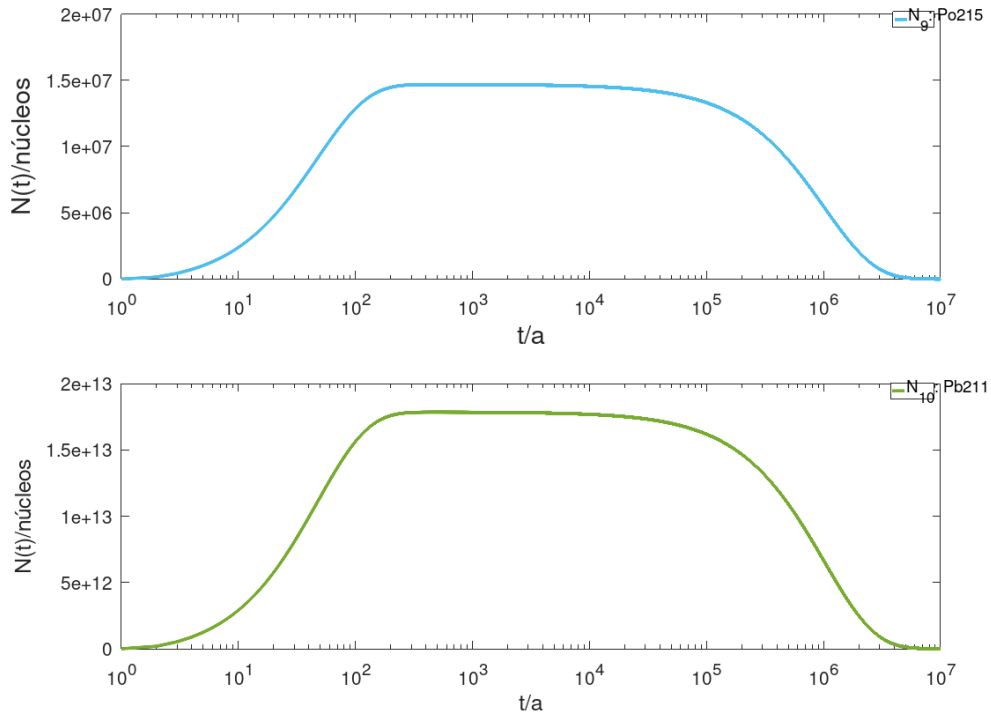
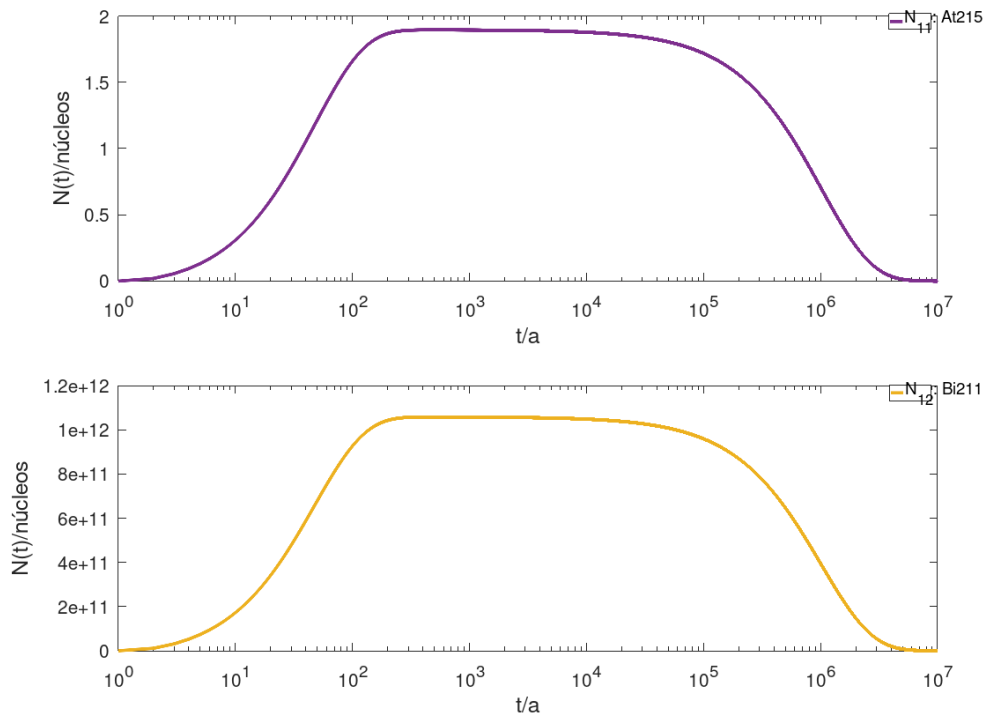


Figura 7: Curvas de desintegración de los núcleos N_7 y N_8 generadas por GNU Octave.

Gráficas del número de núcleos en el tiempo para las muestras 9 y 10.Figura 8: Curvas de desintegración de los núcleos N_9 y N_{10} generadas por GNU Octave.**Gráficas del número de núcleos en el tiempo para las muestras 11 y 12.**Figura 9: Curvas de desintegración de los núcleos N_{11} y N_{12} generadas por GNU Octave.

Gráficas del número de núcleos en el tiempo para las muestras 13 y 14.

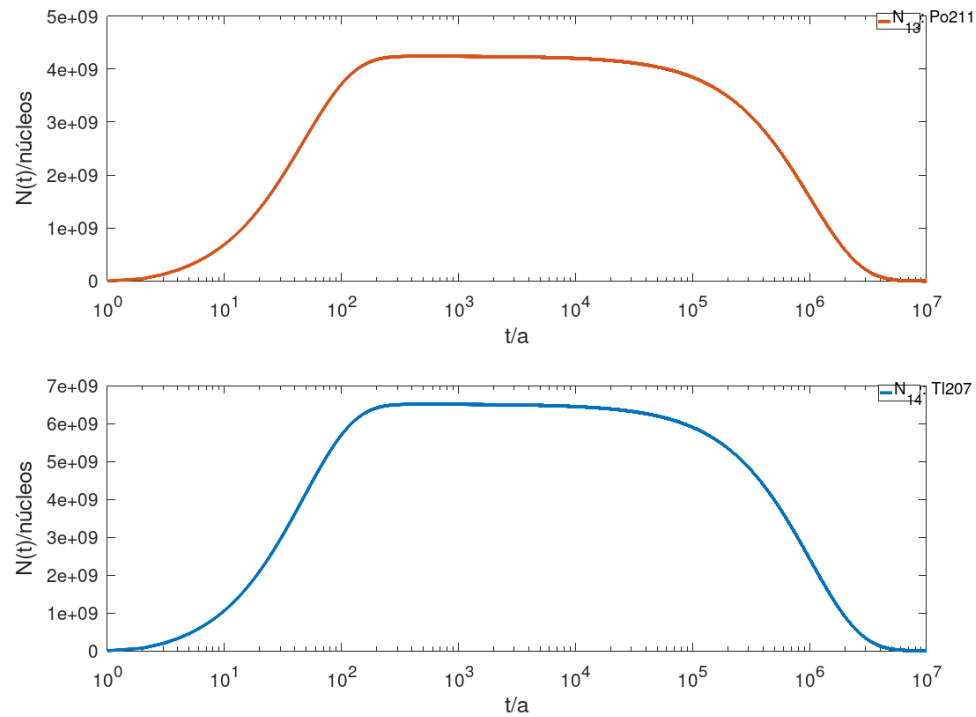


Figura 10: Curvas de desintegración de los núcleos N_{13} y N_{14} generadas por GNU Octave.

Gráficas del número de núcleos en el tiempo para N_{15} : Pb207.

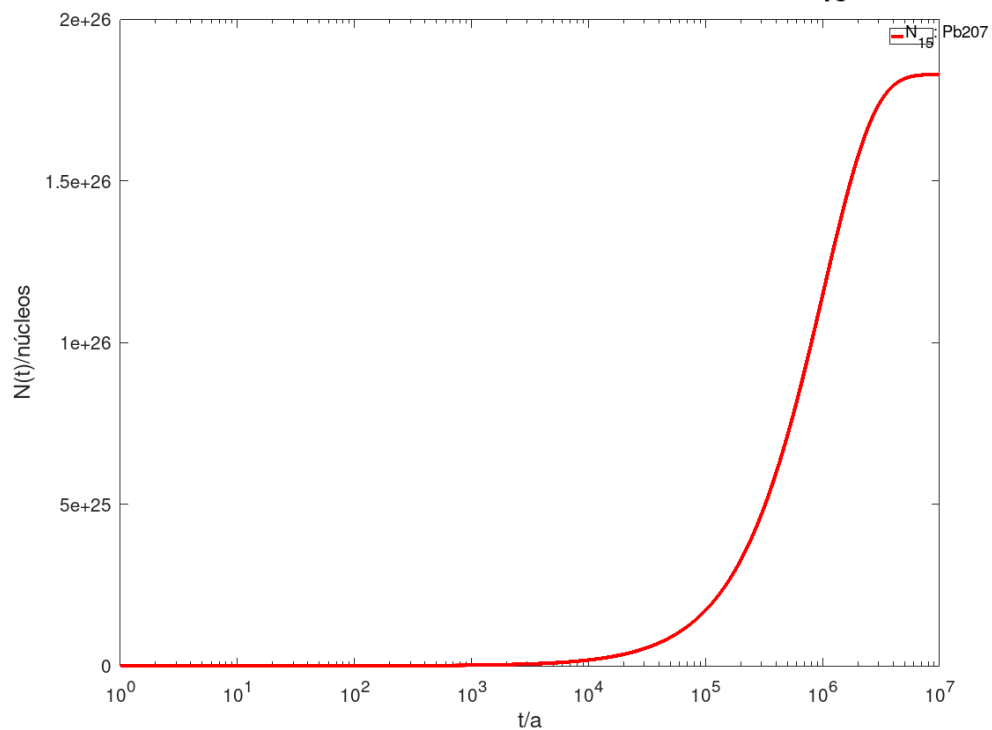


Figura 11: Curva de desintegración del núcleo N_{15} generada por GNU Octave.

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] *An introduction to nuclear physics*. Cambridge and New York: Cambridge University Press, 2nd ed. ed., 2001.
- [3] E. de Sanctis, S. Monti, and M. Ripani, *Energy from nuclear fission: An introduction*. New York NY: Springer Berlin Heidelberg, 2016.
- [4] J. L. Basdevant, J. Rich, and M. Spiro, *Fundamentals in nuclear physics: From nuclear structure to cosmology*. New York: Springer, 2005.
- [5] K. S. Krane and D. Halliday, *Introductory nuclear physics*. New York: Wiley, 3ra. ed., 1987.
- [6] E. B. Podgoršak, *Radiation physics for medical physicists*. New York NY: Springer Berlin Heidelberg, 3ra. ed., 2016.
- [7] 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.
- [8] 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.
- [9] 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.
- [10] 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.
- [11] 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.
- [12] International Atomic Energy Agency, *Measurement and calculation of radon releases from NORM residues*. Technical reports series, Vienna, Austria: IAEA, June 2013.
- [13] A. Das and T. Ferbel, *Introduction to nuclear and particle physics*. New Jersey: World Scientific, 2da. ed., 2009.
- [14] D. Eidemüller, *Nuclear Power Explained*. Cham: Springer International Publishing, 2021.
- [15] B. R. Martin, *Nuclear and particle physics*. Chichester U.K.: Wiley, 2da. ed., 2009.
- [16] R. Meyers and N. Tsoulfanidis, *Nuclear energy*. New York NY: Springer Berlin Heidelberg, 2da. ed., 2018.
- [17] E. F. Serrano, *Manual de introducción a la simulación numérica con GNU Octave*. 2da. ed., 2020.

- [18] 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.
- [19] 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.