

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.

9 de enero de 2025

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 pueden tener lugar espontáneamente o inducirse. Son más energéticas que las reacciones químicas, pero obedecen a las mismas leyes físicas [1]. Las reacciones nucleares caben en dos grupos principales: las de fisión y las de fusión [2, 3, 4, 1].

La fisión nuclear conlleva la ruptura de un núcleo pesado en un sistema de fragmentos más livianos. En este proceso se libera energía al entorno [2, 1, 5].

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

Las reacciones de fusión no son de interés para este estudio.

2. Desintegración radiactiva

Un proceso radiactivo, de acuerdo con [5] y [7], se entiende como el medio por el cual un núcleo atómico se separa en fragmentos más pequeños sin un estímulo externo. Suele identificarse al núcleo original como núcleo padre y sus productos de desintegración como hijos o partículas hijas. 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 desintegren.
2. La tasa de desintegración espontánea de un elemento radiactivo es proporcional al número de núcleos presentes en ese momento.

Matemáticamente, la ley de desintegración radiactiva está dada como:

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

o bien,

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

donde N es el número de átomos presentes en el tiempo t , λ es la constante de desintegración espontánea y dicta una propiedad intrínseca del material independiente de su condición química o física [5, 7]. El signo negativo indica que a medida que el tiempo t pasa el número de núcleos N disminuye. La ecuación 1 puede resolverse mediante variable separable, notando que

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

puede integrarse en

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

donde C es una constante sujeta a las condiciones iniciales en $t = 0$. Debido a esto, se establece que

$$C = \ln(N_0)$$

luego

$$N(t) = N_0 \exp(-\lambda t) \quad (4)$$

2.2. Canales de decaimiento

Siguiendo a [3, 2, 4] los canales de desintegración son los posibles mecanismos en que una partícula puede fraccionarse.

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

- Decaimiento Beta:

El núcleo padre se desintegra para dar un núcleo hijo y una partícula β . Se puede dar de tres maneras, [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 electrónica:** 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 gamma.

La constante de decaimiento da una medida de probabilidad bien definida para la desintegración por unidad de tiempo de un isótopo radiactivo, [5, 7]. 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].

2.3. Desintegración en cadena

Es común que un núcleo inestable produzca hijos inestables que continúan desintegrándose a su propio ritmo, estos procesos reciben el nombre de *reacciones en cadena* o *cadenas de desintegración*.

Los núcleos que componen una reacción en cadena se conocen como una familia radiactiva [5]. Muchas son estudiadas y explotadas con diversos fines [10, 11]. Una de especial interés es la desintegración el uranio-235 o serie del actínido. La causa de esta serie de desintegraciones nucleares se debe a la razón de neutrones sobre protones, explica [16].

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. La probabilidad de desintegración en un cierto canal se llama tasa de ramificación o fracción de ramificación [7, 5, 12, 3].

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]. La cadena de desintegración descrita en el modelo de Bateman comprende las siguientes condiciones iniciales:

$$N_1(t) \Big|_{t=0} = N_1(0) \neq 0, \quad (5)$$

$$N_2(0) = N_3(0) = \dots = N_i(0) = 0, \quad (6)$$

Debido a que la cantidad de núcleos que participan en el proceso de desintegración es tan grande es razonable tomar $N = N(t)$ en 4 como una función continua.

El significado de las ecuaciones 5 y 6 es que en un tiempo inicial $t = 0$ únicamente se dispone de los núcleos del padre, mientras que los productos de fisión son inexistentes. El número de núcleos disponibles en un tiempo t para el k -ésimo producto de fisión viene dado por:

$$N_k(t) = N_1(0) (C_1 e^{-\lambda_1 t} + \dots + C_k e^{-\lambda_k t}) \quad (7)$$

Donde $N_1(0)$ es el número inicial de núcleos de la muestra radiactiva. Existen tablas como las de [13] para calcular los coeficientes C_k en 7. Siguiendo a [14], una generalización compacta para cualquier núcleo en la secuencia está dada como

$$N_m(t) = N_1^{(0)} \prod_{k=1}^{m-1} \lambda_k \sum_{j=1}^m \left(\frac{e^{\lambda_j t}}{\prod_{p=1, p \neq j}^m (\lambda_p - \lambda_j)} \right) \quad (8)$$

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 el sistema requiere de un tratamiento distinto.

En [14] se contempla la dificultad de modelar numéricamente las soluciones de un sistema como 10 - 25 cuando la discrepancia entre los coeficientes de desintegración es tan grande. Este tipo de problemas origina una matriz cuasi-singular y las soluciones se prestan a rigidez.

Los métodos numéricos explícitos pueden ser inviables para resolver estos problemas [14, 18] recomiendan el uso de métodos implícitos en su lugar.

3. Serie del actínido

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. Pero esto deja por fuera la naturaleza estocástica del fenómeno.

El proceso de desintegración del uranio-235 contempla bifurcaciones en varios puntos [12, 17, 15, 14]. Recordando además que la ley de desintegración contempla una medida de probabilidad para cada evento, se propone modelar esta serie radiactiva como un sistema estocástico.

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 1.

3.1. Ecuaciones de Bateman para la serie del actínido

En el esquema determinista la serie del actínido obedece a la siguiente forma de la ley de desintegración radiactiva:

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

$$N_2'(t) = \lambda_1 N_1(t) - \lambda_2 N_2(t) \quad (10)$$

$$N_3'(t) = \lambda_2 N_2(t) - \lambda_3 N_3(t) \quad (11)$$

$$N_4'(t) = \lambda_3 N_3(t) - \lambda_4 N_4(t) \quad (12)$$

$$N_5'(t) = (1 - f_4) \lambda_4 N_4(t) - \lambda_5 N_5(t) \quad (13)$$

$$N_6'(t) = f_4 \lambda_4 N_4(t) - \lambda_6 N_6(t) \quad (14)$$

$$N_7'(t) = \lambda_5 N_5(t) + \lambda_6 N_6(t) - \lambda_7 N_7(t) \quad (15)$$

$$N_8'(t) = \lambda_7 N_7(t) - \lambda_8 N_8(t) \quad (16)$$

$$N_9'(t) = \lambda_8 N_8(t) - \lambda_9 N_9(t) \quad (17)$$

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

$$N_{11}'(t) = (1 - f_9) \lambda_9 N_9(t) - \lambda_{10} N_{11}(t) \quad (19)$$

$$N_{12}'(t) = \lambda_{10} N_{10}(t) + \lambda_{11} N_{11}(t) \quad (20)$$

$$- \lambda_{12} N_{12}(t) \quad (21)$$

$$N_{13}'(t) = (1 - f_{12}) \lambda_{12} N_{12}(t) \quad (22)$$

$$- \lambda_{13} N_{13}(t) \quad (23)$$

$$N_{14}'(t) = f_{12} \lambda_{12} N_{11}(t) - \lambda_{14} N_{14}(t) \quad (24)$$

$$N_{15}'(t) = \lambda_{13} N_{13}(t) + \lambda_{14} N_{14}(t) \quad (25)$$

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 se observa que

- $f_4 = \frac{\lambda_{4,\alpha}}{\lambda_{4,\alpha} + \lambda_{4,\beta}}$, 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 .

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 de datos *NuDat*. La tabla 1 muestra las constantes de decaimiento de cada núcleo en las ecuaciones 10 hasta 25 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 ^{227}Ac , ^{215}Po , y ^{211}Bi . De la definición de razón de fraccionamiento y los registros mencionados en el párrafo anterior, se puede deducir que

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

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

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

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

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

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

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

En la literatura se reportan métodos analíticos para resolver sistemas de ecuaciones como el planteado aquí empleando transformadas de Laplace o exponenciales de matrices [16, 14]. 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

$$\mathbf{N}'(t) = \Lambda \mathbf{N}(t) \quad (26)$$

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 $N_i(t)$. 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 26 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 8, se puede 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 8.

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.

Una manera más eficiente de determinar la forma de los coeficientes de Bateman en este contexto, y que también permite recuperar la forma de los coeficientes en el caso sin ramificaciones, es resolviendo el sistema matricial por eigenvectores.

En este método, luego de hallar los eigenvectores se obtiene una serie de coeficientes de linealización que acompañan a los eigenvectores conformando la solución del sistema. Estas constantes se resumen en la tabla 2.

Multiplicando tales coeficientes con los vectores solución (los eigenvectores) se recuperan los coeficientes de Bateman para esta serie. Se resumen los resultados numéricos 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 de-

fine un sistema de ecuaciones de la forma

$$d\mathbf{N}(t, \omega) = \mathbf{L}(t, \mathbf{N}(t, \omega)) dt + \mathbf{G}(t, \mathbf{N}(t, \omega)) d\mathbf{W}(t, \omega) \quad (27)$$

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

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

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:

$$\begin{aligned} \Delta N_k &= -1 \\ \Delta N_{k+1} &= 1 \\ \Delta N_{k+2} &= 1 \quad \text{para bifurcaciones.} \end{aligned}$$

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 además 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:

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

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:

$$d\mathbf{N} = \mu_t(\mathbf{N}) dt + \sqrt{\Sigma_t(\mathbf{N})} d\mathbf{W}_t \quad (28)$$

y el término $\sqrt{\Sigma_t(\mathbf{N})}$ se puede obtener como una matriz triangular inferior en la factorización LU de la matriz de covarianza $\Sigma_t(\mathbf{N})$.

4. Implementación en GNU Octave

El método de eigenvectores basado en la discusión de [19] se puede aplicar con el algoritmo *listing 1*

Listing 1: Cálculo de las soluciones deterministas mediante eigenvectores

```
IN: Matriz de coeficientes del
    sistema dinamico, M.
    Vector de condiciones
    iniciales, N0.
```

```
[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 5 y 6. Los vectores solución del sistema se almacenan en las columnas del arreglo S .

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 28 de acuerdo con la discusión en [22] y [18] de la siguiente manera:

$$\mathbf{N}_{t+1} = (\mathbf{I} + \Lambda \Delta t) \mathbf{N}_t + \Sigma_t^{\frac{1}{2}}(\Delta \mathbf{W}_t) \quad (29)$$

la cual se conoce como método de Euler-Maruyama explícito, una forma implícita más favorable computacionalmente para problemas rígidos es la ecuación 30

$$\mathbf{N}_{t+1} = (\mathbf{I} - \Lambda \Delta t)^{-1} \left[\mathbf{N}_t + \Sigma_t^{\frac{1}{2}}(\Delta \mathbf{W}_t) \right] \quad (30)$$

La computación de las soluciones del sistema se concreta a través del algoritmo en *listing 2*; las condiciones iniciales deben formar parte de \mathbf{N} como su primer vector columna, y los ruidos $d\mathbf{W}$ deben inicializarse como vectores nulos para que al arrancar la simulación, todas las trayectorias inicien en el mismo punto.

Listing 2: Código para obtener el número de núcleos remanente/acumulado de un radionúclido

```
IN: Condiciones iniciales para cada
    simulacion, N0 en todas;
    Ruido blanco para cada
```

```

simulacion , (dW1, dW2, ...);
Numero de iteraciones , m;
Matriz de coeficientes , M;
Longitud de paso , dt
Matriz de transiciones , dN.
OUT: Vectores del numero de nucleos
      para cada simulacion
      (N, N2, N3, ...)

for i = 1:m
    for k = 1:15
        P(k) = M(k, k)*N(k, i)*dt;
    end
    %repetir para P2, P3,..

    St = zeros(15, 15);
    for k = 1:15
        St = St + P(k)*dN(:,k)*dN(:,k)';
    end
    %repetir para St2, St3, ...

    [st, X]= lu(St);
    st = sqrt(dt)*st;
    %repetir para st2, st3, ...

```

```

N(:, i + 1) = pinv(eye(15) - dt*M)*
              (N(:, i) + st*dW);
dW = sqrt(dt)*rand(15, 1);
%repetir para N2, N3, ... con
%dW2, dW3, ...
end

```

Las soluciones obtenidas por este método están representadas en las gráficas 10 hasta 18. Donde, además, la última muestra una comparación de algunas soluciones estocásticas con su contraparte determinista.

Una manera de estimar la discrepancia entre las simulaciones estocásticas con las deterministas es evaluar el error absoluto entre las simulaciones para cada núcleo uno a uno.

4.3. Monte Carlo

5. Análisis y discusión de los resultados

6. Conclusiones

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:

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:

9

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	$\tau_{1/2}$	$\lambda \text{ (a}^{-1}\text{)}$
^{235}U	$7.04 \times 10^8 \text{ a}$	9.846×10^{-10}
^{231}Th	25.52 h	1.786×10^{-3}
^{231}Pa	$3.276 \times 10^4 \text{ a}$	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	$1.781 \times 10^{-3} \text{ s}$	1.227×10^{10}
^{211}Pb	36.1 min	1.009×10^4
^{215}At	$0.10 \times 10^{-3} \text{ s}$	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	∞	0.0000

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
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 26 bajo la condición inicial, ecuaciones 5 y 6.

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.

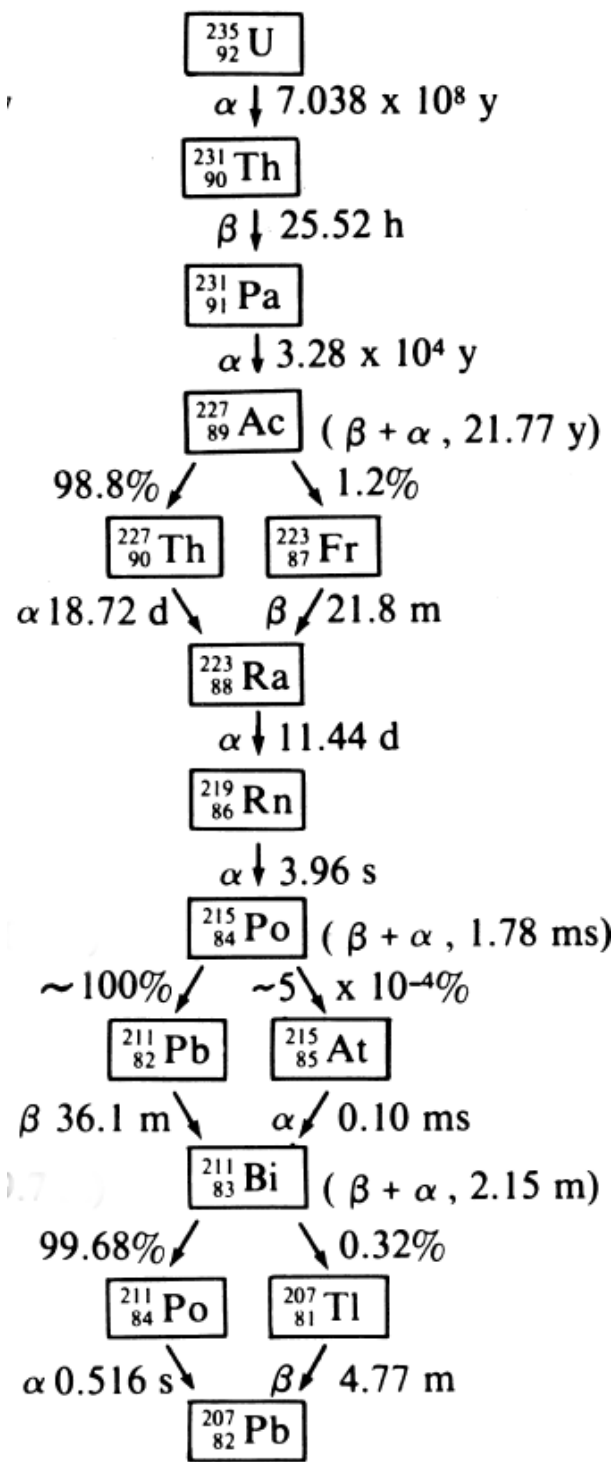
N_i	C_6^*	C_7^*	C_8^*	C_9^*	C_{10}^*
N_1	0	0	0	0	0
N_2	0	0	0	0	0
N_3	0	0	0	0	0
N_4	0	0	0	0	0
N_5	4.8886×10^{-25}	0	0	0	0
N_6	0	0	0	0	0
N_7	7.6910×10^{-25}	4.7861×10^{-24}	0	0	0
N_8	3.0834×10^{-30}	1.9188×10^{-29}	1.9032×10^{-32}	0	0
N_9	1.3871×10^{-33}	8.6322×10^{-33}	8.5660×10^{-36}	-2.8847×10^{-35}	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: Cadena de desintegración del U^{235} hasta Pb^{207} . Tomada de [12].

7.4. Gráficas de las soluciones del sistema determinista

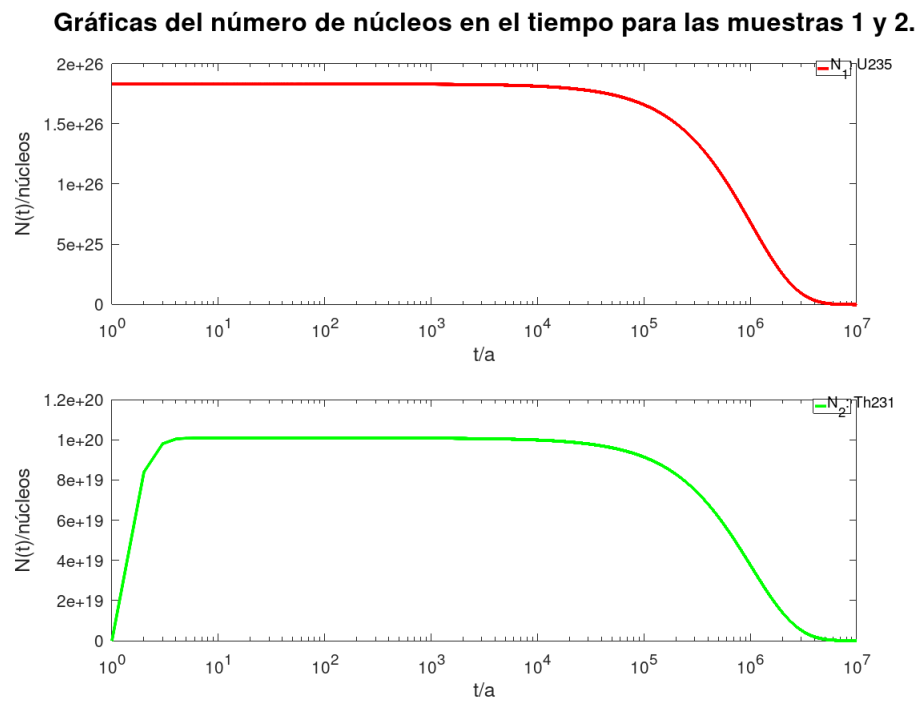


Figura 2: Curvas de desintegración de los núcleos N_1 y N_2 generadas por GNU Octave.

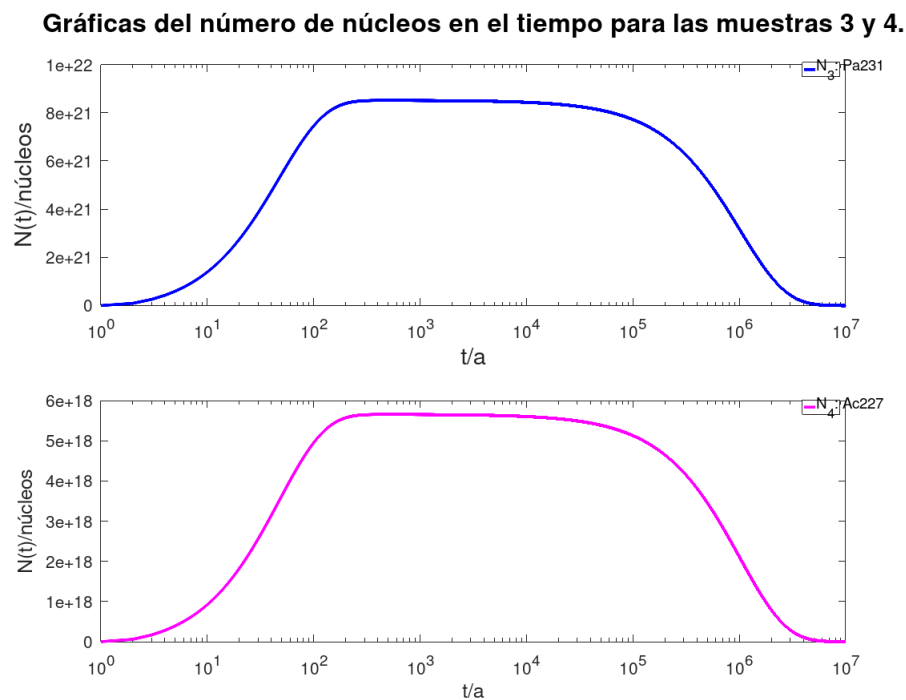


Figura 3: Curvas de desintegración de los núcleos N_3 y N_4 generadas por GNU Octave.

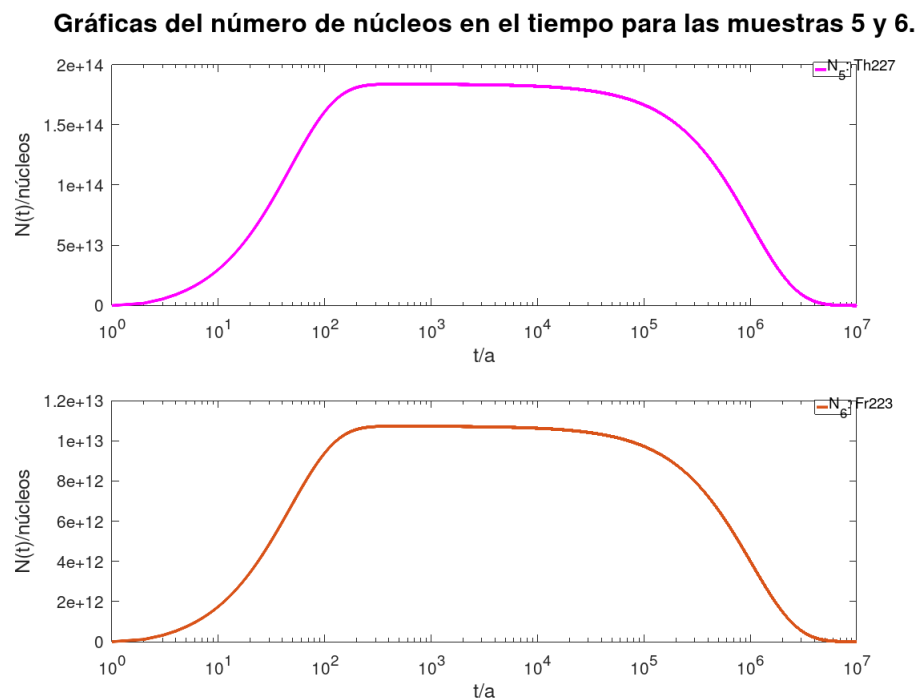


Figura 4: Curvas de desintegración de los núcleos N_5 y N_6 generadas por GNU Octave.

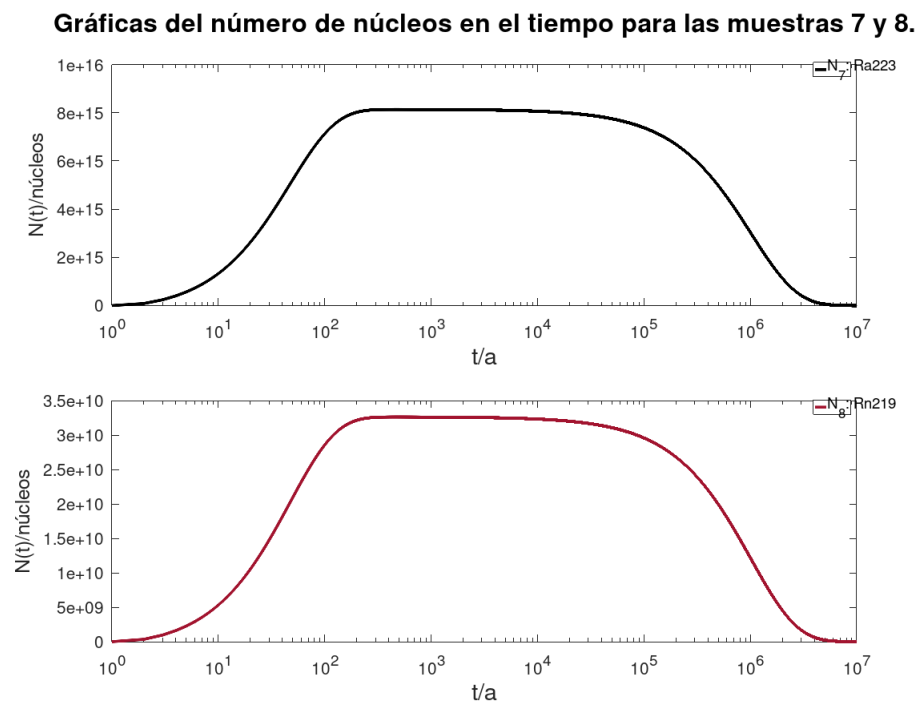


Figura 5: Curvas de desintegración de los núcleos N_7 y N_8 generadas por GNU Octave.

Gráficas del número de núcleos en el tiempo para las muestras 9 y 10.

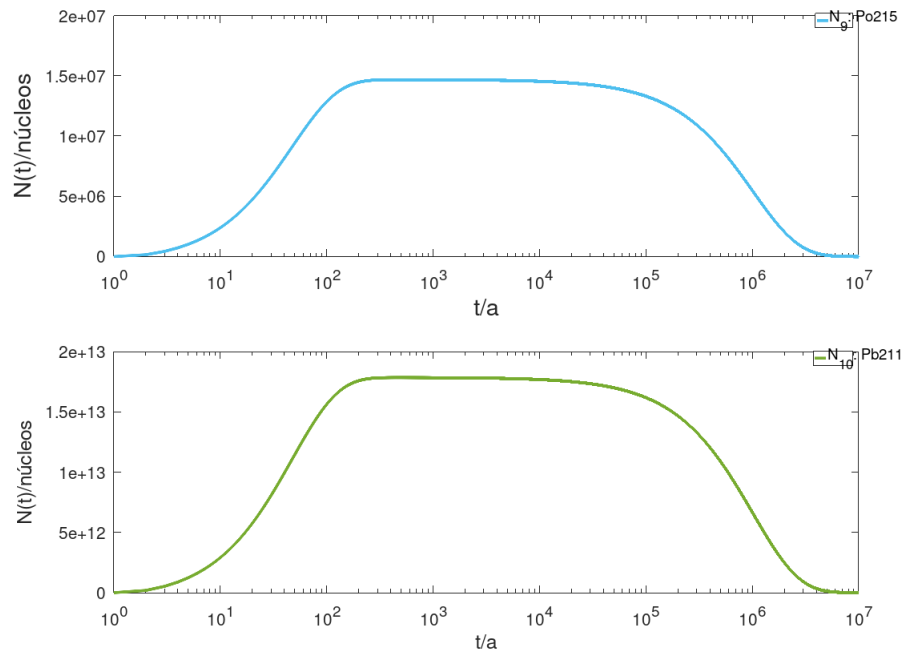


Figura 6: Curvas de desintegración de los núcleos N_9 y N_{10} generadas por GNU Octave.

Gráficas del número de núcleos en el tiempo para las muestras 11 y 12.

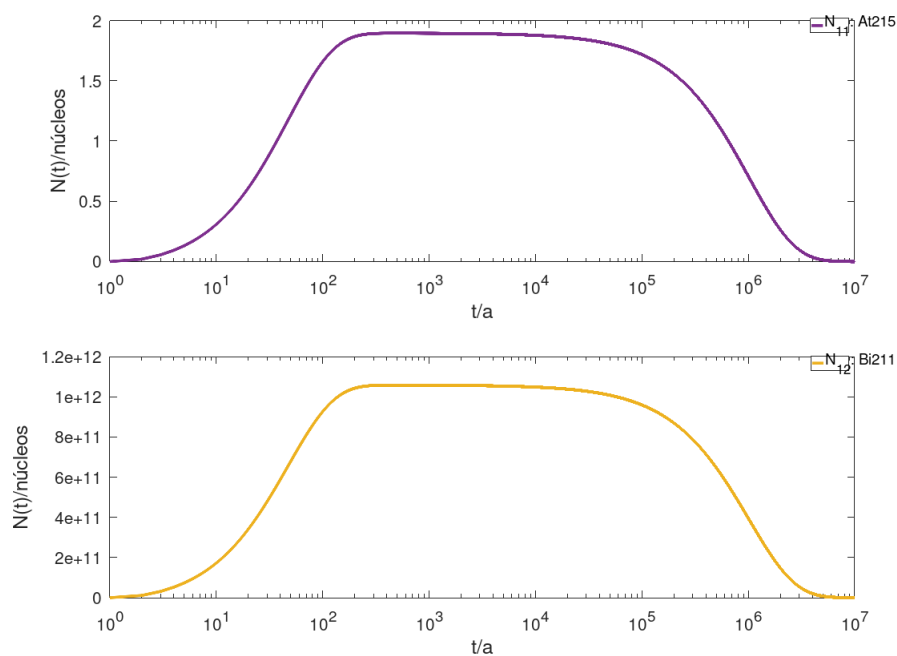


Figura 7: Curvas de desintegración de los núcleos N_{11} y N_{12} generadas por GNU Octave.

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

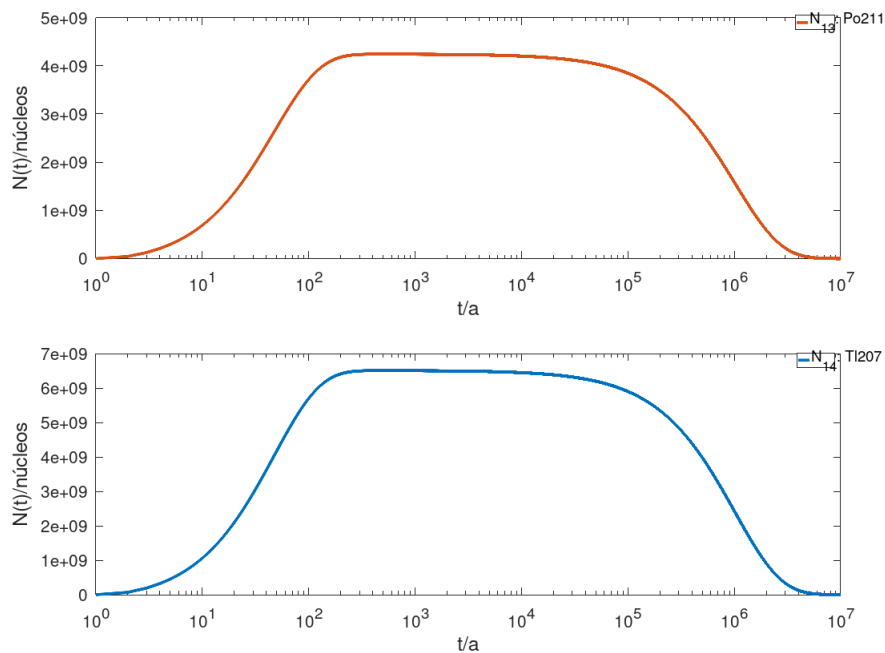


Figura 8: Curvas de desintegración de los núcleos N_{13} y N_{14} generadas por GNU Octave.

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

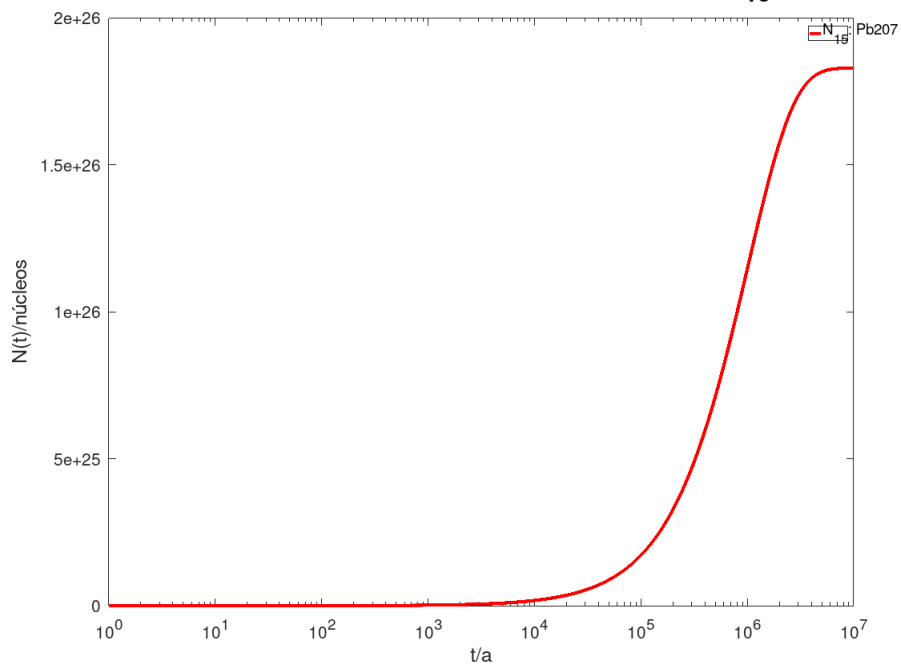


Figura 9: Curva de desintegración del núcleo N_{15} generada por GNU Octave.

7.5. Gráficas de las soluciones del sistema estocástico

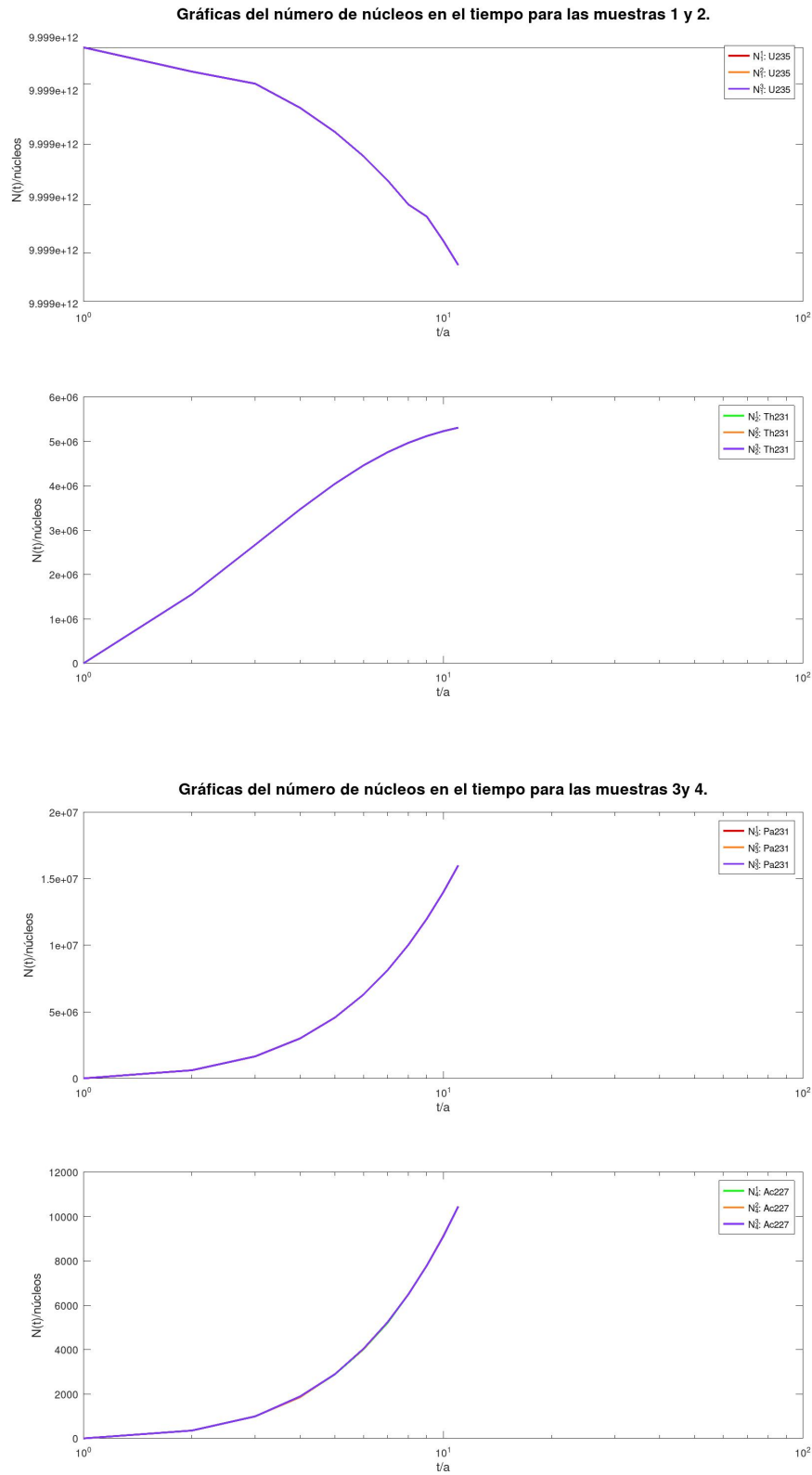


Figura 10: Desintegración de los núcleos N_1 y N_2 , N_3 y N_4 con Euler-Maruyama implícito sobre 10 pasos de 200 años.

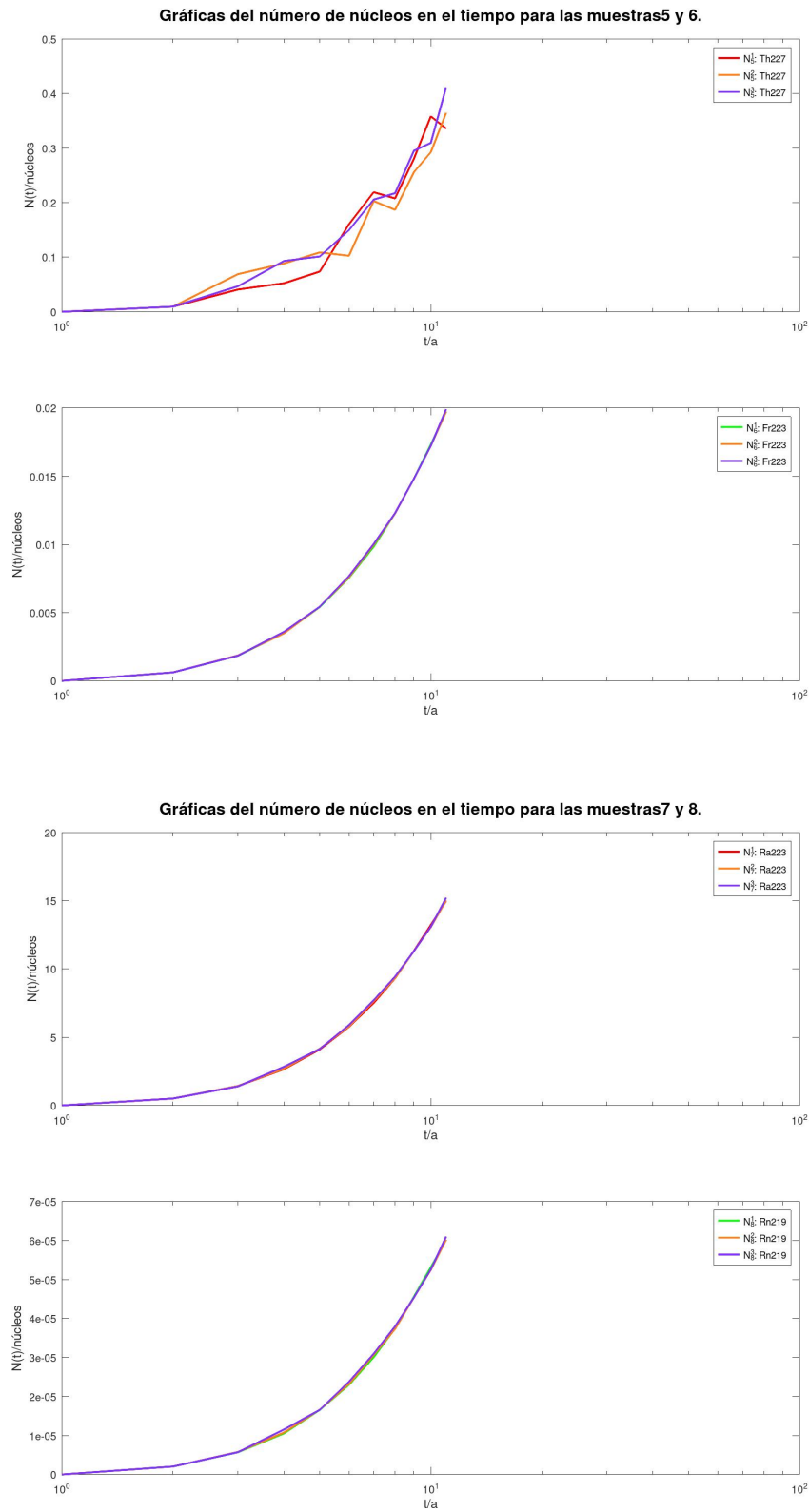


Figura 11: Desintegración de los núcleos N_5 y N_6 , N_7 y N_8 con Euler-Maruyama implícito sobre 10 pasos de 200 años.

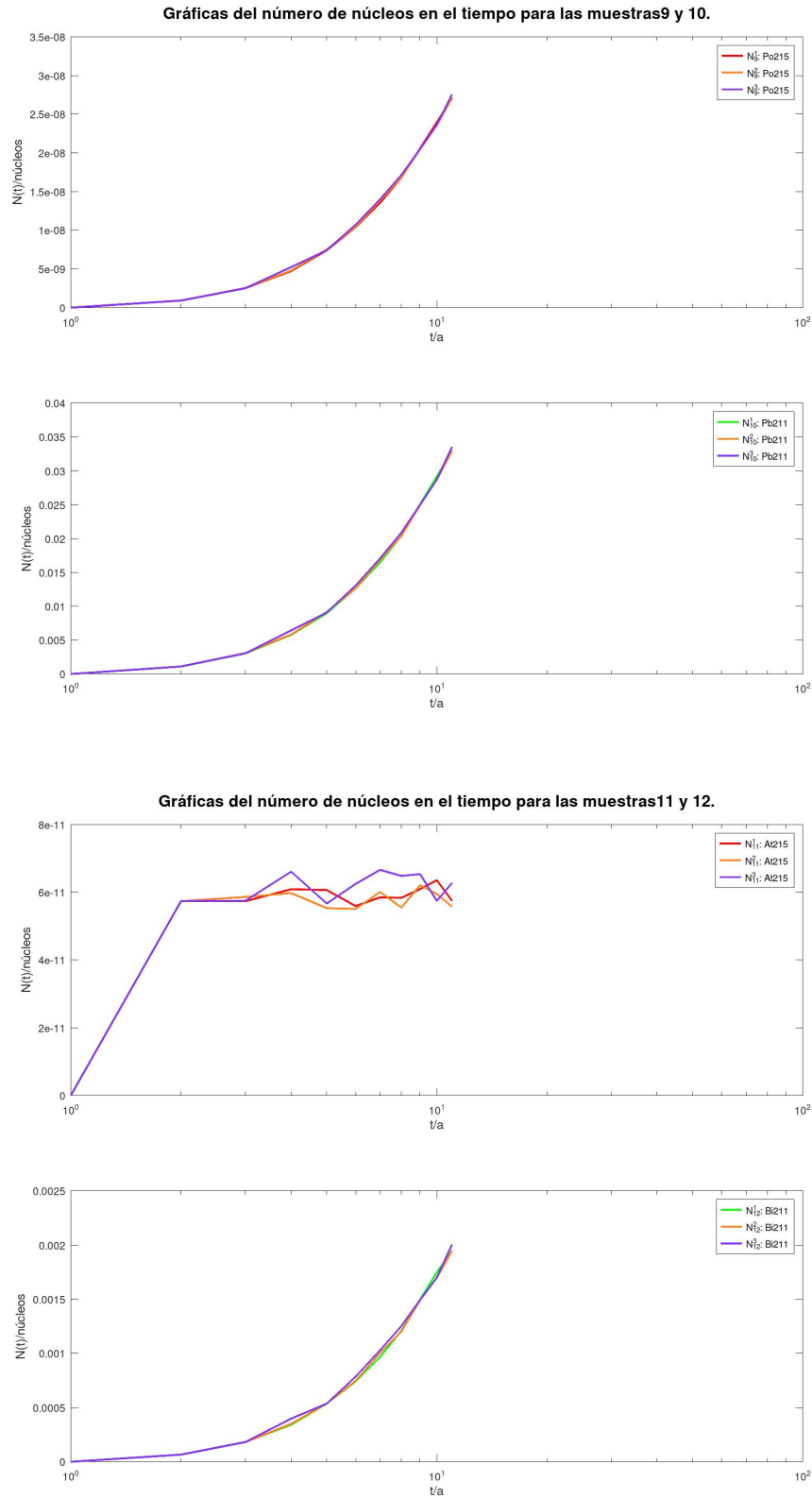


Figura 12: Curvas de desintegración de los núcleos N_9 y N_{10} , N_{11} y N_{12} generadas por GNU Octave con Euler-Maruyama implícito sobre 10 pasos de 200 años.

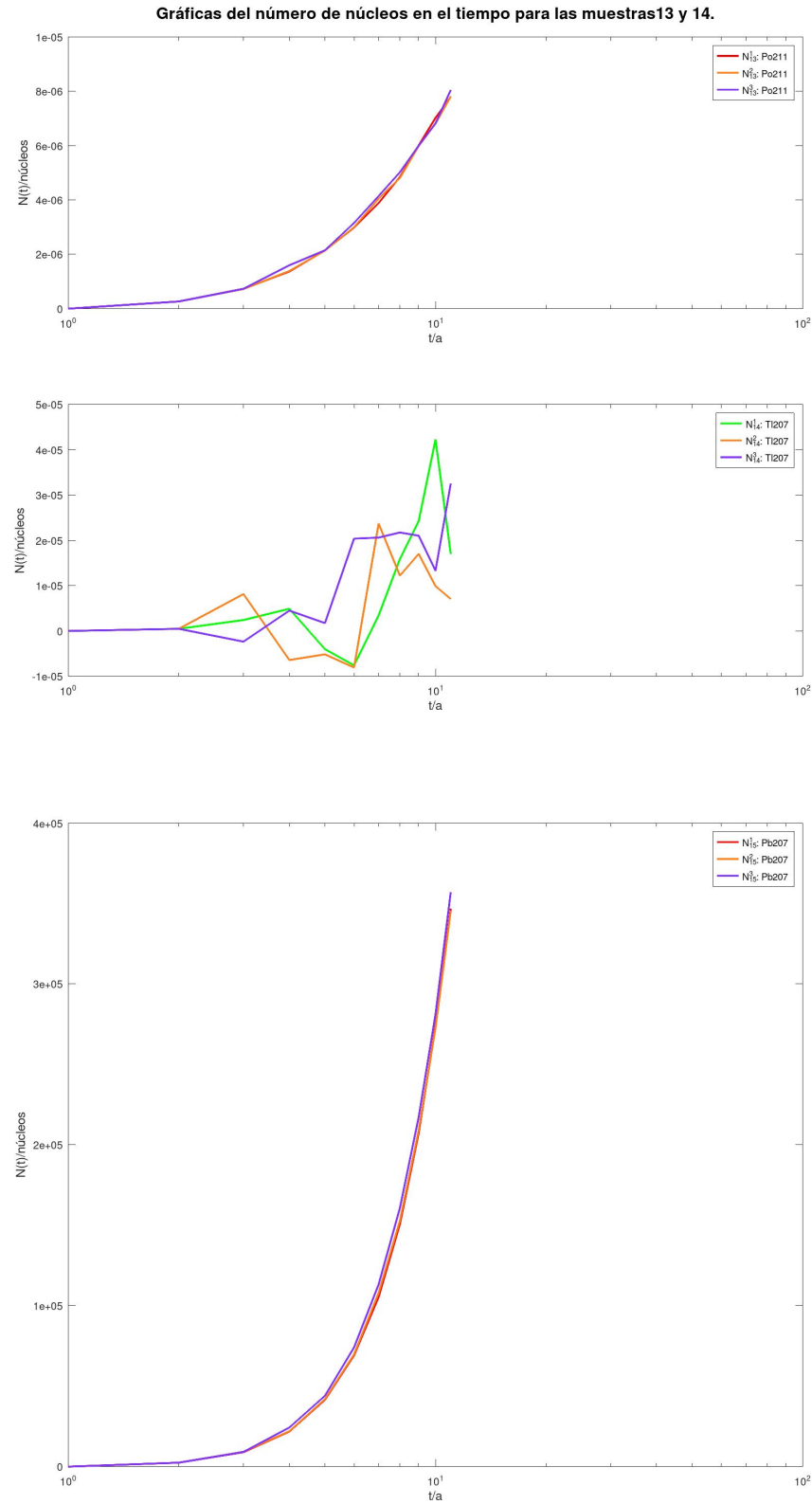


Figura 13: Curvas de desintegración de los núcleos N_{13} , N_{14} y N_{15} generadas por GNU Octave con Euler-Maruyama implícito sobre 10 pasos de 200 años.

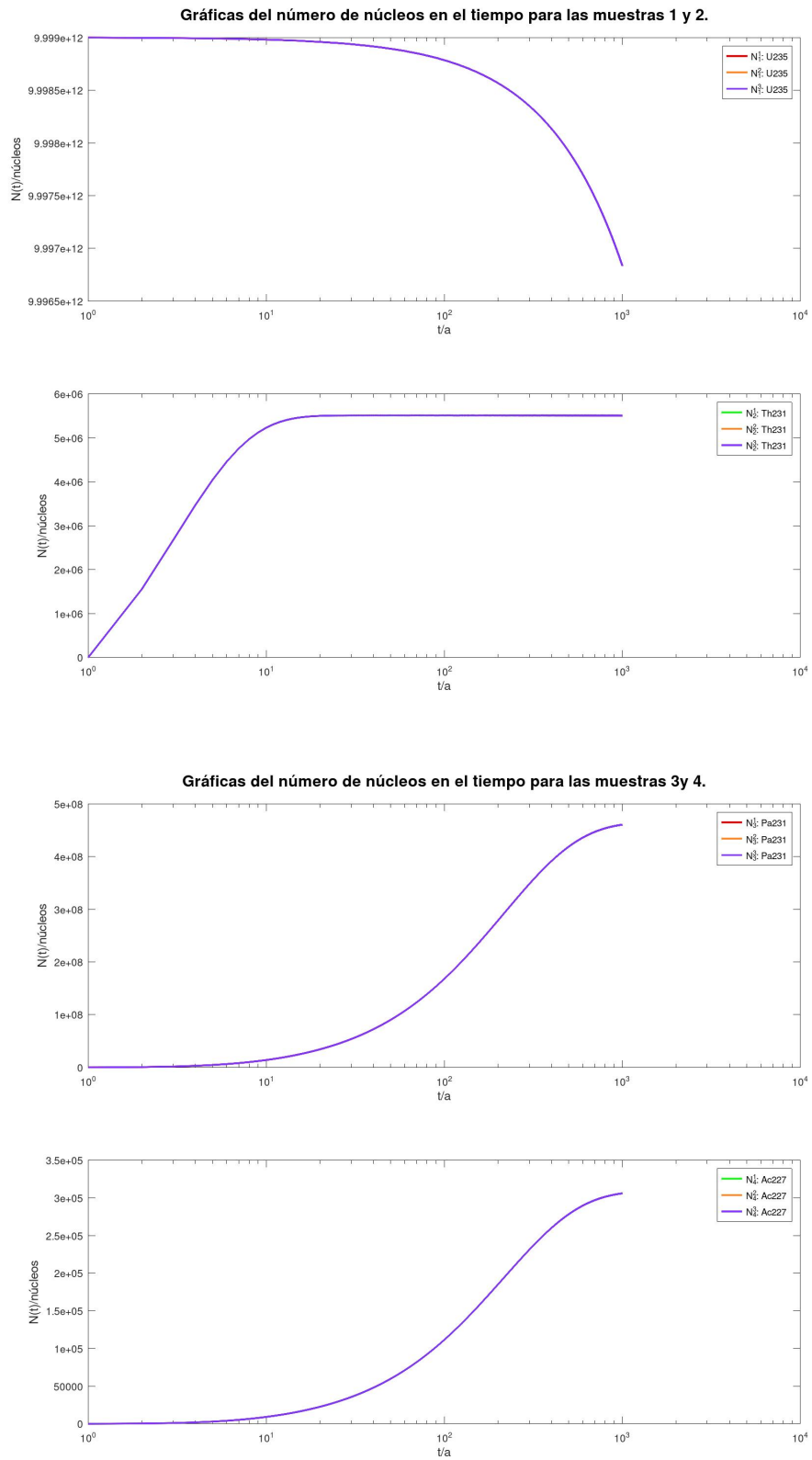


Figura 14: Curvas de desintegración de los núcleos N_1 y N_2 , N_3 y N_4 generadas por GNU Octave con Euler-Maruyama implícito sobre 1000 pasos de 200 años.

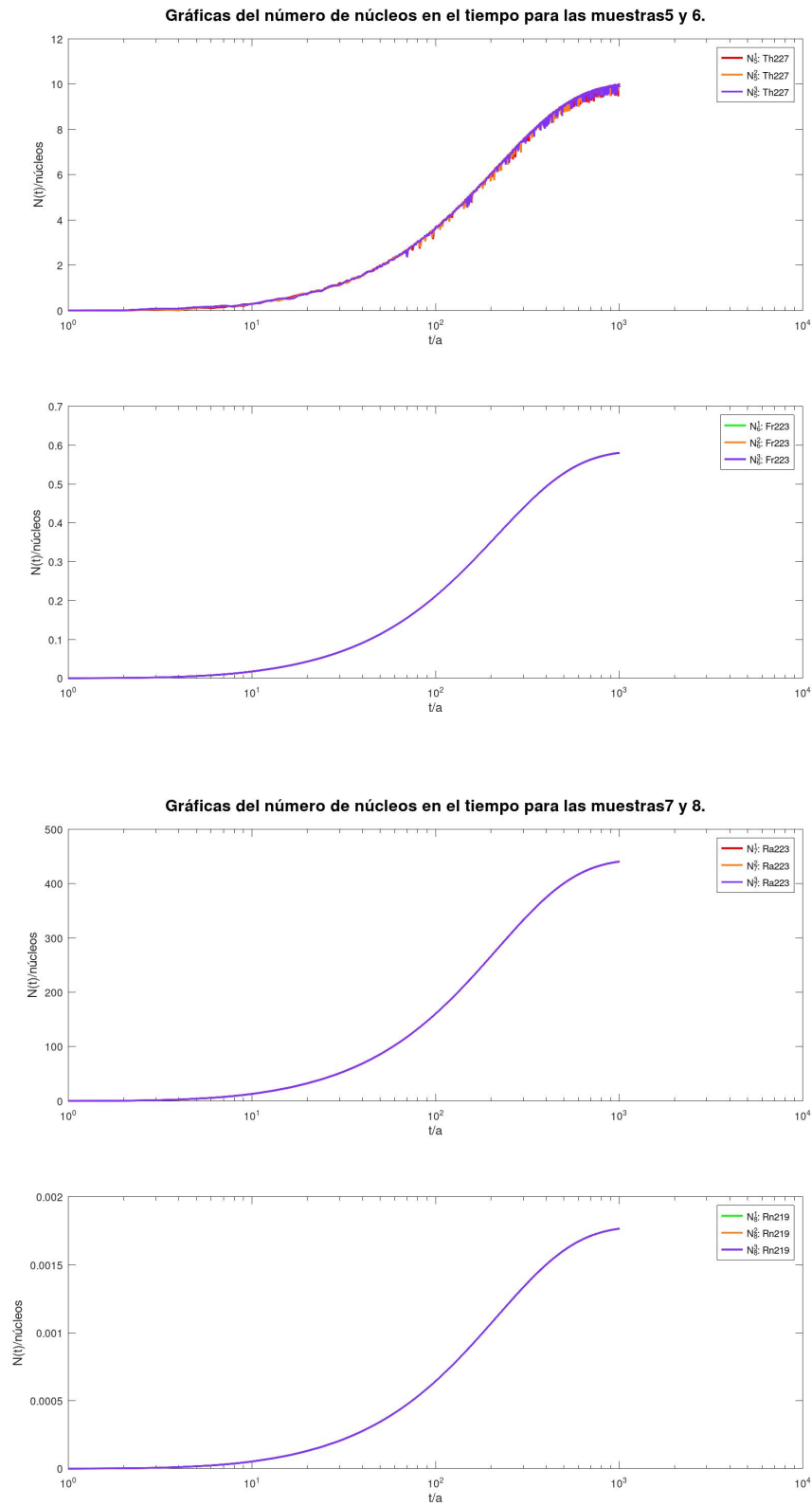


Figura 15: Curvas de desintegración de los núcleos N_5 y N_6 , N_7 y N_8 generadas por GNU Octave con Euler-Maruyama implícito sobre 1000 pasos de 200 años.

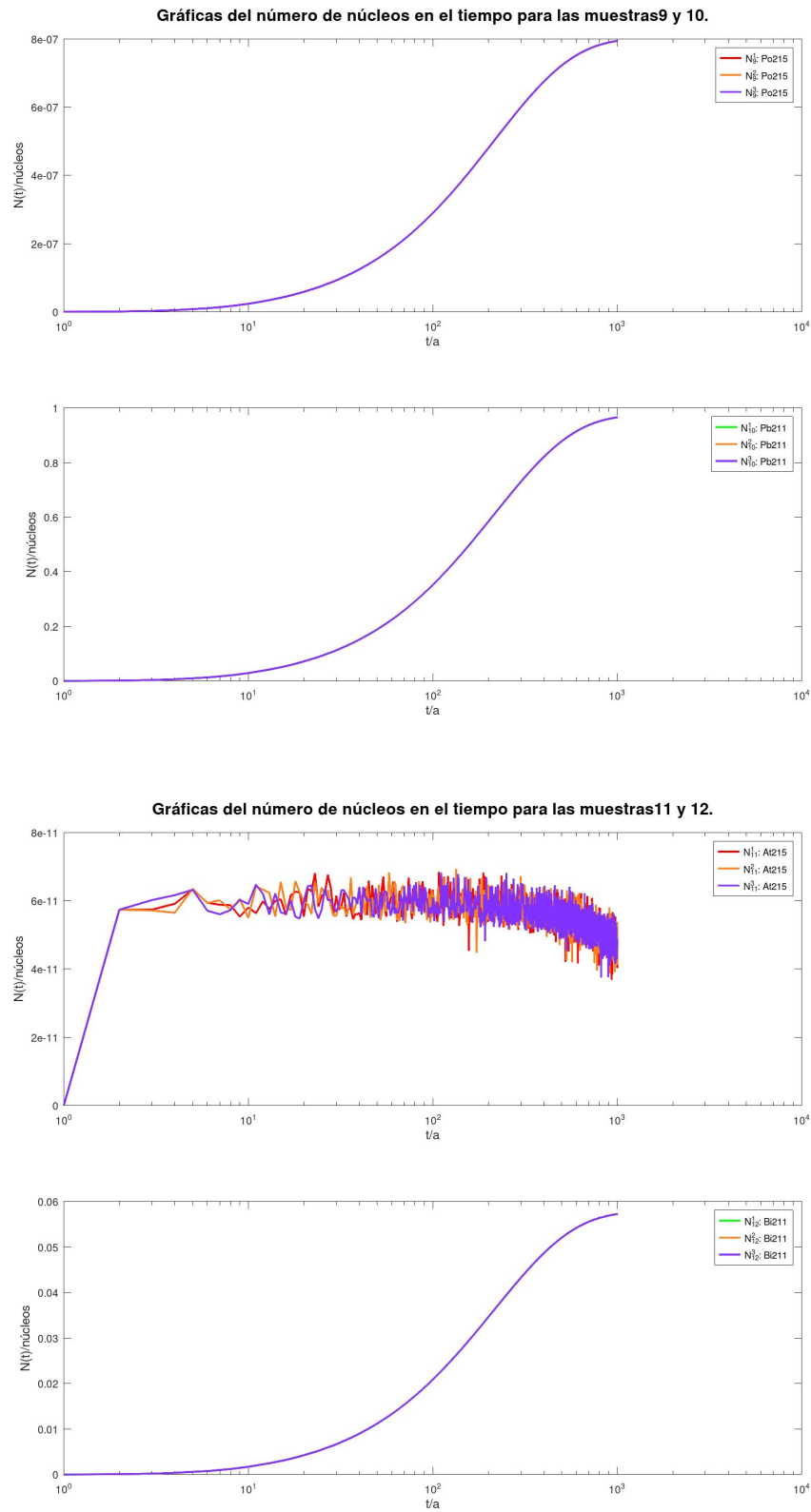


Figura 16: Curvas de desintegración de los núcleos N_9 y N_{10} , N_{11} y N_{12} generadas por GNU Octave con Euler-Maruyama implícito sobre 1000 pasos de 200 años.

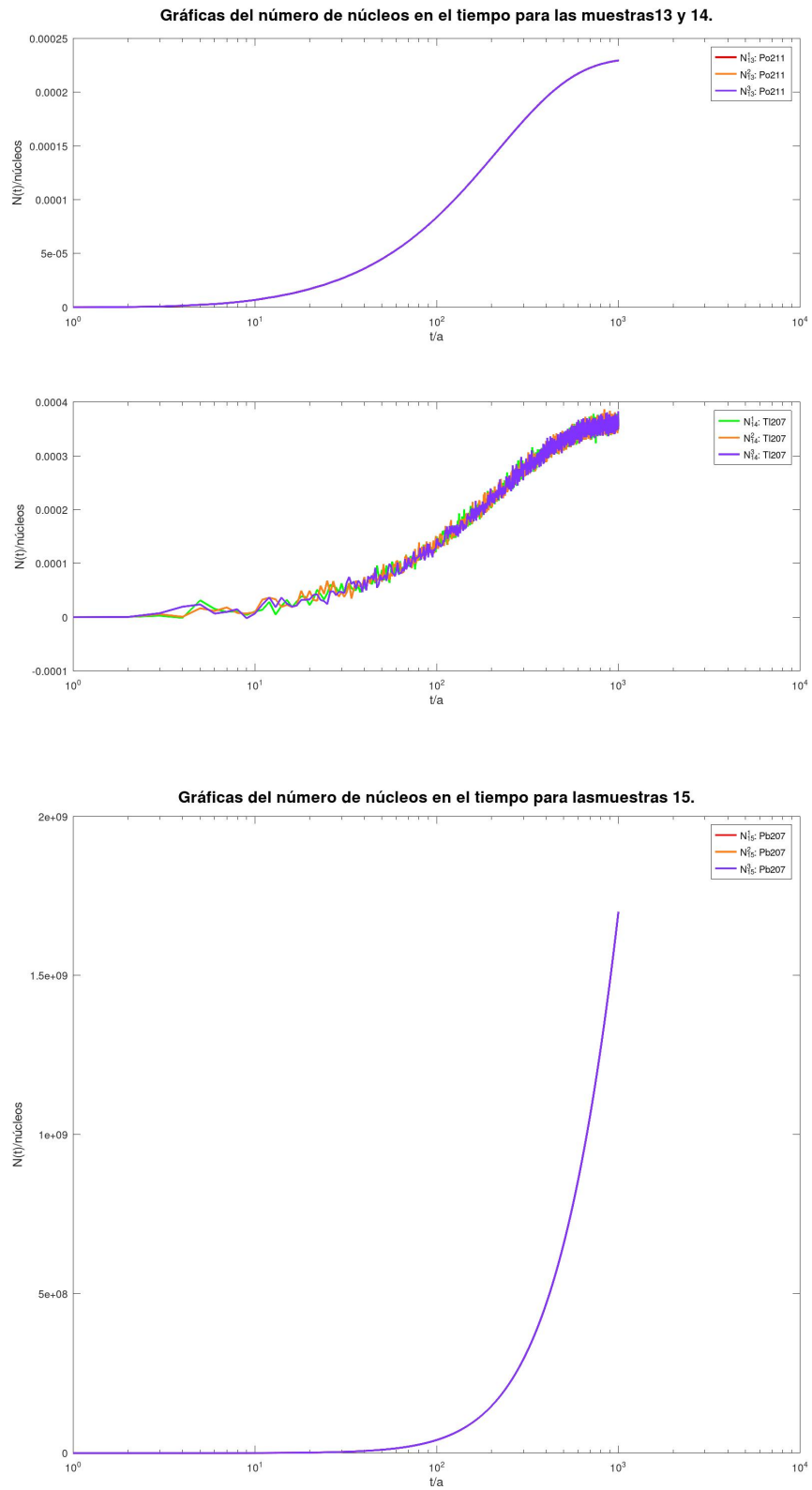


Figura 17: Desintegración de los núcleos N_{13} , N_{14} y N_{15} con Euler-Maruyama implícito sobre 1000 pasos de 200 años.

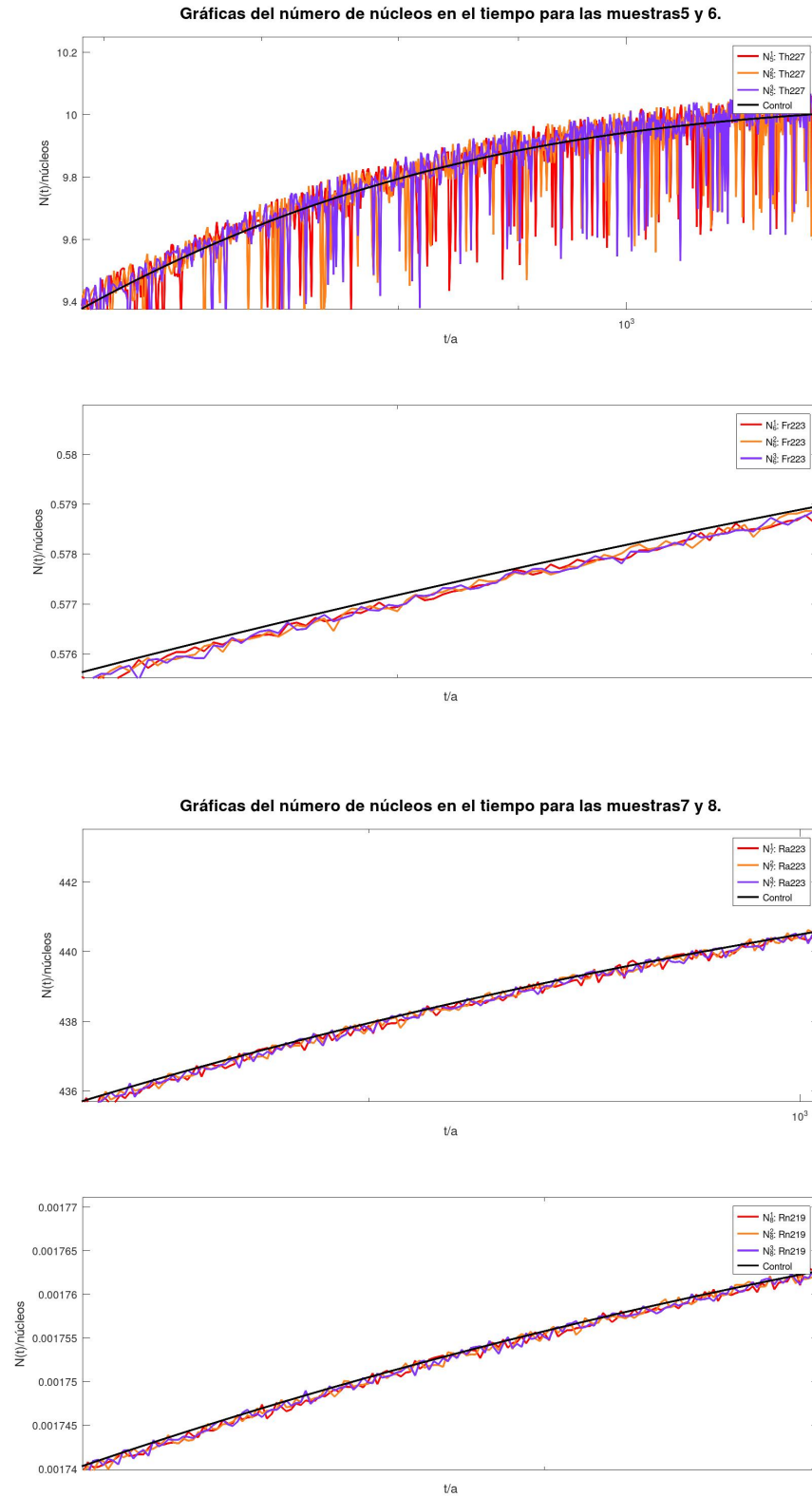


Figura 18: Desintegración de los núcleos N_5 , N_6 y N_7 y N_7 con Euler-Maruyama implícito sobre 10000 pasos de 200 años comparados con respecto a las curvas deterministas correspondientes.

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.