



CARTA DE AUTORIZACIÓN

CÓDIGO

AP-BIB-FO-06

VERSIÓN

1

VIGENCIA

2014

PÁGINA

1 de 1

Neiva, 29 de Abril de 2019

Señores

CENTRO DE INFORMACIÓN Y DOCUMENTACIÓN

UNIVERSIDAD SURCOLOMBIANA

Ciudad

El (Los) suscrito(s):

Nathaly Roa Motta, con C.C. No. 1053837938 autor(es) de la tesis y/o trabajo de grado o titulado "Cálculo numérico de la densidad de neutrones por el método de Runge-Kutta estocástico" presentado y aprobado en el año 2019 como requisito para optar al título de Físico;

Autorizo (amos) al CENTRO DE INFORMACIÓN Y DOCUMENTACIÓN de la Universidad Surcolombiana para que con fines académicos, muestre al país y el exterior la producción intelectual de la Universidad Surcolombiana, a través de la visibilidad de su contenido de la siguiente manera:

- Los usuarios puedan consultar el contenido de este trabajo de grado en los sitios web que administra la Universidad, en bases de datos, repositorio digital, catálogos y en otros sitios web, redes y sistemas de información nacionales e internacionales "open access" y en las redes de información con las cuales tenga convenio la Institución.
- Permita la consulta, la reproducción y préstamo a los usuarios interesados en el contenido de este trabajo, para todos los usos que tengan finalidad académica, ya sea en formato Cd-Rom o digital desde internet, intranet, etc., y en general para cualquier formato conocido o por conocer, dentro de los términos establecidos en la Ley 23 de 1982, Ley 44 de 1993, Decisión Andina 351 de 1993, Decreto 460 de 1995 y demás normas generales sobre la materia.
- Continúo conservando los correspondientes derechos sin modificación o restricción alguna; puesto que de acuerdo con la legislación colombiana aplicable, el presente es un acuerdo jurídico que en ningún caso conlleva la enajenación del derecho de autor y sus conexos.

De conformidad con lo establecido en el artículo 30 de la Ley 23 de 1982 y el artículo 11 de la Decisión Andina 351 de 1993, "Los derechos morales sobre el trabajo son propiedad de los autores", los cuales son irrenunciables, imprescriptibles, inembargables e inalienables.

EL AUTOR/ESTUDIANTE:

Firma:

Nathaly Roa Motta.

Vigilada Mineducación



TÍTULO COMPLETO DEL TRABAJO: Cálculo numérico de la densidad de neutrones por el método de Runge-Kutta estocástico.

AUTOR O AUTORES:

Primero y Segundo Apellido	Primero y Segundo Nombre
Roa Motta	Nathaly

DIRECTOR Y CODIRECTOR TESIS:

Primero y Segundo Apellido	Primero y Segundo Nombre
Suescún Díaz	Daniél

ASESOR (ES):

Primero y Segundo Apellido	Primero y Segundo Nombre
Suescún Díaz	Daniél

PARA OPTAR AL TÍTULO DE: Físico

FACULTAD: Ciencias Exactas y Naturales

PROGRAMA O POSGRADO: Física

CIUDAD: Neiva
PÁGINAS: 56

AÑO DE PRESENTACIÓN: 2019

NÚMERO DE

TIPO DE ILUSTRACIONES (Marcar con una X):

Diagramas___ Fotografías___ Grabaciones en discos___ Ilustraciones en general X
Grabados___ Láminas___ Litografías___ Mapas___ Música impresa___ Planos___
Retratos___ Sin ilustraciones___ Tablas o Cuadros X



SOFTWARE:

MATERIAL ANEXO:

PREMIO O DISTINCIÓN:

PALABRAS CLAVES EN ESPAÑOL E INGLÉS:

Español

1. Densidad de neutrones
2. Ecuaciones diferenciales de Itô
3. Ecuaciones estocásticas de la cinética puntual
4. Método de Runge-Kutta estocástico
5. Precursores de neutrones retardados

Inglés

- Neutron density
Itô differential equations
Stochastic point kinetics equations
Stochastic Runge-Kutta method
Delayed neutron precursor

RESUMEN DEL CONTENIDO:

El comportamiento de un reactor nuclear es de naturaleza estocástica y se modela con un sistema de ecuaciones diferenciales estocásticas de Itô, con el objetivo de resolver las ecuaciones diferenciales estocásticas de la cinética puntual, este trabajo describe e implementa el método numérico de Runge-Kutta estocástico orden dos y orden tres. Se calcula la media y la varianza de las poblaciones de neutrones y de los precursores de neutrones retardados del modelo estocástico para diferentes formas de reactividad: constante, lineal y sinusoidal. Una de las ventajas importantes de los métodos propuestos es que necesita desarrollar pocas derivadas de las funciones aleatorias a diferencia de otros métodos reportados en la literatura, otra ventaja es el bajo costo computacional debido a que los métodos no requieren el cálculo de la raíz cuadrada de la matriz de covarianza. Los



resultados numéricos obtenidos con el método de Runge-Kutta estocástico orden dos y orden tres indican que los métodos son eficientes y precisos para los casos de reactividad constante y sinusoidal, sin embargo, de los métodos propuestos el método de Runge-Kutta estocástico orden tres es el de mejor precisión.

ABSTRACT:

The behavior of a nuclear reactor has stochastic nature and is modeled with a system of stochastic differential equations of Itô; with the aim of solving the stochastic differential equations of point kinetics, this work describes and implements the numerical method of stochastic Runge-Kutta order two and order three. The mean and the variance of the neutron and delayed neutron precursor populations of the stochastic model are calculated for different forms of reactivity: constant, linear and sinusoidal. One of the important advantages of the proposed methods is that they need to develop few derivatives of the random functions unlike other methods reported in the literature, another advantage is the low computational cost because the methods do not require the calculation of the square root of the covariance matrix. The numerical results obtained with the method of Runge-Kutta stochastic order two and order three shows that the methods are efficient and accurate for cases of constant and sinusoidal reactivity, however, of all the proposed methods, Runge-Kutta stochastic order three method is the one with best accuracy.

APROBACION DE LA TESIS

Nombre Presidente Jurado: Ana Lilia Bernal Esteban.

Firma:



DESCRIPCIÓN DE LA TESIS Y/O TRABAJOS DE GRADO

CÓDIGO	AP-BIB-FO-07	VERSIÓN	1	VIGENCIA	2014	PÁGINA	4 de 4
---------------	---------------------	----------------	----------	-----------------	-------------	---------------	---------------

Nombre Jurado: Diego Alejandro Rasero Causil.

Firma:

Diego A. Rasero C.

Nombre Jurado: Carlos Eduardo Cuellar Santanilla.

Firma:

Cuellar



UNIVERSIDAD
SURCOLOMBIANA

**Aproximación numérica para la densidad de neutrones por el
método de Runge-Kutta estocástico**

Nathaly Roa Motta

Código: 20132122638

Universidad Surcolombiana
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales
Programa de Física
Neiva, Colombia
2019

**Aproximación numérica para la densidad de neutrones por el método de Runge-Kutta
estocástico**

Nathaly Roa Motta
Código: 20132122638

Tesis Presentada Para Obtener El Título De
Físico
Universidad Surcolombiana, Neiva

Director:
Daniel Suescún Díaz, PhD.
Doctor en Física

Línea de investigación:
Física Nuclear

Grupo de investigación:
Física Aplicada FIASUR

Universidad Surcolombiana
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales
Programa de Física
Neiva, Huila

A Dios.

A mi director de tesis el Profesor Daniel Suescún Díaz por su dedicación a la investigación y por compartir su conocimiento en el área de la física nuclear y computacional.

Al semillero de investigación de Física Computacional y al grupo de investigación de Física Aplicada de la Universidad Surcolombiana.

A mi padre Gustavo Roa Olaya, mi madre Argenis Motta Castañeda y a Eder Mauricio Hernández Gutiérrez por su apoyo incondicional y mi formación integral.

A los profesores que tuve en mi carrera tanto en la Universidad Surcolombiana como en la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla.

Al Programa de Física por su acompañamiento permanente.

El comportamiento de un reactor nuclear es de naturaleza estocástica y se modela con un sistema de ecuaciones diferenciales estocásticas de Itô, con el objetivo de resolver las ecuaciones diferenciales estocásticas de la cinética puntual, este trabajo describe e implementa el método numérico de Runge-Kutta estocástico orden dos y orden tres. Se calcula la media y la varianza de las poblaciones de neutrones y de los precursores de neutrones retardados del modelo estocástico para diferentes formas de reactividad: constante, lineal y sinusoidal. Una de las ventajas importantes de los métodos propuestos es que necesita desarrollar pocas derivadas de las funciones aleatorias a diferencia de otros métodos reportados en la literatura, otra ventaja es el bajo costo computacional debido a que los métodos no requieren el cálculo de la raíz cuadrada de la matriz de covarianza. Los resultados numéricos obtenidos con el método de Runge-Kutta estocástico orden dos y orden tres indican que los métodos son eficientes y precisos para los casos de reactividad constante y sinusoidal, sin embargo, de los métodos propuestos el método de Runge-Kutta estocástico orden tres es el de mejor precisión.

Palabras claves: Densidad de neutrones, ecuaciones diferenciales de Itô, ecuaciones estocásticas de la cinética puntual, método de Runge-Kutta estocástico, precursores de neutrones retardados.

The behavior of a nuclear reactor has stochastic nature and is modeled with a system of stochastic differential equations of Itô; with the aim of solving the stochastic differential equations of point kinetics, this work describes and implements the numerical method of stochastic Runge-Kutta order two and order three. The mean and the variance of the neutron and delayed neutron precursor populations of the stochastic model are calculated for different forms of reactivity: constant, linear and sinusoidal. One of the important advantages of the proposed methods is that they need to develop few derivatives of the random functions unlike other methods reported in the literature, another advantage is the low computational cost because the methods do not require the calculation of the square root of the covariance matrix. The numerical results obtained with the method of Runge-Kutta stochastic order two and order three shows that the methods are efficient and accurate for cases of constant and sinusoidal reactivity, however, of all the proposed methods, Runge-Kutta stochastic order three method is the one with best accuracy.

Keywords: Neutron density, Itô differential equations, Stochastic point kinetics equations, Stochastic Runge-Kutta method, Delayed neutron precursor.

Tabla de Contenidos

vii

Capítulo 1 Introducción	10
Capítulo 2 Dinámica de un reactor nuclear	13
2.1 Cadena de fisión en reactores nucleares	13
2.2 Ecuación estocástica de la cinética puntual	14
Capítulo 3 Método numérico de Runge-Kutta estocástico	21
3.1 Esquema de Runge-Kutta explícito estocástico orden dos	23
3.2 Esquema de Runge-Kutta explícito estocástico orden tres	25
3.3 Implementación de los esquemas de Runge-Kutta estocástico a las ecuaciones de la cinética puntual.....	30
Capítulo 4 Resultados	33
4.1 Primer experimento numérico.....	33
4.2 Segundo y tercer experimento numérico	35
4.3 Cuarto experimento numérico.....	40
4.4 Quinto experimento numérico	43
4.5 Sexto experimento numérico	45
Capítulo 5 Conclusiones	48
Referencias	51
Apéndice	53
Apéndice A: Ecuación de la cinética puntual determinística.....	53

Tabla 1. Posibles eventos de los neutrones dentro del reactor..... 16

Tabla 2. Comparación de métodos para un problema de un grupo de precursores de neutrones retardados con reactividad $\rho(t) = -1/3$ 35

Tabla 3. Comparación de métodos para un problema de seis grupos de precursores de neutrones retardados con reactividad $\rho(t) = 0.003$ en el tiempo $t = 0.1s$ 36

Tabla 4. Comparación de métodos para un problema de seis grupos de precursores de neutrones retardados con reactividad $\rho = 0.007$ en el tiempo $t = 0.001s$ 38

Tabla 5. Comparación de métodos para un problema de seis grupos de precursores de neutrones retardados con reactividad $\rho(t) = 0.1\beta t$ en el tiempo $t = 1s$ 43

Tabla 6. Comparación de métodos para un problema de un grupo de precursores de neutrones retardados con reactividad $\rho(t) = \rho_0 \sin(\pi t/T)$ en el tiempo $t = 100s$ 44

Tabla 7 Comparación de métodos para un problema de seis grupos de precursores de neutrones retardados con reactividad $\rho = 0.0055$ pcm en el tiempo $t = 0.11s$ 47

Tabla I. Términos de la ecuación de densidad de neutrones 55

Figura 1. Variación de la densidad de neutrones y precursores de neutrones retardados para el primer experimento numérico con reactividad $\rho(t) = -1/3$ (a) con el método de Runge-Kutta estocástico orden dos etapa tres y (b) orden tres..... 34

Figura 2. Variación de la densidad de neutrones y de la suma de la densidad de precursores para el segundo experimento numérico con reactividad $\rho(t) = 300 pcm$ (a) con el método de Runge-Kutta estocástico orden dos etapa tres y (b) orden tres..... 36

Figura 3. Variación de la densidad de neutrones y de la suma de la densidad de precursores para el tercer experimento numérico con reactividad $\rho(t) = 700 pcm$ (a) con el método de Runge-Kutta estocástico orden dos etapa tres y (b) orden tres..... 37

Figura 4. Variación de la densidad de neutrones y de la suma de la densidad de precursores para el cuarto experimento numérico con reactividad lineal $\rho(t) = 0.1\beta t$ con el método de Runge-Kutta estocástico orden tres. 42

Figura 5. Variación de la densidad de neutrones y de la suma de la densidad de precursores para el quinto experimento numérico con reactividad sinusoidal (a) con el método de Runge-Kutta estocástico orden dos etapa tres y (b) orden tres..... 44

Figura 6 Variación de la densidad de neutrones y de la suma de la densidad de precursores para el sexto experimento numérico con reactividad $\rho(t) = 550 pcm$ (a) con el método de Runge-Kutta estocástico orden dos etapa tres y (b) orden tres..... 47

Capítulo 1

Introducción

Un reactor nuclear es un dispositivo donde se realiza la producción de energía nuclear (Lamarsh, 2002). Aquí, la energía nuclear significa la energía liberada en el proceso de fisión nuclear. Este proceso ocurre debido a la absorción de neutrones por el material fisionable. El reactor nuclear permite iniciar, mantener y controlar las reacciones de fisión, la energía extraída de este proceso se puede ajustar controlando la población de neutrones. El reactor nuclear se puede clasificar de acuerdo a los siguientes estados: subcrítico, crítico y súpercrítico; en el reactor subcrítico la concentración de neutrones disminuye a lo largo del tiempo, en el crítico el promedio de la población de neutrones se mantiene constante y en el súpercrítico la concentración de neutrones aumenta con el tiempo. Los niveles de potencia en reactores críticos y subcríticos son bajos, mientras que en el reactor supercrítico el nivel de potencia es alto. Tener un claro conocimiento de la dinámica del reactor nuclear permite tener un control cuidadoso de la distribución de neutrones para garantizar la producción de energía.

Las ecuaciones de la cinética (Hamanda & Aboanber, 2002a) permiten tener una idea de la dinámica del funcionamiento tiempo-dependiente de un reactor nuclear, estas ecuaciones modelan las funciones de densidad de neutrones y la concentración de precursores de neutrones retardados. Las ecuaciones de la cinética puntual son un sistema de ecuaciones diferenciales determinísticas no lineales, sin embargo, la operatividad del proceso dinámico real de un reactor nuclear es de naturaleza estocástico (Saha Ray & Patra, 2013b) (Stacey, 2018), la densidad de neutrones y las concentraciones de neutrones retardados varían aleatoriamente con el paso del tiempo. En reactores críticos y sub-críticos el comportamiento aleatorio en la densidad de neutrones y en la concentración de neutrones retardados es representativo, pero en reactores supercríticos el comportamiento aleatorio es imperceptible. Las ecuaciones de la cinética puntual pueden usarse para estimar los momentos de primer y segundo orden de las funciones aleatorias (Roussas, 2015).

Estudios previos han dado solución a las ecuaciones de la cinética puntual; considerando el caso determinístico se encuentra reportado el método de solución de series de potencia (Aboanber & Hamada, 2002b), método de aproximación constante por partes determinístico (Kinard & Allen, 2004) y el método de Hamming (Suescún Díaz, Flórez Ospina, & Rodríguez Sarasty, 2012), para el caso estocástico se encuentran reportados el método de Aproximación constante por partes (PCA) y Monte Carlo (Hayes & Allen, 2005), Euler-Maruyama (EM) (Saha Ray, 2012), Taylor 1.5 (Saha Ray & Patra, 2013a), método simplificado de cinética estocástica (SSPK) (Mohsen Ayyoubzadeh & Vosoughi, 2014), modelo analítico exponencial (AEM) (Nahla & Edress, 2016a), modelo estocástico eficiente (ESM) (Nahla & Edress, 2016b), Método de doble diagonalización y descomposición (Double DDM) (Da Silva, Vasques, Bodmann, & Vilhena, 2016) y el método de Euler-Maruyama implícito (implicit EM) (Suescún Díaz, Oviedo Torres, & Girón Cruz, 2018). Hasta el momento no se encuentra reportada la solución analítica de las ecuaciones de la cinética puntual, por ese motivo los investigadores se han visto obligados a implementar métodos numéricos para conocer el valor medio y la varianza de densidad de neutrones y la concentración de precursores de neutrones retardados.

Teniendo en cuenta los avances en métodos que dan solución a ecuaciones diferenciales estocásticas y considerando el hecho de que no se encuentra reportada la solución analítica de las ecuaciones de la cinética puntual, surge el interés de implementar el método de Runge-Kutta estocástico orden dos y orden tres (Tocino & Ardanuy, 2002) para dar solución a la ecuación de la cinética puntual estocástica y así estimar el valor medio y la varianza de densidad de neutrones y la concentración de precursores de neutrones retardados. El método de Runge-Kutta estocástico orden β , es un método numérico que se obtiene al hacer coincidir sus expansiones truncadas estocásticas alrededor de un punto para funciones suficientemente suaves de Itô con la correspondiente aproximación de orden β de Taylor. Las aproximaciones por el método de Runge-Kutta tienen una ventaja considerable ante las aproximaciones de Taylor, debido a que requiere determinar pocas derivadas.

En el Capítulo 2 se realiza una descripción general de la dinámica de reactores nucleares, se presenta el modelo estocástico que describe la cinética de un reactor nuclear conocido cómo

las ecuaciones de la cinética puntual estocásticas. En el Capítulo 3 se desarrolla el método de Runge-Kutta explícito estocástico orden dos y orden tres, se presenta la formulación de los métodos propuestos para las ecuaciones de la cinética puntual estocásticas. Los experimentos numéricos de la aplicación de los métodos se presentan en el Capítulo 4. Los experimentos numéricos consideran diversas funciones de reactividad que pueden depender del tiempo, para uno y varios grupos de precursores de neutrones retardados, se usa el software MATLAB para implementar los métodos numéricos y así conocer el comportamiento tiempo dependiente de un reactor nuclear puntual. Finalmente, en el Capítulo 5 se presenta un análisis sobre las aproximaciones obtenidas en valores medios y en varianza de la población de neutrones y de la concentración de precursores de neutrones retardados al implementar los métodos numéricos de derivación estocástica Runge-Kutta orden dos y orden tres.

Capítulo 2

Dinámica de un reactor nuclear

2.1 Cadena de fisión en reactores nucleares

Un reactor nuclear es un dispositivo en el que se produce energía, esta energía se obtiene por cadenas de fisión nuclear inducidas por neutrones. Dentro del reactor nuclear hay un recipiente de acero cilíndrico lleno de agua con una red de combustible nuclear compuesto básicamente de Uranio y una fuente de neutrones.

La fuente de neutrones del reactor nuclear emite un neutrón a alta energía, posteriormente el neutrón entra en el agua haciendo que éste se ralentice progresivamente hacia un equilibrio térmico. El neutrón de baja energía puede ser absorbido por la red de combustible en el isótopo de uranio $^{238}_{92}\text{U}$, o inducir la fisión en el isótopo fisible $^{235}_{92}\text{U}$ al golpear la red de combustible, en este caso el $^{235}_{92}\text{U}$ se vuelve inestable quedando así en un estado excitado. El núcleo colisionado después de un corto tiempo alrededor de 10^{-4}s , se divide en varios fragmentos, normalmente se generan dos productos de fisión, el núcleo libera neutrones de fisión de alta energía. Estos neutrones de fisión liberados después de un corto tiempo se etiquetan como neutrones térmicos. Los neutrones térmicos pueden llegar a producir nuevas fisiones de núcleos de la red de combustible obteniendo nuevamente en promedio dos productos de fisión, generando así una serie de reacciones en cadena.

Los fragmentos de fisión producidos quedan en estado excitado, originando productos radioactivos con elevada energía, los fragmentos de fisión se desintegran después de una reacción nuclear de β^- , la liberación de energía en la transformación β puede llegar a ser lo suficientemente grande para excitar el núcleo del producto hasta el punto en el que libera un neutrón adicional de alta energía. La emisión de estos neutrones adicionales sufre un retardo desde el tiempo de desintegración de las reacciones nucleares de β^- , el tiempo en el que los fragmentos de fisión decaen está dado por la constante de decaimiento λ , los grupos de los fragmentos de fisión reciben el nombre de precursor de neutrones retardados (Houchmandzadeh, Dumonteil, Mazzol, & Zoia, 2015) . Los neutrones retardados pueden llegar a iniciar nuevas cadenas de fisión.

Después del decaimiento de los productos de fisión menos del 1% de neutrones aparecen, los precursores de neutrones retardados, se asocian en seis grupos caracterizados porque tienen aproximadamente el mismo periodo. Las apariciones de éstos neutrones retardados son importantes en el control de un reactor nuclear. En promedio el número total de neutrones ν , tanto rápidos como retardados, emitidos por evento de fisión es alrededor de 2.5, y por cada evento de fisión se liberan alrededor de 200 MeV de energía por reacción. La dinámica del sistema de un reactor nuclear es modelada por las ecuaciones de la cinética, donde la cinética estudia el comportamiento temporal de la densidad de neutrones y de la concentración de precursores de neutrones retardados.

Para el correcto funcionamiento de un reactor nuclear es importante tener una reacción en cadena de fisión estable y que el reactor opere a una potencia constante. Para que un reactor nuclear funcione a potencia constante debe existir un equilibrio entre la tasa de neutrones producidos en el proceso de fisión con la población de pérdida de neutrones a través de la absorción o fugas. Cuando el sistema no cumple esta condición de equilibrio, indica que existe una dependencia en el tiempo para la población de neutrones y por tanto también para el nivel de potencia del reactor nuclear, una de las razones por la que se presenta estos casos es cuando el operador del reactor ajusta la barra de control para cambiar el nivel de potencia alterando la multiplicación del núcleo temporalmente. Es significativo predecir el comportamiento de la población de neutrones en un núcleo del reactor inducidas por cambios en la multiplicación del núcleo a lo largo del tiempo, pues desde la multiplicación dependerá la composición del núcleo, la distribución de densidad de temperatura del combustible o del líquido refrigerante del reactor nuclear, el nivel de potencia del reactor y también el flujo de neutrones, tema que es analizado por la cinética de los reactores nucleares.

2.2 Ecuación estocástica de la cinética puntual

La cinética de los reactores nucleares estudia la dependencia en el tiempo de los procesos implicados en el comportamiento temporal del flujo de neutrones en el reactor. La determinación de las características cinéticas de un reactor nuclear se conoce con la solución de las ecuaciones de la cinética puntual. Las ecuaciones de la cinética puntual modelan el

comportamiento de un reactor al que se le considera únicamente los efectos temporales. Esta ecuación está formada por un sistema ecuaciones diferenciales no lineales fuertemente acopladas para la densidad de neutrones y la concentración del i -ésimo grupo de precursores de neutrones retardados. En las ecuaciones de la cinética puntual existe una propiedad de Stiffness o problema de rigidez, la cual está presente solo en la respuesta temporal de la densidad de neutrones rápidos, pero no en la de los precursores de neutrones retardados. Las ecuaciones diferenciales se dice que son no lineales porque la función de reactividad $\rho(t)$ puede considerarse como función que puede depender del tiempo. La propiedad de stiffness en la cinética del reactor surge de los órdenes de diferencia de magnitud entre los tiempos de vida de los neutrones rápidos y retardados.

La ecuación de la cinética puntual determinística (ver Apéndice A) está formada por la ecuación de la densidad de precursores y la ecuación de densidad de neutrones, donde la ecuación de densidad de neutrones se puede escribir en términos de capturas, nacimientos y transformaciones de los neutrones

$$\frac{\partial n(t)}{\partial t} = \underbrace{\left[\frac{\rho(t) - 1 - \alpha}{l} \right] n(t)}_{\text{capturas}} - \underbrace{\left[\frac{1 - \alpha + \beta}{l} \right] n(t)}_{\text{nacimientos}} + \underbrace{\sum_{i=1} \lambda_i c_i(t)}_{\text{transformaciones}} + q(t) \quad (1)$$

$$\frac{\partial c_i(t)}{\partial t} = \frac{\beta_i}{l} n(t) - \lambda_i c_i(t) \quad (2)$$

siendo $n(t)$ la densidad de población de neutrones, $c_i(t)$ la concentración de precursores de neutrones retardados, $i = 1, \dots, m$ número de grupo de neutrones retardados, $\rho(t)$ reactividad, β_i fracción de neutrones retardados del i -ésimo grupo de precursores, β fracción total de neutrones retardados, l promedio de vida de los neutrones en el reactor, λ_i constante de decaimiento para el i -ésimo grupo de precursores, ν velocidad de neutrones de fisión, q es la fuente de neutrones, $\lambda_i c_i(t)$ es la velocidad con que el i -ésimo grupo de precursor de transforma en neutrones y $\alpha \approx 1/\nu$. La tasa de nacimiento de neutrones debido a la fisión está dada por $b = \frac{1 - \alpha - \beta}{l(-1 + (1 - \beta)\nu)}$, la tasa de mortalidad de neutrones debido a las capturas o

fugas es $d = \frac{-\rho+1-\alpha}{l}$ y el término que indica el número de neutrones nuevos o nacidos en cada fisión es $(-1 + (1 - \beta)\nu)$.

Para derivar el sistema estocástico para la dinámica de un reactor puntual se va a considerar un intervalo de tiempo muy pequeño Δt donde la probabilidad de que ocurra más de un evento durante el tiempo Δt es pequeña. Durante éste tiempo existen cuatro posibles eventos para la población de los neutrones dentro del reactor, éste cambio de las poblaciones de neutrones y de la concentración del i -ésimo grupo de precursor para cada uno de los eventos está dada por $|\Delta\vec{x}_k\rangle = [\Delta n, \Delta c_1, \Delta c_2, \dots, \Delta c_6]_k$ donde $k = 1, \dots, 4$ es el número de evento. Los eventos son: captura, fisión, transformación de un precursor de neutrones retardados a un neutrón y nacimiento de un neutrón fuente, los cuatro posibles eventos con sus respectivas probabilidades se evidencian en la Tabla 1.

Tabla 1. Posibles eventos de los neutrones dentro del reactor.

Evento	Cambio en la población de neutrones [$\Delta n(t)$]	Cambio en la población del i -ésimo grupo de precursor [$\Delta c_i(t)$]	Probabilidad [P_k]
Captura	-1	0	$dn(t)\Delta t$
Fisión	$-1 + (1 - \beta)\nu$	$\beta_i\nu$	$bn(t)\Delta t$
Transformación	1	-1	$\lambda_i c_i(t)\Delta t$
Nacimiento	1	0	$q(t)\Delta t$

Se propone que los cambios en la población de neutrones y en la población del i -ésimo grupo de precursor se distribuyen de manera aproximadamente normal; también se va a suponer que la fuente externa produce neutrones aleatoriamente siguiendo un proceso de Poisson. Ahora se va a calcular la media del vector de variables aleatorias $\Delta n(t), \Delta c_1(t), \dots, \Delta c_i(t)$, la media se define cómo

$$E(|\Delta\vec{x}\rangle) = \sum_{k=1}^4 P_k \bar{x}_k = P_1 \bar{x}_1 + P_2 \bar{x}_2 + P_3 \bar{x}_3 + P_4 \bar{x}_4 \quad (3)$$

Teniendo en cuenta los cambios en la población de neutrones y de la concentración de precursores dados en la Tabla 1., el valor medio de los eventos es

$$\begin{aligned}
E(|\Delta\bar{x}) = dn(t)\Delta t \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} + bn(t)\Delta t \begin{bmatrix} -1 + (1-\beta)v \\ \beta_1 v \\ \beta_2 v \\ \vdots \\ \beta_6 v \end{bmatrix} + \lambda_i c_i(t)\Delta t \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \\ \vdots \\ -1 \end{bmatrix} \\
+ q(t)\Delta t \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{4}$$

Reemplazando en la ecuación (4) los valores de la tasa de nacimiento de neutrones por fisión b , el número de neutrones nuevos, la tasa de mortalidad de los neutrones d , se obtiene

$$E(|\Delta\bar{x}) = E \left(\begin{bmatrix} \Delta n(t) \\ \Delta c_1 \\ \Delta c_2 \\ \vdots \\ \Delta c_6 \end{bmatrix} \right) = \begin{bmatrix} \left(\frac{\rho - \beta}{l} \right) n(t) + \sum_{i=1}^m \lambda_i c_i(t) + q(t) \\ \frac{\beta_1}{l} n(t) - \lambda_1 c_1 \\ \frac{\beta_2}{l} n(t) - \lambda_2 c_2 \\ \vdots \\ \frac{\beta_6}{l} n(t) - \lambda_6 c_6 \end{bmatrix} \Delta t \tag{5}$$

Ahora se va a calcular la varianza (σ) del vector de variables aleatorias $\Delta n(t), \Delta c_1(t), \dots, \Delta c_i(t)$, la varianza se define cómo

$$\sigma(|\Delta\bar{x}) = \sum_{k=1}^4 P_k |\bar{x}_k\rangle \langle \bar{x}_k| = P_1 |\bar{x}_1\rangle \langle \bar{x}_1| + P_2 |\bar{x}_2\rangle \langle \bar{x}_2| + P_3 |\bar{x}_3\rangle \langle \bar{x}_3| + P_4 |\bar{x}_4\rangle \langle \bar{x}_4| \tag{6}$$

Reemplazando en la ecuación (6) las probabilidades para cada evento, los valores de la tasa de nacimiento de neutrones por fisión b , el número de neutrones nuevos, la tasa de mortalidad de los neutrones d , se obtiene

$$\sigma(|\Delta\bar{x}) = \hat{B} \Delta t \tag{7}$$

donde

$$\hat{B} = \begin{bmatrix} \zeta & a_1 & a_2 & \dots & a_m \\ a_1 & b_{1,1} & b_{1,2} & \dots & b_{1,m} \\ a_2 & b_{2,1} & b_{2,2} & \dots & b_{2,m} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_m & b_{m,1} & b_{m,2} & \dots & b_{m,m} \end{bmatrix} \quad (8)$$

$$\zeta = \gamma n(t) + \sum_{i=1}^m \lambda_i c_i(t) + q$$

$$\gamma = \frac{-1 - \rho(t) + 2\beta + (1 - \beta)^2 v}{l}$$

$$a_i = \frac{\beta_i}{l} [(1 - \beta)v - 1]n(t) - \lambda_i c_i(t)$$

$$b_{i,j} = \frac{\beta_i \beta_j}{l} n(t) + \delta_{ij} \lambda_i c_j(t)$$

y δ_{ij} representa el delta de Kronecker.

Según el teorema de límite central (Allen, 2007)

$$|\eta\rangle = \frac{|\Delta\bar{x}\rangle - E(|\Delta\bar{x}\rangle)}{\sqrt{\sigma^2(|\Delta\bar{x}\rangle)}} \quad (9)$$

donde $|\eta\rangle$ es un vector de variables aleatorias con distribución aproximadamente normal con media 0 y desviación estándar 1 y se define cómo $|\eta\rangle = [\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_{i+1}]^T$. Reemplazando las ecuaciones (5) y (7) en la ecuación (9) se obtiene

$$\begin{aligned} |\Delta\bar{x}\rangle &= \begin{bmatrix} n(t + \Delta t) - n(t) \\ c_1(t + \Delta t) - c_1(t) \\ c_2(t + \Delta t) - c_2(t) \\ \vdots \\ c_m(t + \Delta t) - c_m(t) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \left(\frac{\rho(t) - \beta}{l}\right)n(t) + \sum_{i=1}^m \lambda_i c_i(t) + q(t) \\ \frac{\beta_1}{l}n(t) - \lambda_1 c_1 \\ \frac{\beta_2}{l}n(t) - \lambda_2 c_2 \\ \vdots \\ \frac{\beta_m}{l}n(t) - \lambda_m c_m \end{bmatrix} \Delta t + \hat{B}^{1/2} \begin{bmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \\ \eta_3 \\ \vdots \\ \eta_m \end{bmatrix} \sqrt{\Delta t} \end{aligned} \quad (10)$$

Evaluando la ecuación (10) en el límite cuando $\Delta t \rightarrow 0$ se obtiene un sistema de ecuaciones diferenciales de Itô

$$\frac{d|\bar{x}\rangle}{dt} = A(t)\bar{x} + \bar{F}(t) + \hat{B}^{\frac{1}{2}} \frac{d\bar{W}}{dt} \quad (11)$$

donde

$$|\bar{x}\rangle = \begin{bmatrix} n \\ c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_m \end{bmatrix} \quad (12)$$

$$A(t) = \begin{bmatrix} \frac{\rho(t) - \beta}{l} & \lambda_1 & \lambda_2 & \dots & \lambda_m \\ \frac{\beta_1}{l} & -\lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ \frac{\beta_2}{l} & 0 & -\lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\beta_m}{l} & 0 & 0 & \dots & -\lambda_m \end{bmatrix} \quad (13)$$

$$\bar{F}(t) = \begin{bmatrix} q(t) \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad (14)$$

\hat{B} está dado por la ecuación (8) y W es el proceso de Wiener. Cuando en la ecuación (11) la matriz de covarianza \hat{B} es igual a cero, ésta corresponde al caso determinístico de la cinética puntual.

La ecuación de la cinética puntual estocástica dada en la ecuación (11) involucra una variable aleatoria \bar{x} en la cual sus incrementos a lo largo del tiempo están dados por una parte determinística más una parte aleatoria, éste tipo de ecuación corresponden a la ecuación diferencial de Itô la cual es de la forma

$$dX_t = a(t, X_t)dt + b(t, X_t)dW_t \quad \text{en } t_0 \leq t \leq T \quad (15)$$

Donde dW_t es un proceso de Wiener m -dimensional, las funciones $a = a(t, x)$ y $b = b(t, x)$ están definidas y son medibles en $[t_0, T] \times R^d$ y satisfacen las condiciones ligadas tanto a Lipschitz como al incremento lineal en x , con el fin de asegurar la existencia de una solución única de la ecuación diferencial estocástica con condición inicial $X_{t_0} = X_0$.

Para dar solución a la ecuación (11) se pueden implementar métodos numéricos estocásticos como Euler-Maruyama, Taylor entre otros (Kloeden & Platen, 1992). En el siguiente capítulo se desarrolla el Método de Runge-Kutta estocástico de orden dos y orden tres para dar solución a ecuaciones diferenciales de Itô.

Capítulo 3

Método numérico de Runge-Kutta estocástico

El esquema de Runge-Kutta estocástico explícito de etapa s (Tocino & Ardanuy, 2002) está dado por

$$\bar{X}_{n+1} = \bar{X}_n + \Delta \sum_{j=1}^s \alpha_j a(t_n + \mu_j \Delta, \eta_j) + \sum_{k=1}^m \Delta \widehat{W}_n^k \sum_{j=1}^s \beta_j^k b^k(t_n + \mu_j \Delta, \eta_j) + R \quad (16)$$

donde

$$\mu_1 = 0$$

$$\eta_1 = X_n$$

$$\eta_j = \bar{X}_n + \Delta \sum_{i=1}^{j-1} \lambda_{ji} a(t_n + \mu_i \Delta, \eta_i) + \sum_{k=1}^m \Delta \widehat{W}_n^k \sum_{i=1}^{j-1} \gamma_{ji}^k b^k(t_n + \mu_i \Delta, \eta_i) \quad j = 1, \dots, s$$

R es un término apropiado, $\alpha_j, \mu_j, \beta_j^k, \lambda_{i,j}, \gamma_{ij}^k$ son constantes numéricas y ΔW_n representa movimientos Brownianos. Los parámetros y el término R debe elegirse para que la aproximación dada por la ecuación (16) sea β -equivalente al orden simplificado del esquema β de Taylor. Una desventaja considerable de los esquemas de Taylor simplificados es que requiere determinar muchas derivadas, para evitar esta desventaja en el esquema de Runge-Kutta, el término de ajuste libre se elegirá de tal forma que para cada familia de parámetros el número de derivadas en R debe ser notoriamente más pequeño que en el esquema de Taylor. Las funciones a y b son expansiones truncadas de segundo orden, éstas expansiones están dadas por

$$\begin{aligned}
f(t + \Delta, X_t + \Delta X) &\stackrel{(2)}{\simeq} f + \frac{\partial f}{\partial t} \Delta + \sum_{i=1}^d \frac{\partial f}{\partial x^i} \Delta x^i + \left[\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} + \sum_{i,j=1}^d c^{ij} \frac{\partial^3 f}{\partial t \partial x^i \partial x^j} \right] \frac{\Delta^2}{2} + \\
&\quad \sum_{i=1}^d \frac{\partial f}{\partial x^i} \Delta x^i \left[\frac{1}{2} \sum_{i,j,k}^d \left(\sum_{l=1}^d c^{kl} \frac{\partial c^{ij}}{\partial x^l} \right) \frac{\partial^3 f}{\partial x^i \partial x^j \partial x^k} + \right. \\
&\quad \left. \frac{1}{4} \sum_{i,j,k,l}^d c^{ij} c^{kl} \frac{\partial^4 f}{\partial x^i \partial x^j \partial x^k \partial x^l} \right] \frac{\Delta^2}{2} + \sum_{i,j=1}^d \frac{\partial^2 f}{\partial x^i \partial x^j} \frac{\Delta X^i \Delta X^j}{2} + \\
&\quad \sum_{i=1}^d \left(\frac{\partial^2 f}{\partial t \partial x^i} + \frac{1}{2} \sum_{j,k=1}^d c^{jk} \frac{\partial^3 f}{\partial x^i \partial x^j \partial x^k} \right) \Delta \Delta X^i
\end{aligned} \tag{17}$$

Para el caso escalar $d = m = 1$ y considerando que $c = b^2$ en la ecuación (17)

$$\begin{aligned}
f(t + \Delta, X_t + \Delta X) &\stackrel{(2)}{\simeq} f + f_{10} \Delta + f_{01} \Delta x + f_{02} \frac{(\Delta X)^2}{2} + \left(f_{11} + \frac{1}{2} b^2 f_{03} \right) \Delta \Delta X \\
&\quad \left[f_{20} + b^2 f_{12} + b^3 b_{01} f_{03} + \frac{1}{4} b^4 f_{04} \right] \frac{\Delta^2}{2}
\end{aligned} \tag{18}$$

Se implementó la notación $g_{ij} = \frac{\partial^{i+j} g(t_n, \bar{x}_n)}{\partial t^i \partial x^j}$ por simplicidad. Los movimientos brownianos $\Delta \widehat{W}$ en el caso escalar son de la forma

$$|E[\Delta \widehat{W}_n]| + |E[(\Delta \widehat{W}_n)^2 - \Delta]| + |E[(\Delta \widehat{W}_n)^3]| + |E[(\Delta \widehat{W}_n)^4 - 3\Delta^2]| + |E[(\Delta \widehat{W}_n)^5]| \leq K \Delta^3$$

donde $K > 0$. La combinación lineal de productos de la forma $\Delta^i (\Delta \widehat{W})^j$ para $i = 0, 1, \dots$ y $j = 0, 1, \dots$ para la aproximación $\beta = 2$ corresponde a

$$\begin{aligned}
\Delta \Delta \widehat{W}^i \Delta \widehat{W}^j &\stackrel{(2)}{\simeq} \begin{cases} \Delta^2 & \text{si } i \neq j \\ 0 & \text{si } i = j \end{cases} \\
\Delta \widehat{W}^i \Delta \widehat{W}^j \Delta \widehat{W}^k &\stackrel{(2)}{\simeq} \begin{cases} 3\Delta \Delta \widehat{W}^i & \text{si } i = j = k \\ \Delta \Delta \widehat{W}^i & \text{si } j = k \neq i \\ 0 & \text{si } i \neq j, i \neq k, j \neq k \end{cases} \\
\Delta^i (\Delta \widehat{W}^1)^{j_1} \dots (\Delta \widehat{W}^m)^{j_m} &\stackrel{(2)}{\simeq} 0 \quad \text{si } i + \frac{j_1 + \dots + j_m}{2} \geq \frac{5}{2}
\end{aligned} \tag{19}$$

3.1 Esquema de Runge-Kutta explícito estocástico orden dos

Para obtener el caso general de un esquema de Runge-Kutta de segundo orden etapa tres, se considera en la ecuación (16) $s > 2$ para el caso escalar $d = m = 1$

$$\bar{X}_{n+1} = \bar{X}_n + \alpha_1 a \Delta + \alpha_2 a(\tau_n, \eta) \Delta + \beta_1 b \Delta \widehat{W} + \beta_2 b(\tau_n, \bar{\eta}) \Delta \widehat{W} + \beta_3 b(\tau_n, \bar{\bar{\eta}}) \Delta \widehat{W} + R \quad (20)$$

donde

$$\tau_n = t_n + \mu \Delta$$

$$\eta = \bar{X}_n + \lambda a \Delta + \gamma b \Delta \widehat{W}$$

$$\bar{\eta} = \bar{X}_n + \bar{\lambda} a \Delta + \bar{\gamma} b \Delta \widehat{W}$$

$$\bar{\bar{\eta}} = \bar{X}_n + \bar{\bar{\lambda}} a \Delta + \bar{\bar{\gamma}} b \Delta \widehat{W}$$

$a = a(t_n, \bar{X}_n)$ y $b = b(t_n, \bar{X}_n)$. A partir de la ecuación (18) se obtiene $a(\tau_n, \eta)$

$$\begin{aligned} a(\tau_n, \eta) \stackrel{(2)}{\simeq} & a + a_{10} \mu \Delta + a_{01} (\lambda a \Delta + \gamma b \Delta \widehat{W}) + \frac{1}{2} a_{02} (\lambda a \Delta + \gamma b \Delta \widehat{W})^2 + \\ & \frac{1}{2} (a_{20} + b^2 a_{12} + b^3 b_{01} a_{03} + \frac{1}{4} b^4 a_{04}) (\mu \Delta)^2 + \\ & (a_{11} + \frac{1}{2} b^2 a_{03}) \mu \Delta (\lambda a \Delta + \gamma b \Delta \widehat{W}) \end{aligned} \quad (21)$$

Se multiplica en la ecuación (21) a ambos lados por Δ y se tiene cuenta las 2-equivalencias dadas en la ecuación (19)

$$a(\tau_n, \eta) \Delta \stackrel{(2)}{\simeq} a \Delta + a_{10} \mu \Delta^2 + a a_{01} \lambda \Delta^2 + a_{01} b \gamma \Delta (\Delta \widehat{W}) + \frac{1}{2} a_{02} b^2 \gamma^2 \Delta^2 \quad (22)$$

Con éste mismo procedimiento se calcula $b(\tau_n, \bar{\eta}) \Delta \widehat{W}$ y $b(\tau_n, \bar{\bar{\eta}}) \Delta \widehat{W}$

$$\begin{aligned} b(\tau_n, \bar{\eta}) \Delta \widehat{W} \stackrel{(2)}{\simeq} & b \Delta \widehat{W} + b b_{01} \bar{\gamma} \Delta \widehat{W}^2 + b_{10} \mu \Delta \Delta \widehat{W} + a b_{01} \bar{\lambda} \Delta \Delta \widehat{W} + a b b_{02} \bar{\lambda} \bar{\gamma} \Delta^2 + \\ & b (b_{11} + \frac{1}{2} b^2 b_{03}) \mu \bar{\gamma} \Delta^2 + \frac{3}{2} b^2 b_{02} \bar{\gamma}^2 \Delta \Delta \widehat{W} \end{aligned} \quad (23)$$

$$\begin{aligned}
b(\tau_n, \bar{\eta})\Delta\widehat{W} &\stackrel{(2)}{\simeq} b\Delta\widehat{W} + bb_{01}\bar{\gamma}\Delta\widehat{W}^2 + b_{10}\mu\Delta\Delta\widehat{W} + ab_{01}\bar{\lambda}\Delta\Delta\widehat{W} + abb_{02}\bar{\lambda}\bar{\gamma}\Delta^2 \\
&+ b\left(b_{11} + \frac{1}{2}b^2 b_{03}\right)\mu\bar{\gamma}\Delta^2 + \frac{3}{2}b^2b_{02}\bar{\gamma}^2\Delta\Delta\widehat{W}
\end{aligned} \tag{24}$$

Reemplazando las ecuaciones (22-24) en la ecuación (20) se obtiene

$$\begin{aligned}
\bar{X}_{n+1} &= \bar{X}_n + (\beta_1 + \beta_2 + \beta_3) b\Delta\widehat{W} + (\alpha_1 + \alpha_2)a\Delta \\
&+ (\beta_2\bar{\gamma} + \beta_3\bar{\bar{\gamma}})bb_{01}\Delta\widehat{W}^2 + \alpha_2\gamma a_{01}b\Delta(\Delta\bar{W}) \\
&+ (\beta_2 + \beta_3)\mu b_{10}\Delta\Delta\widehat{W} + (\beta_2\bar{\lambda} + \beta_3\bar{\bar{\lambda}})ab_{01}\Delta\Delta\widehat{W} \\
&+ \frac{3}{2}(\beta_2\bar{\gamma}^2 + \beta_3\bar{\bar{\gamma}}^2)b^2b_{02}\Delta\Delta\widehat{W} + \alpha_2\mu a_{10}\Delta^2 + \alpha_2\lambda a_{01}a\Delta^2 \\
&+ \frac{1}{2}\alpha_2 a_{02}\gamma^2 b^2\Delta^2 + \mu(\beta_2\bar{\gamma} + \beta_3\bar{\bar{\gamma}})b\left(b_{11} + \frac{1}{2}b^2 b_{03}\right)\Delta^2 \\
&+ (\beta_2\bar{\lambda}\bar{\gamma} + \beta_3\bar{\bar{\lambda}}\bar{\bar{\gamma}})abb_{02}\Delta^2 + R
\end{aligned} \tag{25}$$

Se compara la aproximación anterior con el esquema simplificado de Taylor de orden dos el cual está dado por

$$\begin{aligned}
\bar{X}_{n+1} &= \bar{X}_n + b\Delta\widehat{W} + a\Delta + \frac{1}{2}bb_{01}(\Delta\widehat{W}^2 - \Delta) + \frac{1}{2}\left(a_{10} + aa_{01} + \frac{1}{2}b^2a_{02}\right)\Delta^2 \\
&+ \frac{1}{2}\left(b_{10} + ab_{01} + \frac{1}{2}b^2b_{02} + ba_{01}\right)\Delta\Delta\widehat{W}
\end{aligned} \tag{26}$$

Para que el esquema dado en por la ecuación (25) sea β -equivalente al esquema de la ecuación (26), se debe cumplir las siguientes igualdades

$$\begin{aligned}
\beta_1 + \beta_2 + \beta_3 &= 1 & \alpha_2\mu &= \frac{1}{2} & \beta_2\bar{\lambda}\bar{\gamma} + \beta_3\bar{\bar{\lambda}}\bar{\bar{\gamma}} &= \frac{1}{2} \\
\alpha_2\lambda &= \frac{1}{2} & \beta_2\bar{\lambda} + \beta_3\bar{\bar{\lambda}} &= \frac{1}{2} & \beta_2\bar{\gamma}^2 + \beta_3\bar{\bar{\gamma}}^2 &= \frac{1}{6} \\
\alpha_2\gamma &= \frac{1}{2} & (\beta_2 + \beta_3)\mu &= \frac{1}{2} & R &= \frac{1}{2}bb_{01}\left((\Delta\widehat{W})^2 - \Delta\right) \\
\alpha_2\gamma^3 &= \frac{1}{2} & (\beta_2\bar{\gamma} + \beta_3\bar{\bar{\gamma}})\mu &= 0 & &
\end{aligned} \tag{27}$$

Con éstas igualdades se observa que el sistema tiene solución única cuando $\gamma = \mu = \lambda = 1$ y $\alpha_1 = \alpha_2 = 1/2$. Sustituyendo éstos valores en la ecuación (27) se tiene

$$\begin{aligned} \beta_1 &= \frac{1}{2} & \beta_2 &= \frac{1}{6\bar{\gamma}^2 + 2} & \beta_3 &= \frac{3\bar{\gamma}^2}{6\bar{\gamma}^2 + 2} \\ \bar{\gamma} &= -\frac{1}{3\bar{\gamma}} & \bar{\gamma} &\neq 0 & \bar{\lambda} &= \bar{\lambda} = 1 \end{aligned}$$

Entonces, el esquema de Runge-Kutta estocástico orden dos etapa tres corresponde a

$$\begin{aligned} \bar{X}_{n+1} &= \bar{X}_n + \frac{1}{2}a\Delta + \frac{1}{2}a(t_n + \Delta, \bar{X}_n + a\Delta + b\Delta\widehat{W})\Delta + \frac{1}{2}b\Delta\widehat{W} \\ &+ \frac{1}{6\bar{\gamma}^2 + 2}b(t_n + \Delta, \bar{X}_n + a\Delta + \bar{\gamma}b\Delta\widehat{W})\Delta\widehat{W} \\ &+ \frac{3\bar{\gamma}^2}{6\bar{\gamma}^2 + 2}b\left(t_n + \Delta, \bar{X}_n + a\Delta - \frac{1}{3\bar{\gamma}}b\Delta\widehat{W}\right)\Delta\widehat{W} + \frac{1}{2}bb_{01}\left((\Delta\widehat{W})^2 - \Delta\right) \end{aligned} \quad (28)$$

El esquema dado en la ecuación (28) es 2-equivalente al esquema de orden dos de Taylor.

3.2 Esquema de Runge-Kutta explícito estocástico orden tres

Para encontrar los esquemas de Runge-Kutta de tercer orden se considera ecuaciones diferenciales estocásticas escalares ($d = m = 1$) con coeficiente de difusión constante $b(t, x) = b$. De la ecuación (16) se deduce un esquema de Runge-Kutta de tres etapas

$$\bar{X}_{n+1} = \bar{X}_n + [\alpha_1 a + \alpha_2 a(t_n + \mu_2 \Delta, \eta_2) + \alpha_3 a(t_n + \mu_3 \Delta, \eta_3)]\Delta + \beta b \Delta \widehat{W} + R \quad (29)$$

donde

$$\begin{aligned} \eta_2 &= \bar{X}_n + \lambda_{21}a\Delta + \gamma_2 b \Delta \widehat{W} \\ \eta_3 &= \bar{X}_n + \lambda_{31}a\Delta + \lambda_{32}a(t_n + \mu_2 \Delta, \eta_2)\Delta + \gamma_3 b \Delta \widehat{W} \\ a &= a(t_n, \bar{X}_n) \\ b &= b(t_n, \bar{X}_n) \end{aligned}$$

Para calcular $a(t_n + \mu_2 \Delta, \eta_2)\Delta$ y $a(t_n + \mu_3 \Delta, \eta_3)\Delta$ se debe implementar las expansiones de tercer orden las cuales están dadas por

$$\begin{aligned}
f(t + \Delta, X_t + \Delta X) &\stackrel{(3)}{\simeq} f_{00} + f_{10}\Delta + f_{01}\Delta X + \left[f_{20} - \frac{1}{4}b^4 f_{04} \right] \frac{\Delta^2}{2} + f_{11}\Delta\Delta X \\
&+ f_{02} \frac{(\Delta X)^2}{2} + \left(f_{03} + \frac{3}{2}b^2 f_{22} + \frac{3}{4}b^4 f_{14} + \frac{1}{8}b^6 f_{06} \right) \frac{\Delta^3}{6} \\
&+ f_{03} \frac{(\Delta X)^3}{6} + \left(f_{21} + b^2 f_{13} + \frac{1}{4}b^4 f_{05} \right) \frac{\Delta^2\Delta X}{2} \\
&+ \left(f_{12} + \frac{1}{2}b^2 f_{04} \right) \frac{\Delta(\Delta X)^2}{2}
\end{aligned} \tag{30}$$

Se debe tener en cuenta para la aproximación $\beta = 3$ la combinación lineal de productos de la forma $\Delta^i (\Delta\widehat{W})^j$ para $i = j = 0, 1, \dots$ la cual corresponde a

$$\Delta(\Delta\widehat{W})^3 \stackrel{(3)}{\simeq} 3\Delta^2(\Delta\widehat{W}), \quad \Delta^2(\Delta\widehat{W})^2 \stackrel{(3)}{\simeq} \Delta^3, \quad \Delta^i(\Delta\widehat{W})^j \stackrel{(3)}{\simeq} 0 \quad \text{si } i + \frac{j}{2} \geq \frac{7}{2} \tag{31}$$

Se calcula $a(t_n + \mu_2\Delta, \eta_2)\Delta$ y $a(t_n + \mu_3\Delta, \eta_3)\Delta$ a partir de las ecuaciones (30) y (31)

$$\begin{aligned}
a(t_n + \mu_2\Delta, \eta_2)\Delta &\stackrel{(3)}{\simeq} a\Delta + a_{01}\gamma_2 b\Delta\Delta\widehat{W} + a_{10}\mu_2\Delta^2 + \frac{1}{2}aa_{03}b^2\lambda_{21}\gamma_2^2\Delta^3 \\
&+ aa_{01}\lambda_{21}\Delta^2 + \frac{1}{2}a_{02}b^2\gamma_2^2\Delta\Delta\widehat{W}^2 + a_{11}b\mu_2\gamma_2\Delta^2\Delta\widehat{W} \\
&+ aa_{02}b\lambda_{21}\gamma_2\Delta^2\Delta\widehat{W} + \frac{1}{2}a_{03}b^3\gamma_2^3\Delta^2\Delta\widehat{W} + aa_{11}\lambda_{21}\mu_2\Delta^3 \\
&+ \left(a_{12} + \frac{1}{2}b^2 a_{04} \right) \frac{b^2}{2}\gamma_2^2\mu_2\Delta^3 + \frac{1}{2}a^2 a_{02}\lambda_{21}^2\Delta^3 \\
&+ \left(a_{12} + \frac{1}{2}b^2 a_{04} \right) \frac{b^2}{2}\gamma_2^2\mu_2\Delta^3 + \frac{1}{2}aa_{03}b^2\lambda_{21}\gamma_2^2\Delta^3 \\
&+ \frac{1}{2}\left(a_{20} - \frac{b^4}{4} a_{04} \right) \mu_2^2\Delta^3
\end{aligned} \tag{32}$$

$$\begin{aligned}
a(t + \mu_3 \Delta, \eta_3) \Delta &\stackrel{(3)}{\simeq} a \Delta + a_{10} \mu_3 \Delta^2 + a_{01} b \gamma_3 \Delta \Delta \widehat{W} + a a_{01} (\lambda_{31} + \lambda_{32}) \Delta^2 \\
&+ a_{01}^2 b \lambda_{32} \gamma_2 \Delta^2 \Delta \widehat{W} + a_{01} a_{10} \lambda_{32} \mu_2 \Delta^3 + a_{01}^2 a \lambda_{32} \lambda_{21} \Delta^3 \\
&+ \frac{1}{2} a_{01} a_{02} b^2 \lambda_{32} \gamma_2^2 \Delta^3 + \left(a_{20} - \frac{1}{4} b^4 a_{04} \right) \frac{\mu_3^2}{2} \Delta^3 \\
&+ a_{11} b \mu_3 \gamma_3 \Delta^2 \Delta \widehat{W} + a a_{11} \mu_3 (\lambda_{31} + \lambda_{32}) \Delta^3 + \frac{b^2}{2} a_{02} \gamma_3^2 \Delta \Delta \widehat{W}^2 \\
&+ \frac{b^3}{2} a_{03} \gamma_3^3 \Delta^2 \Delta \widehat{W} + a a_{02} b \gamma_3 (\lambda_{31} + \lambda_{32}) \Delta^2 \Delta \widehat{W} \\
&+ \frac{1}{2} (\lambda_{31} + \lambda_{32})^2 a^2 a_{02} \Delta^3 + a_{01} a_{02} b^2 \lambda_{32} \gamma_3 \gamma_2 \Delta^3 \\
&+ \left(a_{12} + \frac{b^2}{2} a_{04} \right) \frac{b^2}{2} \mu_3 \gamma_3^2 \Delta^2 \Delta \widehat{W}^2 + \frac{b^2}{2} a a_{03} \gamma_3^2 (\lambda_{31} + \lambda_{32}) \Delta^3
\end{aligned} \tag{33}$$

Reemplazando las ecuaciones (32) y (33) en la ecuación (29) se obtiene

$$\begin{aligned}
\bar{X}_{n+1} &= \bar{X}_n + \beta b \Delta \widehat{W} + (\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3) a \Delta + a_{01} b (\alpha_2 \gamma_2 + \alpha_3 \gamma_3) \Delta \Delta \widehat{W} \\
&+ \frac{1}{2} [2a_{10} (\alpha_2 \mu_2 + \alpha_3 \mu_3) + 2a a_{01} (\alpha_2 \lambda_{21} + \alpha_3 (\lambda_{31} + \lambda_{32}))] \Delta^2 \\
&+ \frac{1}{6} [6b a_{01}^2 \alpha_3 \lambda_{32} \gamma_2 + 6a b a_{02} (\alpha_2 \lambda_{21} \gamma_2 + \alpha_3 \gamma_3 (\lambda_{31} + \lambda_{32})) \\
&+ 6b a_{11} (\alpha_2 \mu_2 \gamma_2 + \alpha_3 \mu_3 \gamma_3) + 3a_{03} b^3 (\alpha_2 \gamma_2^3 + \alpha_3 \gamma_3^3)] \Delta^2 \Delta \widehat{W} \\
&+ \frac{1}{2} a_{02} b^2 (\alpha_2 \gamma_2^2 + \alpha_3 \gamma_3^2) \Delta \Delta \widehat{W}^2 + a_{01} a_{10} \alpha_3 \mu_2 \lambda_{32} \Delta^3 \\
&+ \frac{1}{6} \left[6a a_{01}^2 \alpha_3 \lambda_{21} \lambda_{32} + 3a_{01} a_{02} b^2 \alpha_3 \lambda_{32} \gamma_2 (\gamma_2 + 2\gamma_3) \right. \\
&+ 3a_{20} (\alpha_2 \mu_2^2 + \alpha_3 \mu_3^2) + 6a a_{11} (\alpha_2 \mu_2 \lambda_{21} + \alpha_3 \mu_3 (\lambda_{31} + \lambda_{32})) \\
&+ 3a a_{03} b^2 (\alpha_2 \lambda_{21} \gamma_2^2 + \alpha_3 \gamma_3^2 (\lambda_{31} + \lambda_{32})) \\
&+ 3b^2 a_{12} (\alpha_2 \mu_2 \gamma_2^2 + \alpha_3 \mu_3 \gamma_3^2) + 3a^2 a_{02} (\alpha_2 \lambda_{21}^2 + \alpha_3 (\lambda_{31} + \lambda_{32})^2) \\
&\left. + \frac{1}{4} b^4 a_{04} [6(\alpha_2 \mu_2 \gamma_2^2 + \alpha_3 \mu_3 \gamma_3^2) - 3(\alpha_2 \mu_2^2 + \alpha_3 \mu_3^2)] \right] \Delta^3 + R
\end{aligned} \tag{34}$$

Se compara la aproximación dada por la ecuación (34) con el esquema simplificado de Taylor de orden tres, el cual corresponde a

$$\begin{aligned}
\bar{X}_{n+1} = & \bar{X}_n + b\Delta\widehat{W} + a\Delta + a_{01}b\Delta\hat{Z} + \frac{1}{2}\left[a_{10} + aa_{01} + \frac{1}{6}b^2a_{02}\right]\Delta^2 \\
& + \frac{1}{6}[ba_{01}^2 + 2ba_{11} + 2aba_{02} + b^3a_{03}]\Delta^2(\Delta\widehat{W}) \\
& + \frac{1}{6}b^2a_{02}\Delta(\Delta\widehat{W})^2 + \frac{1}{6}a_{01}a_{10}\Delta^3 + \frac{1}{6}\left[aa_{01}^2 + \frac{3}{2}b^2a_{01}a_{02} + a_{20} \right. \\
& \left. + 2aa_{11} + b^2a_{12} + aa_{03}b^2 + a^2a_{02} + \frac{1}{4}b^4a_{04}\right]\Delta^3
\end{aligned} \tag{35}$$

Para que el esquema dado por la ecuación (34) sea β -equivalente al esquema de la ecuación (35) se debe cumplir las siguientes igualdades

$$\begin{aligned}
\beta = 1 & & \alpha_2\mu_2\gamma_2 + \alpha_3\mu_3\gamma_3 &= \frac{1}{3} \\
\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = 1 & & \alpha_2\mu_2\gamma_2^2 + \alpha_3\mu_3\gamma_3^2 &= \frac{1}{3} \\
\alpha_3\lambda_{32}\gamma_2 = \frac{1}{6} & & \alpha_3\lambda_{32}\gamma_2(\gamma_2 + 2\gamma_3) &= \frac{1}{2} \\
\alpha_3\mu_2\lambda_{32} = \frac{1}{6} & & \alpha_2\lambda_{21} + \alpha_3(\lambda_{31} + \lambda_{32}) &= \frac{1}{2} \\
\alpha_3\lambda_{21}\lambda_{32} = \frac{1}{6} & & \alpha_2\lambda_{21}\gamma_2 + \alpha_3\gamma_3(\lambda_{31} + \lambda_{32}) &= \frac{1}{3} \\
\alpha_2\mu_2 + \alpha_3\mu_3 = \frac{1}{2} & & \alpha_2\mu_2\lambda_{21} + \alpha_3\mu_3(\lambda_{31} + \lambda_{32}) &= \frac{1}{3} \\
\alpha_2\mu_2^2 + \alpha_3\mu_3^2 = \frac{1}{3} & & \alpha_2\lambda_{21}\gamma_2^2 + \alpha_3\gamma_3^2(\lambda_{31} + \lambda_{32}) &= \frac{1}{3} \\
\alpha_2\gamma_2^2 + \alpha_3\gamma_3^2 = \frac{1}{3} & & \alpha_2\lambda_{21}^2 + \alpha_3(\lambda_{31} + \lambda_{32})^2 &= \frac{1}{3} \\
\alpha_2\gamma_2^3 + \alpha_3\gamma_3^3 = \frac{1}{3} & & &
\end{aligned}$$

y $R = a_{01}b[\Delta\hat{Z} - (\alpha_2\gamma_2 + \alpha_3\gamma_3)\Delta\Delta\widehat{W}] + \frac{1}{12}b^2a_{02}$. Se reduce algunos términos

$$\begin{aligned}
\gamma_2 = \mu_2 & & \mu_2^3\alpha_2 + \mu_3^3\alpha_3 &= \frac{1}{3} \\
\gamma_3 = \mu_3 & & \mu_2^3\alpha_2 + \mu_3^3\alpha_3 &= \frac{1}{3} \\
\lambda_{21} = \mu_2 & & \mu_2\alpha_2\gamma_2^2 + \mu_3\alpha_3\gamma_3^2 &= \frac{1}{3} \\
\gamma_2 + 2\gamma_3 = 3 & & & \\
\lambda_{31} + \lambda_{32} = \mu_3 & & &
\end{aligned}$$

y $R = a_{01}b \left[\Delta \hat{Z} - \frac{1}{2} \Delta (\Delta \hat{W}) \right] + \frac{1}{12} b^2 a_{02} \Delta^2$. Ahora se encuentra α_2 y α_3 para establecer la familia de parámetros que dan solución a la ecuación (34), para ello se resuelve el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned}\mu_2 \alpha_2 + \mu_3 \alpha_3 &= 1/2 \\ \mu_2^2 \alpha_2 + \mu_3^2 \alpha_3 &= 1/3\end{aligned}$$

Obteniendo

$$\begin{aligned}\alpha_2 &= \frac{\frac{1}{2} \mu_3 - \frac{1}{3}}{\mu_2 (\mu_3 - \mu_2)} & \mu_3 &\neq \mu_2 \\ & & \mu_2 &\neq 0 \\ & & \mu_3 &\neq 0 \\ \alpha_3 &= \frac{\frac{1}{3} - \frac{1}{2} \mu_2}{\mu_3 (\mu_3 - \mu_2)} & R &= a_{01}b \left[\Delta \hat{Z} - \frac{1}{2} \Delta (\Delta \hat{W}) \right] + \frac{1}{12} b^2 a_{02} \Delta^2\end{aligned}$$

La familia de parámetros que dan solución a la ecuación (29) se obtiene al calcular las raíces del polinomio $6\mu_3^3 - 17\mu_3^2 + 15\mu_3 - 4 = 0$. Para la primer raíz $\mu_3 = 1$ no es posible obtener una familia de parámetros porque incumple la condición $\mu_3 \neq \mu_2$, la familia de parámetros para la segunda raíz $\mu_3 = \frac{1}{2}$

$$\mu_2 = \gamma_2 = \lambda_{21} = 2, \lambda_{31} = \frac{13}{32}, \lambda_{32} = \frac{3}{32}, \alpha_1 = \frac{1}{12}, \alpha_2 = \frac{1}{36}, \alpha_3 = \frac{8}{9}, \gamma_3 = \frac{1}{12} \quad (36)$$

Reemplazando la ecuación (36) en la ecuación (29)

$$\begin{aligned}\bar{X}_{n+1} &= \bar{X}_n + b\Delta\hat{W} + \frac{1}{12} a\Delta + \frac{1}{36} a(\tau_n, \varphi_n)\Delta + \frac{8}{9} a(T_n, \bar{\varphi}_n)\Delta \\ &+ \frac{1}{12} b^2 a_{02} \Delta^2 + b a_{01} \left[\Delta \hat{Z} - \frac{1}{2} \Delta (\Delta \hat{W}) \right]\end{aligned} \quad (37)$$

donde

$$\tau_n = t_n + 2\Delta$$

$$T_n = t_n + \frac{1}{2}\Delta$$

$$\varphi_n = \bar{X}_n + 2b\Delta\hat{W} + 2a\Delta$$

$$\bar{\varphi}_n = \bar{X}_n + \frac{1}{2} b\Delta\hat{W} + \frac{13}{32} a\Delta + \frac{3}{32} a(\tau_n, \varphi_n)\Delta$$

La familia de parámetros para la tercera raíz $\mu_3 = \frac{4}{3}$ corresponde a

$$\mu_2 = \gamma_2 = \lambda_{21} = \frac{1}{3}, \gamma_3 = \frac{4}{3}, \alpha_1 = -\frac{1}{8}, \alpha_2 = 1, \alpha_3 = \frac{1}{3}, \lambda_{31} = -\frac{8}{3}, \lambda_{32} = 4 \quad (38)$$

Reemplazando la ecuación (38) en la ecuación (29)

$$\begin{aligned} \bar{X}_{n+1} = \bar{X}_n + b\Delta\widehat{W} - \frac{1}{8}a\Delta + a(\tau_n, \varphi_n)\Delta + \frac{1}{8}a(T_n, \bar{\varphi}_n)\Delta + \frac{1}{12}b^2a_{02}\Delta^2 \\ + ba_{01}\left[\Delta\hat{Z} - \frac{1}{2}\Delta(\Delta\widehat{W})\right] \end{aligned} \quad (39)$$

donde

$$\tau_n = t_n + \frac{1}{3}\Delta$$

$$T_n = t_n + \frac{4}{3}\Delta$$

$$\varphi_n = \bar{X}_n + \frac{1}{3}b\Delta\widehat{W} + \frac{1}{3}a\Delta$$

$$\bar{\varphi}_n = \bar{X}_n + \frac{4}{3}b\Delta\widehat{W} - \frac{8}{3}a\Delta + 4a(\tau_n, \varphi_n)\Delta$$

Los esquemas dados por las ecuaciones (37) y (39) son equivalente al esquema de orden tres de Taylor simplificado y se conoce cómo esquemas de Runge-Kutta estocásticos de orden tres.

3.3 Implementación de los esquemas de Runge-Kutta estocástico a las ecuaciones de la cinética puntual

Las ecuaciones de la cinética puntual descritas en la ecuación (11) corresponden a un sistema de ecuaciones diferenciales estocásticas de Itô, la cual se puede escribir cómo

$$d\bar{x} = [A(t)\bar{x} + \bar{F}(t)]dt + \hat{B}(t, \bar{x})^{1/2}d\bar{W} \quad (40)$$

Donde dW es un proceso de Wiener estándar o movimiento Browniano estándar. Éste movimiento Browniano definido en el intervalo de tiempo $[t_0, T]$ es una variable aleatoria $W(t)$ que depende continuamente de $t \in [t_0, T]$ y satisface las siguientes tres condiciones:

1. $W(0) = 0$ con probabilidad 1.
2. Para $0 \leq s < t \leq T$ la variable aleatoria dada por el incremento de $W(t) - W(s)$ se distribuye normalmente con media cero y varianza $t - s$, equivalente a

$$W(t) - W(s) \sim \sqrt{(t - s)}N(0,1)$$

donde $N(0,1)$ hace referencia a una variable aleatoria de distribución normal con media cero y varianza uno.

3. Para $0 \leq s < t < u < v \leq T$ los incrementos $W(t) - W(s)$ y $W(v) - W(u)$ son independientes.

Teniendo en cuenta la ecuación diferencial de Itô dada por (15) y comparando la ecuación de la cinética puntual estocástica (40), las funciones $a(t, x)$ y $b(t, x)$ corresponden a

$$\begin{aligned} a(t, \bar{x}) &= A(t)\bar{x} + \bar{F}(t) \\ b(t, \bar{x}) &= \hat{B}(t, \bar{x})^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (41)$$

donde $A, \bar{F}(t)$ y \hat{B} están definidas en las ecuaciones (13), (14) y (8) respectivamente. La solución de las ecuaciones de la cinética puntual (40) implementando el método explícito Runge-Kutta estocástico orden dos etapa tres (28) corresponde a

$$\begin{aligned} \bar{x}_{n+1} &= \bar{x}_n + \left[\frac{1}{2} \hat{B}(t_n, \bar{x}_n)^{\frac{1}{2}} + \frac{1}{6\bar{\gamma}^2 + 2} \hat{B}(t_n, \varphi_n)^{\frac{1}{2}} + \frac{3\bar{\gamma}^2}{6\bar{\gamma}^2 + 2} \hat{B}(t_n, \bar{\varphi}_n)^{\frac{1}{2}} \right] \Delta \widehat{W}_n \\ &+ \frac{1}{2} [A(t_n)\bar{x}_n + \bar{F}(t_n) + \bar{F}(t_n)] \\ &+ A(t_n) \{ \bar{x}_n + A(t_n)\bar{x}_n \Delta + \bar{F}(t_n) \Delta \} \Delta \\ &+ \frac{1}{2} A(t_n) \hat{B}(t_n, \bar{x}_n)^{\frac{1}{2}} (\Delta \widehat{W}_n) \Delta \\ &+ \frac{1}{2} \hat{B}(t_n, \bar{x}_n)^{\frac{1}{2}} \frac{d\hat{B}(t_n, \bar{x}_n)^{\frac{1}{2}}}{d\bar{x}_n} \left((\Delta \widehat{W}_n)^2 - \Delta \right) \end{aligned} \quad (42)$$

donde

$$\tau_n = t_n + \Delta$$

$$\varphi_n = \bar{x}_n + A(t_n)\bar{x}_n \Delta + \bar{F}(t_n) \Delta + \bar{\gamma} \hat{B}(t_n, \bar{x}_n)^{\frac{1}{2}} \Delta \widehat{W}_n$$

$$\bar{\varphi}_n = \bar{x}_n + A(t_n)\bar{x}_n \Delta + \bar{F}(t_n) \Delta - \frac{1}{3\bar{\gamma}} \hat{B}(t_n, \bar{x}_n)^{\frac{1}{2}} \Delta \widehat{W}_n$$

La solución de las ecuaciones de la cinética puntual descritas en la ecuación (40) implementando el método explícito Runge-Kutta estocástico orden tres dado por la ecuación (29) corresponde a

$$\begin{aligned} \bar{x}_{n+1} = \bar{x}_n + \hat{B}(t_n, \bar{x}_n)^{\frac{1}{2}} \Delta \hat{W} + \frac{1}{12} \left[A(t_n) \bar{x}_n + \bar{F}(t_n) + \frac{1}{3} A(\tau_n) \varphi_n + \frac{1}{3} \bar{F}(\tau_n) \right] \Delta \\ + \frac{8}{9} [A(T_n) \bar{\varphi}_n + \bar{F}(T_n)] \Delta + A(t_n) \hat{B}(t_n, \bar{x}_n)^{\frac{1}{2}} \left[\Delta \hat{Z} - \frac{1}{2} \Delta (\Delta \hat{W}) \right] \end{aligned} \quad (43)$$

donde

$$\tau_n = t_n + 2\Delta$$

$$T_n = t_n + \frac{1}{2}\Delta$$

$$\varphi_n = \bar{x}_n + 2b\Delta\hat{W} + 2a\Delta$$

$$\bar{\varphi}_n = \bar{x}_n + \frac{1}{2}b\Delta\hat{W} + \frac{13}{32}a\Delta + \frac{3}{32}a(\tau_n, \varphi_n)\Delta$$

En la siguiente sección se implementará el método de Runge-Kutta estocástico orden dos etapa tres y orden tres dados por las ecuaciones (42) y (43), para resolver las ecuaciones de la cinética puntual, se desarrollan seis experimentos numéricos con diferentes valores de reactividad para uno o seis grupos de precursores de neutrones retardados.

Capítulo 4

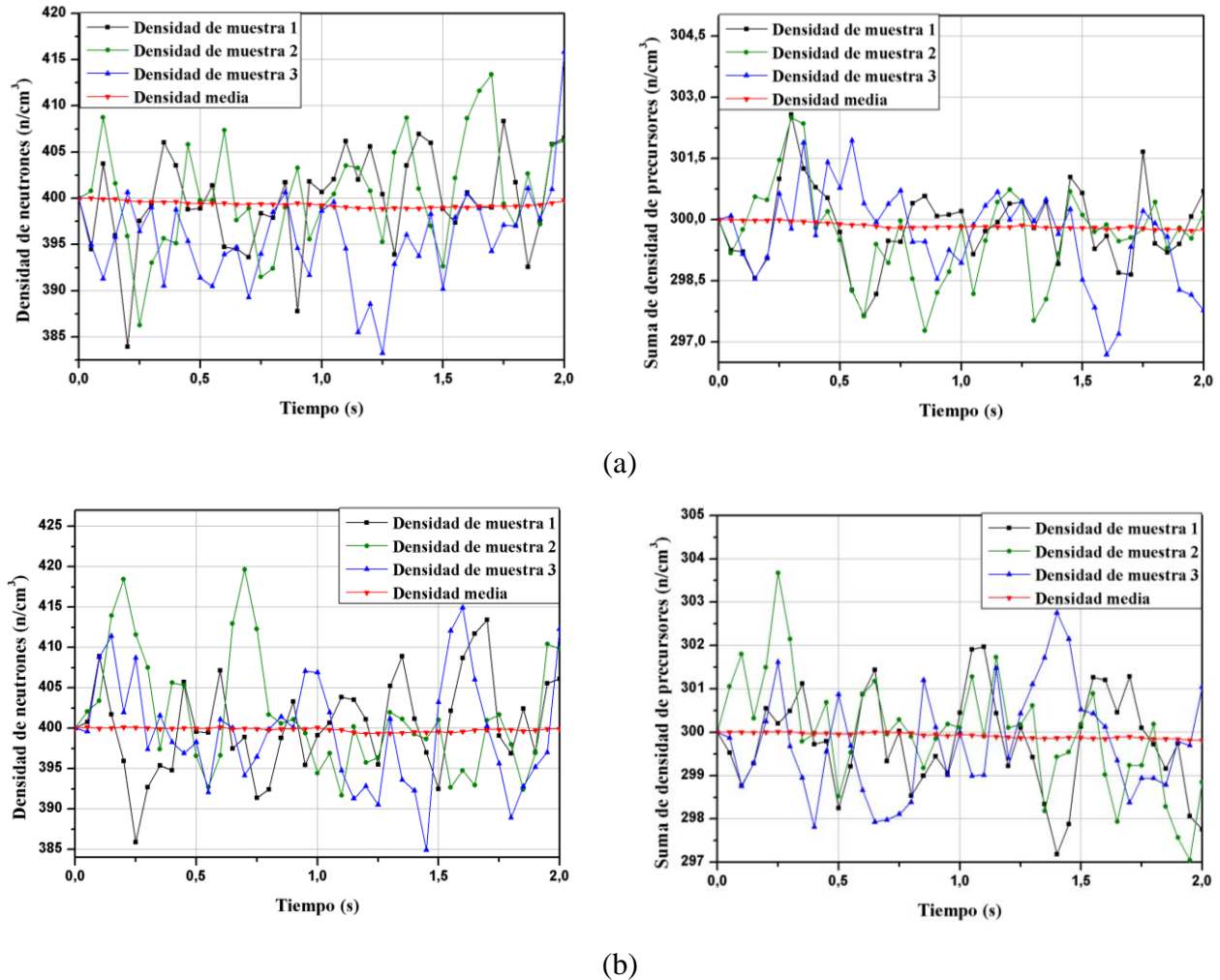
Resultados

En ésta sección se implementa el modelo explícito de Runge-Kutta estocástico orden dos etapa tres descrito por la ecuación (42) con $\bar{\gamma} = \frac{1}{3}$ y el método de Runge-Kutta orden tres según la ecuación (43), usando el software computacional MATLAB. Se desarrollan varios experimentos numéricos donde se considera uno y seis grupos de precursores de neutrones retardados con diferentes formas para la reactividad $\rho(t)$, condiciones iniciales y datos experimentales. Debido a la naturaleza estocástica del proceso dinámico explicado por la ecuación de la cinética puntual, para el desarrollo computacional se consideraron simulaciones numéricas con 5000 trayectorias Brownianas, en la simulación se generó los números pseudoaleatorios con distribución normal con la semilla 200 implementando el comando de Matlab ‘state’. Las aproximaciones obtenidas con el método explícito de Runge-Kutta estocástico orden dos etapa tres (RK2-3st) y orden tres (RK3) son comparadas con métodos reportados en la literatura cómo PCA, Monte Carlo, Taylor 1.5, AEM, ESM, Double DDM y EM implícito. Para comparar con los valores medios se usa el método determinístico de Runge-Kutta orden cuatro (RK $O(h^4)$) con tamaño de paso de $h = 0.001$ s.

4.1 Primer experimento numérico

El primer experimento numérico considera únicamente un grupo de precursores de neutrones retardados en un reactor nuclear, se empleó los siguientes parámetros: constante de decaimiento $\lambda_1 = 0.1s^{-1}$, fracción de neutrones retardados $\beta_1 = \beta = 0.05$, neutrones de fisión $\nu = 2.5$, fuente externa de neutrones $q = 200s^{-1}$, tiempo de generación de neutrones $l = 2/3s$; se empleó una reactividad constante $\rho = -1/3$, $N = 40$ pasos en el intervalo de tiempo $[0,2](s)$ y la condición inicial asume valores de equilibrio $n_{(0)} = 400$ y $c_{1(0)} = 300$. Se muestra gráficamente los resultados obtenidos con el método de Runge-Kutta estocásticos orden dos en la Figura 1(a) y orden tres en la Figura 1(b), en estas figuras se grafican la densidad de neutrones y la suma de densidad de precursores en función del tiempo, se consideran tres densidades de muestras diferentes (línea negra, verde y azul) y la densidad media (línea roja).

Figura 1. Variación de la densidad de neutrones y precursores de neutrones retardados para el primer experimento numérico con reactividad $\rho = -\frac{1}{3}$ (a) con el método de Runge-Kutta estocástico orden dos etapa tres y (b) orden tres.



La Tabla 2 presenta los valores medios y la varianza de la densidad de neutrones y de la concentración del primer grupo de precursores de neutrones retardados. Esta tabla muestra que el método de Runge-Kutta orden dos etapa tres logra vencer el problema de rigidez característico de la cinética puntual, éste método presenta aproximaciones muy cercanas al método de Montecarlo en los valores medios de la densidad de neutrones y de la concentración de precursores; con respecto a la aproximación de segundo momento, el método logra disminuir la varianza de la densidad de neutrones y concentración de precursores comparado el método de Euler-Maruyama explícito. El método de Runge-Kutta estocástico orden tres también logra vencer el problema de rigidez de la cinética puntual, el método presenta aproximaciones muy cercanas al método de Montecarlo en los valores

medios de la densidad de neutrones y la concentración de precursores; la varianza para la suma de precursores con éste método es menor al método PCA y EM, la varianza para la densidad de neutrones es menor al método EM y muy similar a los métodos de Montecarlo, PCA, AEM, Double DDM, implicit EM (Hayes & Allen, 2005) y RK23-st.

Comparando los valores medios de los métodos propuestos, Runge-Kutta estocástico orden dos etapa tres y orden tres, con el método determinístico de Runge-Kutta orden cuatro se observa en la Tabla 2 que los métodos propuestos son eficientes para calcular las ecuaciones de la cinética puntual con reactividad constante y un grupo de precursores de neutrones retardados.

Tabla 2. Comparación de métodos para un problema de un grupo de precursores de neutrones retardados con reactividad $\rho = -\frac{1}{3}$.

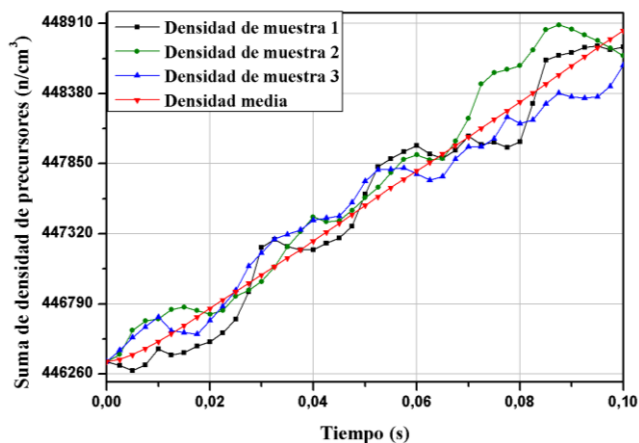
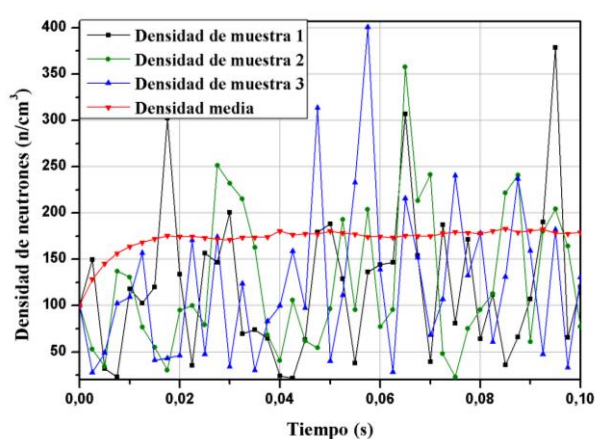
Método	$E[n(2)]$	$\sigma[n(2)]$	$E[\sum_i c_i(2)]$	$\sigma[\sum_i c_i(2)]$
Montecarlo	400.0300	27.3110	300.0000	7.8073
PCA	395.3200	29.4110	300.6700	8.3564
EM	412.2300	34.3910	315.9600	8.2656
AEM	396.2800	31.2120	300.4200	7.9576
ESM	396.6200	0.91990	300.3000	0.0016
Double DDM	402.3500	28.6100	305.8400	7.9240
Implicit EM (Hayes & Allen, 2005)	399.7100	31.4310	299.7700	7.9411
Implicit EM (Suescún Díaz, et al., 2018)	399.9874	0.5439	299.8730	6.8405
RK2-3st	399.7225	31.7264	299.7662	8.0793
RK3	399.9079	31.8857	299.8090	8.1971
RK $O(h^4)$	400.0000	-	300.0000	-

4.2 Segundo y tercer experimento numérico

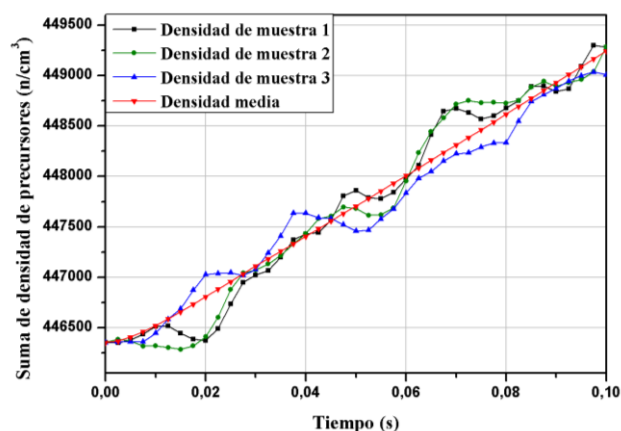
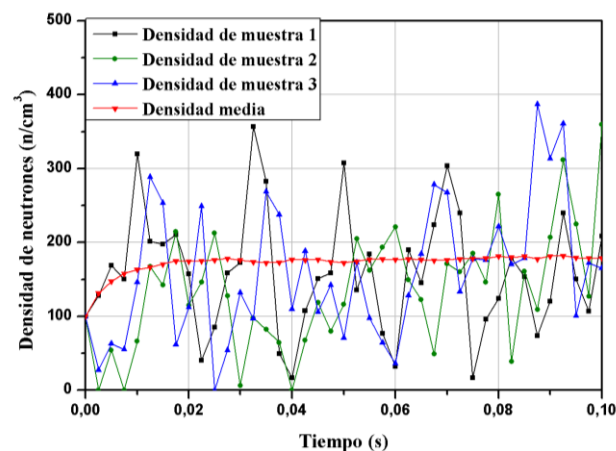
En el segundo y tercer experimento numérico se consideraron seis grupos de precursores de neutrones retardados en un reactor nuclear, se usaron los parámetros característicos de precursores de ${}^{235}_{92}\text{U}$ los cuales corresponden a : constante de decaimiento $\lambda_1 = [0.0127; 0.0317; 0.115; 0.311; 1.4; 3.87]\text{s}^{-1}$, fracción de neutrones retardados $\beta_1 = [0.000266; 0.001491; 0.001316; 0.002849; 0.0000896; 0.000182]$, fracción total de neutrones retardados $\beta = 0.007$, neutrones de fisión $\nu = 2.5$, fuente externa de neutrones $q = 0\text{s}^{-1}$, tiempo de generación de neutrones $l = 0.00002\text{ s}$; para el segundo experimento

numérico se modeló inserción de reactividad constante $\rho = 0.003 pcm$ con $N = 40$ pasos en el intervalo de tiempo $[0,0.1](s)$, y el tercer experimento numérico con $\rho = 0.007$, $N = 40$ pasos en el intervalo de tiempo $[0,0.001](s)$. Las condiciones iniciales para ambos experimentos son $n_{(0)} = 100$ y $c_{i(0)} = 100 \beta_i / (\lambda_i l)$.

Figura 2. Variación de la densidad de neutrones y de la suma de la densidad de precursores para el segundo experimento numérico con reactividad $\rho(t) = 300 pcm$ (a) con el método de Runge-Kutta estocástico orden dos etapa tres y (b) orden tres.

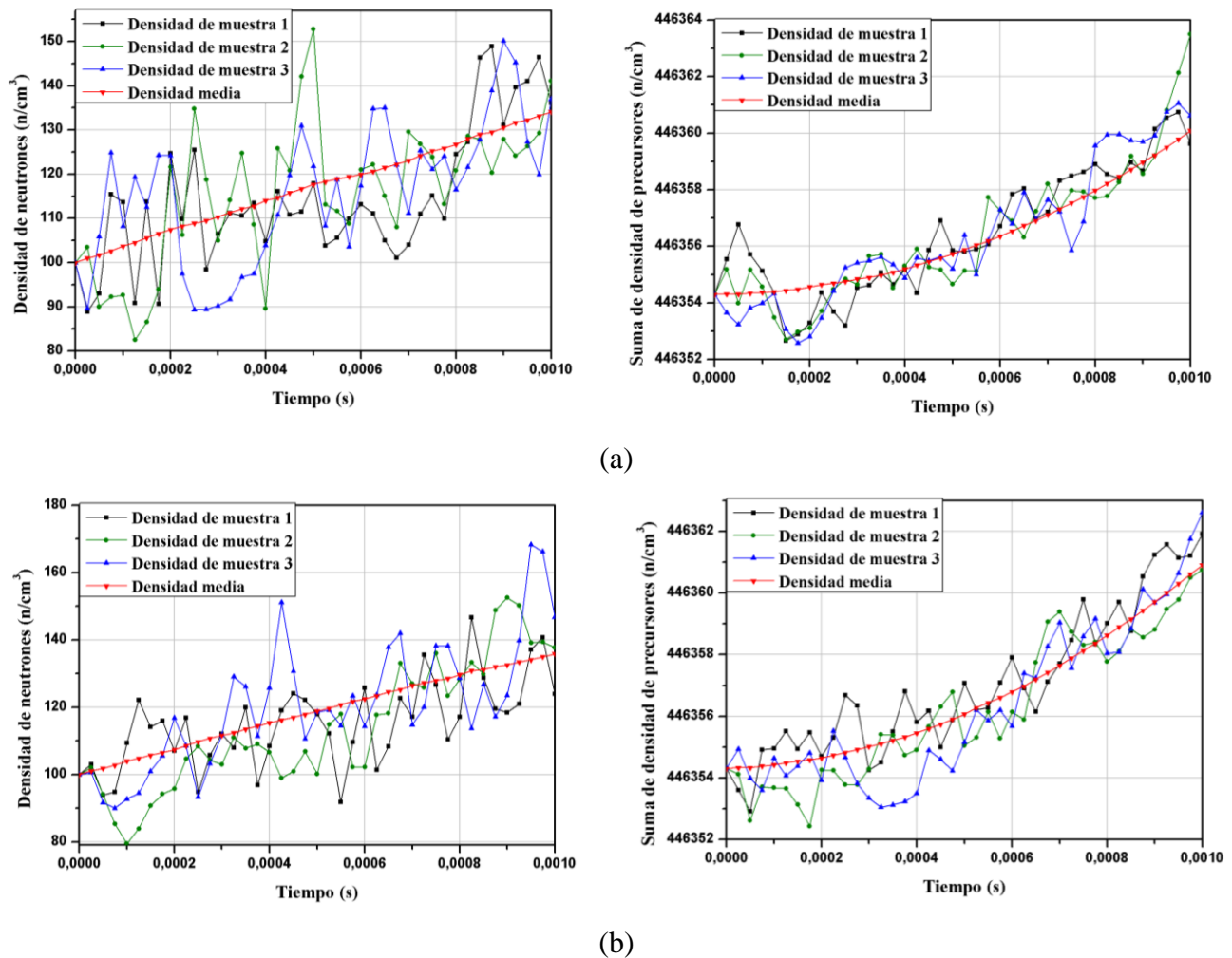


(a)



(b)

Figura 3. Variación de la densidad de neutrones y de la suma de la densidad de precursores para el tercer experimento numérico con reactividad $\rho = 0.007$ pcm (a) con el método de Runge-Kutta estocástico orden dos etapa tres y (b) orden tres.



Los resultados del segundo experimento numérico se presentan gráficamente en la Figura 2 y la Figura 3, los resultados obtenidos con el método de Runge-Kutta estocásticos orden dos para el segundo y tercer experimento se muestran en la Figura 2(a) y Figura 3(a). Los resultados del método de Runge-Kutta estocástico orden tres para el segundo y tercer experimento se presentan en la Figura 2(b) y Figura 3(b), en éstas figuras se grafican la densidad de neutrones y la suma de densidad de precursores en función del tiempo, se consideran tres densidades de muestras diferentes (línea negra, verde y azul) y la densidad media (línea roja) para cada uno de los experimentos numéricos implementados.

Tabla 3. Comparación de métodos para un problema de seis grupos de precursores de neutrones retardados con reactividad $\rho = 0.003$ en el tiempo $t = 0.1s$.

Método	$E[n_{(0.1)}]$	$\sigma[n_{(0.1)}]$	$E\left[\sum_i c_{i(0.1)}\right]$	$\sigma\left[\sum_i c_{i(0.1)}\right]$
Montecarlo	183.0400	168.7900	447800	1495.7000
PCA	186.3100	164.1600	449100	1917.2000
EM	208.6000	255.9500	449800	1233.3800
Taylor 1.5	199.4080	168.5470	449700	1218.820
AEM	186.3000	164.1400	449000	1911.9100
ESM	179.9300	10.5550	448900	94.7500
Double DDM	187.0500	167.8300	448800	1475.6000
Implicit EM (Hayes & Allen, 2005)	178.2700	165.1100	448860	1253.6000
Implicit EM (Suescún Díaz, et al., 2018)	179.9461	0.2178	448880	60.4267
RK2-3st	179.3368	197.3299	448857	2043.8392
RK3	178.9431	186.7942	448854	2009.1295
RK $O(h^4)$	179.9528	-	448877	-

Tabla 4. Comparación de métodos para un problema de seis grupos de precursores de neutrones retardados con reactividad $\rho = 0.007$ en el tiempo $t = 0.001s$.

Método	$E[n_{(0.001)}]$	$\sigma[n_{(0.001)}]$	$E\left[\sum_i c_{i(0.001)}\right]$	$\sigma\left[\sum_i c_{i(0.001)}\right]$
Montecarlo	135.6500	93.3760	446400	16.2260
PCA	134.5500	91.2420	446400	19.4440
EM	139.5680	92.0420	446300	6.0710
Taylor 1.5	139.5690	92.0470	446300	18.3370
AEM	134.5400	91.2340	446400	19.2350
ESM	134.9600	6.8527	446400	2.5290
Double DDM	135.8600	93.2100	446300	17.8450
Implicit EM (Hayes & Allen, 2005)	134.0200	93.2730	446360	18.7760
Implicit EM (Suescún Díaz, et al., 2018)	134.9218	5.9661	446360	6.0686
RK2-3st	134.8104	93.2386	446360	19.2959
RK3	134.4211	95.4977	446360	19.5491
RK $O(h^4)$	135.0009	-	446360	-

La Tabla 3 y Tabla 4 presentan los valores medios y la varianza de la densidad de neutrones y de la suma de densidad de los seis grupos de precursores de neutrones retardados para el segundo y tercer experimento numérico en los tiempos $t = 0.1s$ y $t = 0.001s$. En la Tabla 3 se evidencia que con el método de Runge-Kutta estocástico orden dos etapa tres se obtienen buenas aproximaciones en valores medios de la densidad de neutrones y la concentración de

precursores de neutrones retardados, éstos valores son cercanos a las aproximaciones del método de Euler-Maruyama implícito; comparado con el método de Euler-Maruyama explícito éste método presenta menor varianza en la densidad de neutrones, sin embargo, hay un aumento en la varianza de la suma de la densidad de precursores comparado con los métodos reportados en la literatura.

La Tabla 3 muestra que el método de Runge-Kutta estocástico orden tres obtiene valores medios de la densidad de neutrones y suma de densidad de precursores muy próximos a los valores reportados en la literatura, la varianza de la densidad de neutrones obtenida con el método RK3s es menor a la reportado con el método EM y RK2-3st y la varianza de la suma de la densidad de precursores es similar a los reportados con el método Montecarlo, PCA, EM, Taylor 1.5 AEM, implicit EM (Hayes & Allen, 2005) y RK2-3st. Comparando los valores medios de los métodos propuestos, Runge-Kutta estocástico orden dos etapa tres y orden tres, con el método determinístico de Runge-Kutta orden cuatro se observa en la Tabla 3 que los métodos propuestos son eficientes para calcular las ecuaciones de la cinética puntual con reactividad lineal y seis grupos de precursores de neutrones retardados.

Los resultados obtenidos para el tercer experimento numérico se muestran en la Tabla 4, se observa que los valores medios encontrados para la densidad de neutrones y la suma de la densidad de precursores con el método de Runge-Kutta estocástico orden dos etapa tres son valores cercanos a los métodos reportados en la literatura. La varianza de la densidad de neutrones es menor al método de Montecarlo y implicit EM (Hayes & Allen, 2005), y la varianza de la suma de densidad de precursores son valores muy similares a los métodos de PCA, EM, Taylor 1.5, AEM y Double DDM. Los valores obtenidos al calcular las ecuaciones de la cinética puntual con el método de Runge-Kutta estocástico orden tres se reportan en la Tabla 4, se observa que los valores medios son de muy buena aproximación para la densidad de neutrones y la suma de densidad de precursores, con respecto a la varianza calculada por el RK3 para la densidad de neutrones y la suma de densidad de precursores son similares a las reportadas por Montecarlo, PCA, EM, Taylor 1.5, AEM y Double DDM. Para éste experimento numérico se encuentra que el método estocástico de Runge-Kutta orden tres presenta mayores fluctuaciones en los valores de la densidad de neutrones y la suma de

densidad de precursores que el método de Runge-Kutta estocástico orden dos etapa tres, generando así un aumento en las varianzas.

Comparando los valores medios de los métodos propuestos, Runge-Kutta estocástico orden dos etapa tres y orden tres, con el método determinístico de Runge-Kutta orden cuatro se observa en la Tabla 3 y Tabla 4 que los métodos propuestos son eficientes para calcular las ecuaciones de la cinética puntual con reactividad constante y seis grupos de precursores de neutrones retardados.

4.3 Cuarto experimento numérico

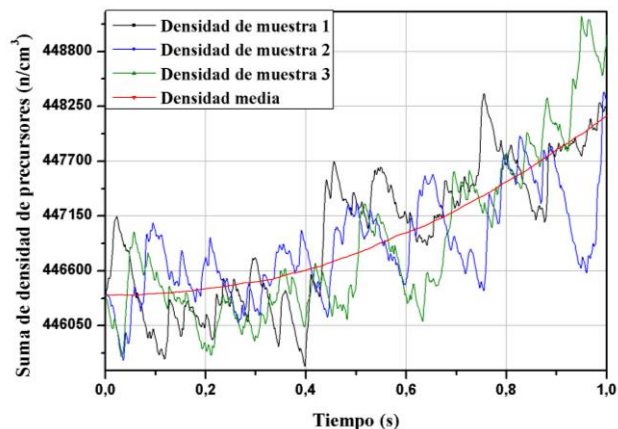
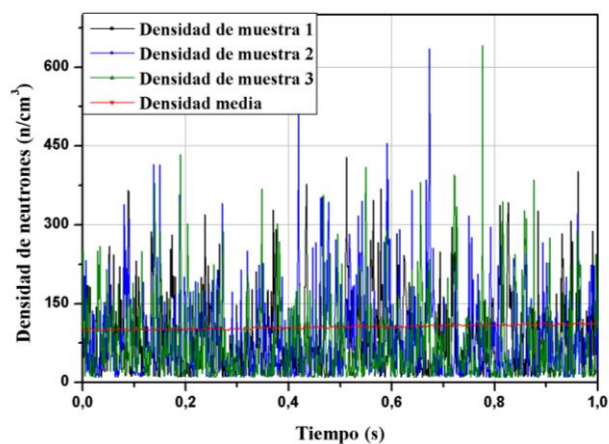
El cuarto experimento numérico al igual que el segundo y tercero, considerara parámetros característicos de precursores del $^{235}_{92}\text{U}$, con una reactividad lineal $\rho(t) = 0.1\beta t$ en el intervalo de tiempo $[0, 1](s)$ con un tamaño de paso de $h = 0.01 s$. Se muestra gráficamente los resultados obtenidos para el cuarto experimento numérico con el método de Runge-Kutta estocásticos orden dos en la Figura 4 (a) y orden tres en la Figura 4 (b), en éstas figuras se grafican la densidad de neutrones y la suma de densidad de neutrones en función del tiempo, se consideran tres densidades de muestras diferentes (línea negra, verde y azul) y la densidad media (línea roja). La Tabla 5 presenta los valores medios y la varianza de la densidad de neutrones y de la suma de la concentración de los seis grupos de precursores de neutrones retardados para el cuarto experimento numérico en el tiempo $t = 1s$.

La Tabla 5 muestra los resultados obtenidos para el cuarto experimento numérico. Cuando se considera un tamaño de paso de $h = 0.01 s$ y una reactividad lineal se obtiene aproximaciones muy lejanas a los valores medios de la densidad de neutrones y la suma de precursores de neutrones retardaos, evidenciando que el método de Runge-Kutta estocástico orden dos etapa tres con tamaño de paso de $h = 0.01 s$ no logra superar el problema de rigidez de la cinética puntual, debido a éste inconveniente se puede pensar que el método debe implementar pequeños incrementos en el tiempo para lograr vencer la propiedad de Stiffnes y así obtener buenas aproximaciones numéricas, sin embargo, ésta restricción hace que el método de Runge-Kutta orden dos etapa tres presente mayor costo computacional. Al calcular nuevamente el cuarto experimento numérico, pero ésta vez considerando un tamaño

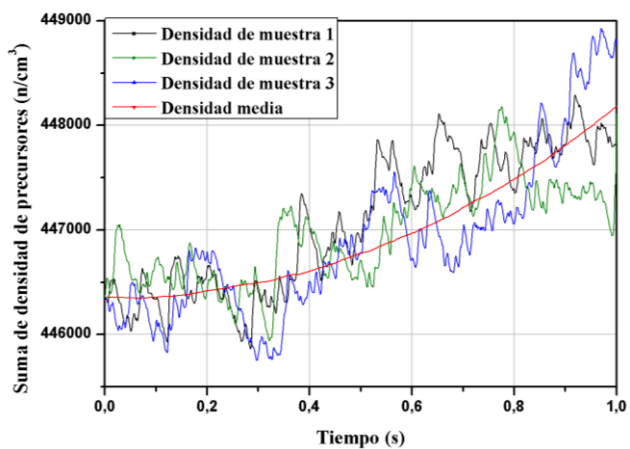
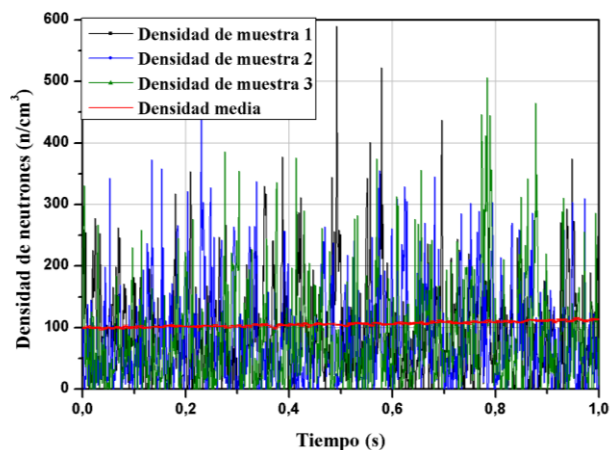
de paso más pequeño $h = 0.001 s$, se observa en la Tabla 5 que el método de Runge-Kutta estocástico orden dos etapa tres logra superar el problema de rigidez. La Tabla 5 evidencia que con el método de Runge-Kutta estocástico orden dos etapa tres con tamaño de paso $h = 0.001 s$ se obtienen valores medios de la densidad de neutrones y de la suma de densidad de precursores de neutrones retardados muy cercanos al método de PCA, AEM, ESM, Implicit EM (Hayes & Allen) y Implicit EM (Suescún Díaz, et al., 2018). Los valores de la varianza de la densidad de neutrones y de la suma de densidad de precursores superan a los valores reportados en la literatura, lo cual evidencia que los valores esperados presentan muchas fluctuaciones.

Al solucionar el cuarto experimento numérico con el método de Runge-Kutta estocástico orden tres con tamaño de paso de $h = 0.01 s$, se encuentra que el método logra vencer el problema de rigidez característico de la cinética puntual estocástica sin embargo no se obtienen valores medios cercanos a los reportados en la literatura. Por ésta razón, se resuelve nuevamente éste experimento numérico con el método de Runge-Kutta estocástico orden tres con un tamaño de paso más pequeño $h = 0.001 s$. La Tabla 5 evidencia que al disminuir el tamaño de paso los valores medios obtenidos son muy cercanos al método de PCA, AEM, ESM, Implicit EM (Hayes & Allen) y Implicit EM (Suescún Díaz, et al., 2018). La varianza de la densidad de neutrones con el método de Runge-Kutta orden tres es menor a la encontrada con el método de Runge-Kutta orden dos etapa tres, la varianza de la suma de densidad de precursores encontrada con el método de Runge-Kutta estocástico orden tres es muy cercana a los valores reportados con el método de PCA, AEM, implicit EM (Hayes & Allen, 2005) y RK2-3st. Comparando los valores medios de los métodos propuestos, Runge-Kutta estocástico orden dos etapa tres y orden tres con tamaño de paso $h = 0.001 s$, con el método determinístico de Runge-Kutta orden cuatro se observa en la Tabla 5 que los métodos propuestos son eficientes para calcular las ecuaciones de la cinética puntual con reactividad lineal para seis grupos de precursores de neutrones retardados.

Figura 4. Variación de la densidad de neutrones y de la suma de la densidad de precursores para el cuarto experimento numérico con reactividad lineal $\rho(t) = 0.1\beta t$ con (a) el método de Runge-Kutta estocástico orden dos etapa tres y (b) orden tres.



(a)



(b)

Tabla 5. Comparación de métodos para un problema de seis grupos de precursores de neutrones retardados con reactividad $\rho(t) = 0.1\beta t$ en el tiempo $t = 1s$.

Método	$E[n_{(1)}]$	$\sigma[n_{(1)}]$	$E\left[\sum_i c_{i(1)}\right]$	$\sigma\left[\sum_i c_{i(1)}\right]$
PCA	113.268077	13.330142	448239.864	3009.93141
AEM	113.267707	13.327291	448239.798	3002.68282
ESM	113.116433	4.111150	448253.780	47.203115
Implicit EM (Hayes & Allen, 2005)	112.050563	71.38024	448269.195	3078.38040
Implicit EM (Suescún Díaz, et al., 2018)	113.092600	0.277000	448350.000	191.22840
RK2-3st ($h = 0.01 s$)	1.0000E+02	1.6536E+52	3.7556E+52	7.2510E+02
RK3 ($h = 0.01 s$)	332.6194	318.7351	511383.4770	5961.9237
RK2-3st ($h = 0.001 s$)	113.196938	120.254207	448156.268	3151.84665
RK3 ($h = 0.001 s$)	113.963378	118.643346	448184.406	3014.57606
RK $O(h^4)$	113.074674	-	448232.321	-

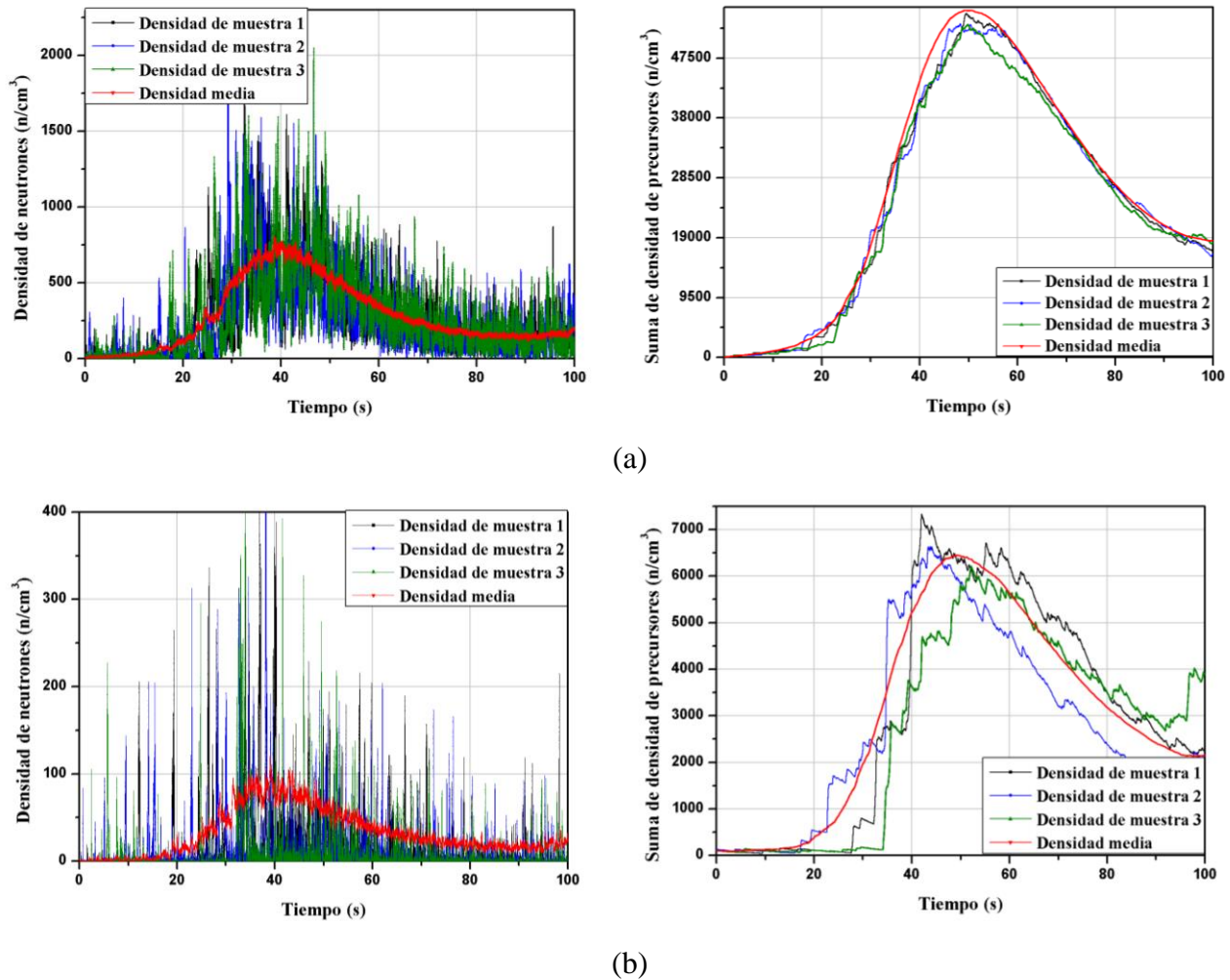
4.4 Quinto experimento numérico

Para el último experimento numérico se consideró un grupo de precursores de neutrones retardados en un reactor nuclear con los siguientes parámetros: constante de decaimiento $\lambda_1 = 0.077s^{-1}$, fracción de neutrones retardados $\beta_1 = \beta = 0.0079$, neutrones de fisión $\nu = 2.5$, fuente externa de neutrones $q(t) = 0s^{-1}$, tiempo de generación de neutrones $l = 10^{-3} s$; reactividad sinusoidal $\rho(t) = \rho_o \sin(\pi t/T)$ con $\rho_o = 0.005333$, periodo del reactor $T = 50 s$, con la condición inicial $n_{(0)}1$ y $c_{1(0)} = \beta_1/\lambda_1 l$, para $N = 10^5$ pasos en el intervalo de tiempo $[0,100](s)$ con 100 trayectorias.

Se muestra gráficamente los resultados obtenidos con el método de Runge-Kutta estocásticos orden dos en la Figura 5 (a) y orden tres en la Figura 5 (b), en éstas figuras se grafican la densidad de neutrones y la suma de densidad de precursores en función del tiempo, se consideran tres densidades de muestras diferentes (línea negra, verde y azul) y la densidad media (línea roja). La Figura 5 evidencia poca homogeneidad en los valores medios de la densidad de neutrones, estas grandes variaciones generan aproximaciones de baja precisión

de los valores medios y aumento en los valores de la varianza en la densidad de neutrones y la suma de precursores de neutrones retardados.

Figura 5. Variación de la densidad de neutrones y de la suma de la densidad de precursores para el quinto experimento numérico con reactividad sinusoidal (a) con el método de Runge-Kutta estocástico orden dos etapa tres y (b) orden tres.



La Tabla 6 presenta los valores medios y la varianza de la densidad de neutrones y de la suma de densidad de precursores de neutrones retardados para el quinto experimento numérico en el tiempo $t = 100s$. Los resultados obtenidos para el quinto experimento numérico reflejan que el método estocástico de Runge-Kutta orden dos etapa tres y orden tres logran vencer la propiedad de Stiffness de la cinética puntual. La Tabla 6 muestra que los valores medios de la densidad de neutrones y de la suma de densidad de precursores obtenidos con el método de Runge-Kutta estocástico orden dos etapa tres es cercana a la reportada por el método de

PCA y AEM, sin embargo éstos valores son altos comparados con el método de ESM, Implicit EM (Hayes & Allen, 2005) y Implicit EM (Suescún Díaz, et al., 2018). El cálculo de la varianza de la densidad de neutrones y de la suma de densidad de precursores con el método de Runge-Kutta estocástico orden dos etapa tres es mayor a los métodos reportados en la literatura, lo cual se evidencia en las fluctuaciones de los valores medios.

Tabla 6. Comparación de métodos para un problema de un grupo de precursores de neutrones retardados con reactividad $\rho(t) = \rho_0 \text{Sin}(\pi t/T)$ en el tiempo $t = 100s$.

Método	$E[n_{(100)}]$	$\sigma[n_{(100)}]$	$E[\sum_i c_{i(100)}]$	$\sigma[\sum_i c_{i(100)}]$
PCA	187.169345	205.436429	19221.5377	14633.60630
AEM	188.418233	205.776440	19363.9223	14687.71010
ESM	12.539431	2.855346	1294.4320	291.57200
Implicit EM (Hayes & Allen, 2005)	9.5792768	51.852229	1294.1960	5988.43400
Implicit EM (Suescún Díaz, et al., 2018)	12.186600	1.550900	1256.6000	159.79770
RK2-3st	204.060819	258.668757	18594.58000	20194.62187
RK3	23.783789	92.039032	2157.91602	7090.579782
RK O(h^4)	12.439144	-	1282.9033	-

La Tabla 6 también muestra los valores medios y la varianza de la densidad de neutrones y de la suma de precursores obtenidos con el método de Runge-Kutta estocástico orden tres. Los valores medios de la densidad de neutrones y de la suma de densidad de precursores encontrados con el método de Runge-Kutta estocástico orden tres es de mejor precisión que los reportado por el método de PCA, AEM y el encontrado con el método RK2-3st. La varianza de la densidad de neutrones y de la suma de densidad de precursores encontrados con el método propuesto es menor a las reportadas por el método de PCA, AEM y RK2-3st. La Tabla 6 muestra que el método de Runge-Kutta estocástico orden tres genera mejores aproximaciones que el método de orden dos. Comparando los valores medios de los métodos propuestos, Runge-Kutta estocástico orden dos etapa tres y orden tres, con el método determinístico de Runge-Kutta orden cuatro se observa en la Tabla 6 que los métodos

propuestos son eficientes para calcular las ecuaciones de la cinética puntual con reactividad sinusoidal para seis grupos de precursores de neutrones retardados.

4.5 Sexto experimento numérico

El último experimento numérico resuelve las ecuaciones de la cinética puntual estocástica con reactividad $\rho = 0.0055$, seis grupos de precursores de neutrones retardados. Para el sexto experimento numérico se consideran los siguientes parámetros: constante de decaimiento $\lambda_1 = [0.0127; 0.0317; 0.115; 0.311; 1.4; 3.87] s^{-1}$, fracción de neutrones retardados son $\beta_i = [0.000266; 0.001491; 0.001316; 0.002849; 0.0000896; 0.000182]$, fracción total de neutrones retardados es $\beta = 0.007$, neutrones de fisión $\nu = 2.5$, fuente externa de neutrones $q = 0 s^{-1}$, tiempo de generación de neutrones $l = 0.00002 s$; con condiciones iniciales de $n_{(0)} = 100$ y $c_{i(0)} = 100 \beta_i / (\lambda_i l)$. El experimento numérico se desarrolla con un tamaño de paso de $N = 40$ en el intervalo de tiempo $[0, 0.1](s)$. Se muestra gráficamente los resultados obtenidos con el método de Runge-Kutta estocásticos orden dos en la Figura 6(a) y orden tres en la Figura 6(b), en éstas figuras se grafican la densidad de neutrones y la suma de densidad de precursores en función del tiempo, se consideran tres densidades de muestras diferentes (línea negra, verde y azul) y la densidad media (línea roja).

La Tabla 7 muestra los valores medios y la varianza de la densidad de neutrones y de la concentración de un grupo de precursor de neutrones retardados para el sexto experimento numérico en el tiempo $t = 0.1s$. En la actualidad no se encuentran reportada la solución numérica de las ecuaciones de la cinética puntual estocástica con reactividad subcrítica $\rho = 0.0055$ para seis grupos de precursores en el intervalo de tiempo $[0, 0.1](s)$, por éste motivo los resultados obtenidos no son comparados con otros métodos estocásticos. Los resultados obtenidos con el método de Runge-Kutta estocástico orden dos etapa tres y orden tres son presentados también en la Tabla 7. Los resultados de las aproximaciones de los valores medios de la densidad de neutrones y de la concentración de precursores muestra que los métodos propuestos son de buena aproximación numérica.

Figura 6 Variación de la densidad de neutrones y de la suma de la densidad de precursores para el sexto experimento numérico con reactividad $\rho = 0.0055$ (a) con el método de Runge-Kutta estocástico orden dos etapa tres y (b) orden tres.

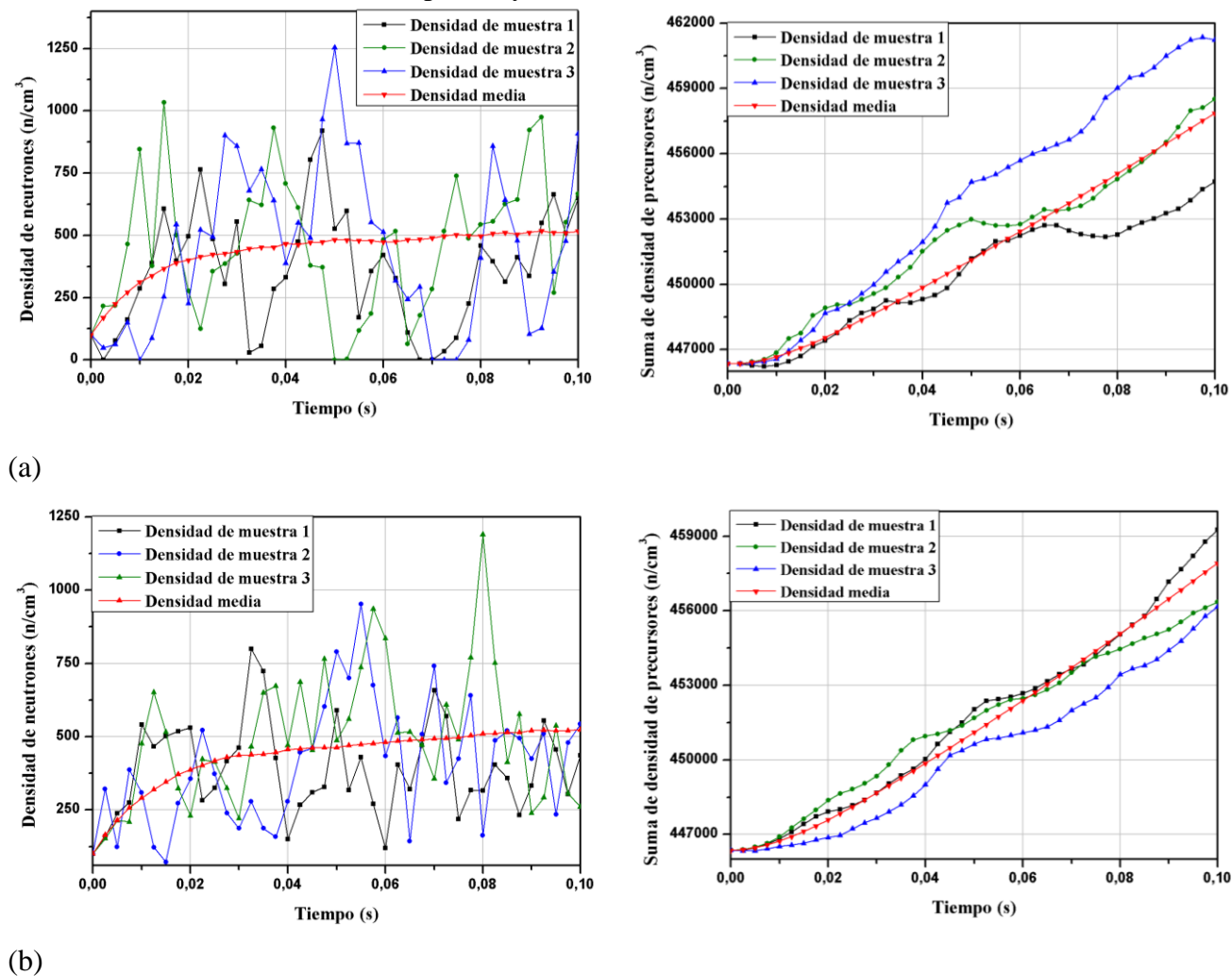


Tabla 7 Comparación de métodos para un problema de seis grupos de precursores de neutrones retardados con reactividad $\rho = 0.0055$ en el tiempo $t = 0.11s$.

Método	$E[n_{(0.1)}]$	$\sigma[n_{(0.1)}]$	$E[\sum_i c_{i(0.1)}]$	$\sigma[\sum_i c_{i(0.1)}]$
RK2-3st	515.93720	534.30589	457864.356252	7656.63182
RK3	523.77963	524.61777	457918.441219	7764.85061
RK $O(h^4)$	521.00284	-	458006.33500	-

Capítulo 5

Conclusiones

El análisis de las ecuaciones de la cinética puntual permite conocer la dinámica del reactor, es decir conocer la densidad de población de neutrones y la concentración de precursores de neutrones retardados del reactor a lo largo de un intervalo de tiempo; bajo éste análisis se conoce que la operatividad del proceso dinámico real de un reactor nuclear es de naturaleza estocástico. Estas ecuaciones diferenciales estocásticas son no lineales y están fuertemente acopladas para la densidad de neutrones y la concentración del i -ésimo grupo de precursores de neutrones retardados. Al tener presente estas características y querer dar solución a las ecuaciones de la cinética puntual estocástica, es necesario implementar métodos de derivación numérica que venzan la propiedad de Stiffness.

Con fin de dar solución a la ecuación de la cinética puntual estocástica y conocer el valor medio y la varianza de la densidad de población de neutrones y de la concentración de precursores de neutrones retardados, este trabajo de investigación propuso implementar el método explícito de Runge-Kutta estocástico orden dos etapa tres y orden tres. Para los experimentos numéricos donde se considera reactividad constante para uno y seis grupos de precursores de neutrones retardados, los métodos propuestos vencen la propiedad de Stiffness de la cinética puntual. Para el caso de reactividad lineal en seis grupos de precursores el método de Runge-Kutta estocástico orden dos etapa tres para un tamaño de paso $h = 0.01$ s no logra vencer la propiedad de Stiffness, debido a éste problema de rigidez se concluye que existe una restricción de incrementos muy pequeños de tiempo en las soluciones numéricas de las ecuaciones de la cinética puntual estocástica con reactividad lineal; para éste mismo experimento numérico implementando el mismo tamaño de paso, método de Runge-Kutta orden tres si se obtienen valores medios, sin embargo no son valores cercanos a los reportados en la literatura por tanto se hace necesario disminuir el tamaño de paso. El cálculo de las ecuaciones de la cinética puntual con reactividad sinusoidal para seis grupos de precursores de neutrones retardados con el método de Runge-Kutta estocástico orden dos etapa tres y orden tres, presenta aproximaciones regulares en cada tamaño de paso; a pesar de éstas variaciones de los valores medios, los métodos propuestos superan el problema de rigidez.

Con respecto a los valores medios de la densidad de neutrones y la suma de densidad de precursores de neutrones retardados, los métodos de Runge-Kutta estocástico orden dos etapa tres y orden tres proporcionan buenas aproximaciones comparado con otros métodos reportados en la literatura cuando se desarrollan experimentos numéricos para las ecuaciones de la cinética puntual estocástica con reactividad constante considerando uno y seis grupos de precursores de neutrones retardados.

Los métodos propuestos poseen un beneficio computacional debido a que no es necesario calcular analíticamente la raíz cuadrada de la matriz \widehat{B} , logrando disminuir el costo computacional y obtener mejores aproximaciones para el cálculo del valor medio de la densidad de neutrones y de la concentración de precursores de neutrones retardados. Además, el método de Runge-Kutta estocástico orden tres tiene una gran ventaja sobre otros métodos de derivación numérica, debido a que éste método no requiere calcular ningún tipo de derivadas para la función de la matriz de covarianza \widehat{B} .

En un posible trabajo futuro, la densidad de población de neutrones y la concentración de precursores de neutrones retardados podrían aproximarse con el método de Runge-Kutta estocástico implícito, teniendo en cuenta la restricción obtenida para la solución numérica de las ecuaciones de la cinética puntual estocástica con reactividad lineal se esperaría que éste método logre vencer el problema de rigidez y obtener valores medios con mejor aproximación.

Éste trabajo de investigación será presentado en el VII Congreso de Matemática Aplicada, Computacional e Industrial del 8 al 10 de Mayo en la ciudad de Rio Cuarto, Argentina. Se escribieron dos artículos para someter a revistas nacionales y se está terminando un artículo para someter a una revista internacional.

Referencias

- Aboanber, A. E., & Hamada, Y. M. (2002b). PWS: an efficient code system for solving spaceindependent nuclear reactor dynamics. *Annals of Nuclear Energy*, 29, 2159-2172.
- Allen, E. (2007). *Modeling with Itô stochastic point kinetics equations in nuclear reactor dynamics*. Springer.
- Da Silva, M., Vasques, R., Bodmann, B., & Vilhena, M. (2016). A nonstiff solution for the stochastic neutron point kinetics equations. *Annals of Nuclear Energy*, 49, 47-52.
- Hamanda, Y. M., & Aboanber, A. E. (2002a). Generalization of the analytical inversion method for the solution of the point kinetics equations. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 35, 3245-3263.
- Hayes, J. G., & Allen, E. J. (2005). Development of stochastic point kinetics equations in nuclear reactor dynamics. *Annals of Nuclear Energy*, 32, 572-587.
- Houchmandzadeh, B., Dumonteil, E., Mazzol, A., & Zoia, A. (2015). Neutron fluctuations: the importance of being delayed. *Physical Review E*, 92.
- Kinard, M., & Allen, E. J. (2004). Efficient numerical solution of the point kinetics equations in nuclear reactor dynamics. *Annals of Nuclear Energy*, 31, 1039-1051,.
- Kloeden, P. E., & Platen, E. (1992). *Numerical solution of stochastic differential equations*. Berlin: Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- Lamarsh, J. R. (2002). *Introduction to Nuclear Reactor Theory*. Addison Wesley Publishing Company.
- Mohsen Ayyoubzadeh, S., & Vosoughi, N. (2014). An alternative stochastic formulation for the point reactor. *Annals Nuclear Energy*, 63, 691-695.
- Nahla, A., & Edress, A. (2016a). Analytical exponential model for stochastic point kinetic equations via eigenvalues and eigenvectors. *Nuclear ScienceTechnology*.
- Nahla, A., & Edress, A. (2016b). Efficient stochastic model for the point kinetics equations. *Stochastic Analysis and Applications*, 34(4), 598-609.
- Roussas, G. G. (2015). *An Introduction to Probability and Statistical Inference* (2 ed.). Academic Press. doi:<https://doi.org/10.1016/C2012-0-13559-6>
- Saha Ray, S. (2012). Numerical simulation of stochastic point kinetic equations in the dynamical system of nuclear reactor. *Annals of Nuclear Energy*, 49, 154-159.

- Saha Ray, S., & Patra, A. (2013a). Numerical simulation for stochastic point kinetic equations with sinusoidal reactivity in dynamical system of nuclear reactor. *International Journal of Nuclear Energy Science and Technology*, 7, 231-242.
- Saha Ray, S., & Patra, A. (2013b). Numerical solution of fractional stochastic neutron point kinetic equation for nuclear reactor dynamics. *Annals of Nuclear Energy*, 54, 153-161.
- Stacey, W. M. (2018). *Nuclear Reactor Physics* (3 ed.). Wiley-VCH.
- Suescún Díaz, D., Flórez Ospina, J., & Rodríguez Sarasty, J. (2012). Hamming method for solving the delayed neutron precursor concentration for reactivity calculation. *Annals of Nuclear Energy*, 42, 47-49.
- Suescún Díaz, D., Oviedo Torres, Y., & Girón Cruz, L. (2018). Solution of the stochastic point kinetics equations using the implicit Euler-Maruyama method. *Annals of Nuclear Energy*, 117, 45-52.
- Tocino, A., & Ardanuy, R. (2002). Runge-Kutta methods for numerical solution of stochastic differential equations. *Journal Computational and applied mathematic*, 138, 219-241.

Apéndice

Apéndice A: Ecuación de la cinética puntual determinística

La ecuación espacial de la cinética determinística está dada por

$$\begin{aligned} \frac{\partial N(r, t)}{\partial t} = Dv \nabla^2 N(r, t) - \left(\sum_a - \sum_f \right) vN(r, t) \\ + \left[(1 - \beta)K_\infty \sum_a - \sum_f \right] vN(r, t) + \sum_{i=1} \lambda_i C_i(r, t) + S_0(r, t) \end{aligned} \quad (i)$$

$$\frac{\partial C_i(r, t)}{\partial t} = \beta_i K_\infty \sum_a vN(r, t) - \lambda_i C_i(r, t) \quad (ii)$$

La ecuación (i) corresponde a la ecuación de difusión de neutrones y la ecuación (ii) es la ecuación de concentración de precursores de neutrones retardados. Donde m es el número de grupo de precursores de neutrones retardados, $i = 1, \dots, m$, $N(r, t)$ es el flujo de neutrones, $C_i(r, t)$ es la concentración del i -ésimo grupo de precursores de neutrones retardados, v es la velocidad de neutrones de fisión. El término $Dv \nabla^2 N(r, t)$ explica la difusión de neutrones, Σ_a es la sección transversal de absorción, Σ_f es la sección transversal de fisión, $\Sigma_a - \Sigma_f$ es la sección transversal de captura, la contribución de neutrones a la fuente está dada por el término $[(1 - \beta)K_\infty \Sigma_a - \Sigma_f] vN(r, t)$, β_i es la fracción de neutrones retardados del i -ésimo grupo de precursores, β es la fracción total de neutrones retardados, $(1 - \beta)$ es la fracción de neutrones rápidos, K_∞ es el factor de multiplicación en un medio infinito, $\sum_{i=1} \lambda_i C_i(r, t)$ es la tasa de transformación de precursores de neutrones a la población de neutrones, λ_i es la constante de decaimiento del i -ésimo grupo de precursores y $S_0(r, t)$ es la Fuente de neutrones extraños.

Se propone que el flujo de neutrones y la concentración de precursores son funciones separables en el tiempo y en el espacio

$$\begin{aligned} N(r, t) &= f(r)n(t) \\ C_i(r, t) &= g(r)c_i(t) \end{aligned} \quad (iii)$$

Donde $n(t)$ es la densidad de población de neutrones y $c_i(t)$ es la densidad de población del i -ésimo grupo de precursores de neutrones retardados. Reemplazando la ecuación (iii) en la ecuación (i) se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(t)}{\partial t} = D\nu \frac{\nabla^2 f(r)}{f(r)} n(t) - \left(\sum_a - \sum_f \right) \nu n(t) + \left[(1 - \beta) K_\infty \sum_a - \sum_f \right] \nu n(t) \\ + \sum_{i=1} \lambda_i \frac{g(r)}{f(r)} c_i(t) + \frac{S_0(r, t)}{f(r)} \end{aligned} \quad (\text{iv})$$

Se propone que el flujo de neutrones espacialmente se mantiene en forma armónica, éste flujo corresponde a una ecuación de Helmholtz

$$\nabla^2 f(r) + B_0^2 f(r) = 0 \quad (\text{v})$$

donde B_0^2 es el Buckling geométrico, también se considera que $\frac{g(r)}{f(r)} = 1$ debido a que $\frac{g(r)}{f(r)}$ es independiente del tiempo, y teniendo en cuenta que $S_0(r, t)$ tiene la misma dependencia espacial que $f(r)$ se propone que $q(t) = \frac{S_0(r, t)}{f(r)}$. Reemplazando estas consideraciones en la ecuación (iv) se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(t)}{\partial t} = -D\nu B_0^2 n(t) - \left(\sum_a - \sum_f \right) \nu n(t) + \left[(1 - \beta) K_\infty \sum_a - \sum_f \right] \nu n(t) \\ + \sum_{i=1} \lambda_i c_i(t) + q(t) \end{aligned} \quad (\text{vi})$$

Ahora se reemplaza la ecuación (iii) en la ecuación (ii) se obtiene

$$\frac{\partial c_i(t)}{t} = \beta_i K_\infty \sum_a \nu n(t) - \lambda_i c_i(t) \quad (\text{vii})$$

La ecuación (vii) corresponde a la densidad de neutrones y se puede separar en los términos dados en la Tabla I.

Tabla I. Términos de la ecuación de densidad de neutrones

Capturas	$-D\nu B_0^2 n(t) - \left(\sum_a - \sum_f \right) \nu n(t)$
Nacimientos	$\left[(1 - \beta) K_\infty \sum_a - \sum_f \right] \nu n(t)$
Transformaciones	$\sum_{i=1} \lambda_i c_i(t)$
Fuente externa	$q(t)$

Se introduce el término de duración de absorción $l_\infty = \frac{1}{\nu \Sigma_a}$ y el término de longitud de difusión $L^2 = \frac{D}{\Sigma_a}$ en la ecuación (vi) y (vii)

$$\frac{\partial n(t)}{\partial t} = \left[-\frac{L^2 B_0^2 + 1}{l_\infty} + \frac{\Sigma_f}{l_\infty \Sigma_a} \right] n(t) - \left[\frac{K_\infty}{l_\infty} - \frac{\Sigma_f}{l_\infty \Sigma_a} \right] n(t) - \frac{\beta K_\infty}{l_\infty} n(t) + \sum_{i=1} \lambda_i c_i(t) + q(t) \quad (\text{viii})$$

$$\frac{\partial c_i(t)}{\partial t} = \beta_i K_\infty \sum_a \nu n(t) - \lambda_i c_i(t) \quad (\text{ix})$$

En la ecuación (viii) y (ix) se introduce el término de factor de reproducción $k = \frac{K_\infty}{L^2 B_0^2 + 1}$ y el término de duración del neutrón $l_0 = \frac{l_\infty}{L^2 B_0^2 + 1}$, quedando así

$$\frac{\partial n(t)}{\partial t} = \left[-\frac{1}{l_0} + \frac{\Sigma_f}{l_\infty \Sigma_a} \right] n(t) - \left[\frac{k}{l_\infty} - \frac{\Sigma_f}{l_\infty \Sigma_a} \right] n(t) - \frac{\beta k}{l_0} n(t) + \sum_{i=1} \lambda_i c_i(t) + q(t) \quad (\text{x})$$

$$\frac{\partial c_i(t)}{\partial t} = \frac{\beta_i k}{l_0} n(t) - \lambda_i c_i(t) \quad (\text{xii})$$

Ahora se considera que el tiempo de generación de neutrones está dado por $\mathbf{l} = \frac{l_0}{k}$

$$\frac{\partial n(t)}{\partial t} = \left[-\frac{1}{l} + \frac{\Sigma_f}{l_\infty \Sigma_a} \right] n(t) - \left[\frac{1}{l} - \frac{\Sigma_f}{l_\infty \Sigma_a} \right] n(t) - \frac{\beta}{l} n(t) + \sum_{i=1} \lambda_i c_i(t) + q(t) \quad (\text{xiii})$$

$$\frac{\partial c_i(t)}{\partial t} = \frac{\beta_i}{l} n(t) - \lambda_i c_i(t) \quad (\text{xiiii})$$

teniendo en cuenta que

$$\frac{\Sigma_f}{l_\infty \Sigma_a} = \frac{\Sigma_f}{l_0 (L^2 B_0^2 + 1) \Sigma_a} = \frac{\Sigma_f}{l_0 \frac{K_\infty}{k} \Sigma_a} = \frac{\Sigma_f}{K_\infty \frac{l_0}{k} \Sigma_a} = \frac{\Sigma_f}{K_\infty l \Sigma_a}$$

Se define α como $\alpha = \frac{\Sigma_f}{K_\infty l \Sigma_a}$ y considerando que $\alpha \approx \nu$ en la ecuación (xiii)

$$\frac{\partial n(t)}{\partial t} = \left[-\frac{1}{l} + \frac{\alpha}{l} \right] n(t) - \left[\frac{1}{l} - \frac{\alpha}{l} \right] n(t) - \frac{\beta}{l} n(t) + \sum_{i=1} \lambda_i c_i(t) + q(t) \quad (\text{xv})$$

Se establece la función de la reactividad como $\rho(t) = 1 - \frac{1}{k}$

$$\frac{\partial n(t)}{\partial t} = \left[\frac{\rho - 1 - \alpha}{l} \right] n(t) - \left[\frac{1 - \alpha + \beta}{l} \right] n(t) + \sum_{i=1} \lambda_i c_i(t) + q(t) \quad (\text{xvi})$$

simplificando las ecuaciones (xv) y a (xiii) se obtiene

$$\frac{\partial n(t)}{\partial t} = \left[\frac{\rho - \beta}{l} \right] n(t) + \sum_{i=1} \lambda_i c_i(t) + q(t) \quad (\text{xvii})$$

$$\frac{\partial c_i(t)}{\partial t} = \frac{\beta_i}{l} n(t) - \lambda_i c_i(t) \quad (\text{xviii})$$

Las ecuaciones (xvii) y (xviii) corresponden a las ecuaciones de la cinética puntual determinísticas.