

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

**Análise do Modelo Fracionário de Cinética Pontual de Nêutrons pelo Método  
da Decomposição**

por

Marcelo Schramm

Dissertação para obtenção do Título de  
Mestre em Engenharia

Porto Alegre, Janeiro de 2013

# **Análise do Modelo Fracionário de Cinética Pontual de Nêutrons pelo Método da Decomposição**

por

Marcelo Schramm

Dissertação submetida ao Corpo Docente do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, PROMEC, da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de

Mestre em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Marco Tullio Menna Barreto de Vilhena

Comissão de Avaliação:

Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Cynthia Feijó Segatto (PROMEC - UFRGS/RS)

Prof. Dr. Claudio Zen Petersen (UFPEL/RS)

Prof. Dr. Antonio Carlos Marques Alvim (COPPE - UFRJ/RJ)

Prof. Dr. Rogério José Marczak

Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, Janeiro de 2013

## AGRADECIMENTOS

Agradeço

ao grupo do DENUC, pelos conselhos, críticas, opiniões e suporte;

aos amigos, por suportarem meu (mal) humor durante a produção da dissertação;

à Fernanda Capra, por fornecer o local mais silencioso de trabalho durante a produção desta dissertação;

ao PROMEC, pela oportunidade;

ao meu orientador (pela orientação);

e à CAPES, pelo investimento.

## RESUMO

Análise do Modelo Fracionário de Cinética Pontual de Nêutrons pelo Método da Decomposição

O objetivo deste trabalho é realizar uma análise sobre a cinética de nêutrons utilizando um modelo fracionário, recente na literatura. Este novo modelo envolve uma nova relação constitutiva entre a corrente de nêutrons e o fluxo escalar de nêutrons, em que uma das suposições realizada para a relação constitutiva clássica (lei de Fick) não é feita: a densidade de corrente não mais é irrelevante se comparada à taxa de colisão. Ao considerar esta hipótese, este novo modelo aqui apresentado se torna mais abrangente que o modelo fickiano clássico. Para manter o caráter geral do modelo é considerado um operador diferencial de ordem fracionária em sua dedução, o que acresce ao modelo dois novos parâmetros: o tempo de relaxação e a ordem da derivada fracionária. Considerando este modelo, é realizada a dedução das equações de cinética de nêutrons, com ênfase na cinética pontual de nêutrons. A equação fracionária de cinética pontual de nêutrons é resolvida analiticamente através do método da decomposição, a fim de estudar o novo modelo minimizando os erros numéricos. Os resultados obtidos através desta metodologia são comparados com os resultados clássicos em diversos casos, com a finalidade de analisar a influência dos parâmetros fracionários no modelo.

Palavras-chave: Cinética pontual de nêutrons, modelagem fracionária, solução analítica.

## **ABSTRACT**

### Analysis of the Fractional Neutron Point Kinetics Model by the Decomposition Method

The objective of this work is to make an analysis about the neutron kinetics using a recent model on the literature. This new model involves a new constitutive relation between the neutron current and the neutron scalar flux, in which one of the simplifications made to find the classical constitutive relation (Fick's law) is not considered: the current density no longer is irrelevant as compared to the collision rate. By considering this hypothesis, this new model here presented becomes more general than the classic fickian model. In order to keep the general property of the model, a differential operator with fractional order is considered in its deduction, which adds two new parameters to the model: the relaxation time and the fractional derivative order. Considering this model, the neutron kinetics equations are deduced, with emphasis on the neutron point kinetics. The neutron point kinetic equation is analytically solved by the Adomian's decomposition method, in order to study the new model minimizing numerical errors. The results obtained by this methodology are compared to the classic results in several cases, in order to analyse the fractional parameters influences to the model.

Keywords: Neutron point kinetics, fractional modeling, analytical solution.

## ÍNDICE

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b> .....	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>EQUAÇÕES FRACIONÁRIAS DE CINÉTICA DE NÊUTRONS</b> .....	<b>5</b>
2.1	Cinética Espacial de Nêutrons Fracionária .....	5
2.2	Cinética Pontual de Nêutrons Fracionária .....	13
<b>3</b>	<b>SOLUÇÃO PELO MÉTODO DA DECOMPOSIÇÃO</b> .....	<b>19</b>
3.1	Metodologia Geral .....	19
3.2	Derivada Fracionária .....	23
3.3	Reatividade, Fonte Externa e Termos Fonte da Decomposição .....	24
3.4	Crítério de Lyapunov .....	27
<b>4</b>	<b>RESULTADOS E DISCUSSÃO</b> .....	<b>29</b>
4.1	Reatividade Constante .....	30
4.2	Reatividade Rampa .....	38
4.3	Reatividade Senoidal.....	45
4.4	Fonte Externa.....	55
<b>5</b>	<b>CONCLUSÃO</b> .....	<b>67</b>
	<b>ANEXO</b> .....	<b>69</b>
<b>I</b>	<b>Cálculo Fracionário</b> .....	<b>69</b>
I.1	História e Demais Informações .....	69
I.2	Operadores Fracionários .....	72
I.3	Atualizações e Aplicações .....	75
	<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b> .....	<b>78</b>

## LISTA DE SÍMBOLOS

### 1. Caracteres Arábicos

$\mathbf{A}$	matriz de parâmetros nucleares, $s^{-1}$
$\mathbf{A}(t)$	matriz de parâmetros nucleares no tempo $t$ , $s^{-1}$
$C_i(t)$	concentração de precursores de nêutrons atrasados do grupo $i$ , $cm^{-3}$
$C_{ir}(t)$	$r$ -ésimo termo da decomposição de $C_i(t)$ , $cm^{-3}$
$\hat{C}_i(\mathbf{r}, t)$	concentração espacial do grupo $i$ de precursores de nêutrons atrasados, $cm^{-3}$
$D(\mathbf{r}, E)$	coeficiente de difusão de nêutrons de energia $E$ na posição $\mathbf{r}$ , $cm$
$F_i(\mathbf{r}, t)$	função forma da concentração espacial de precursores de nêutrons atrasados do grupo $i$ , $cm/s$
$f_i(E)$	probabilidade que um nêutron atrasado com energia $E$ apareça como resultado de decaimento de um precursor do grupo $i$
$f_p^j(E)$	probabilidade que um nêutron atrasado com energia $E$ apareça como resultado de fissão do isótopo $j$
$G(\mathbf{r}, E, t)$	função forma do fluxo escalar de nêutrons, $cm/s$
$I$	número de grupos de precursores de nêutrons atrasados
$\mathbf{I}$	matriz identidade
$J$	número de isótopos fissionáveis
$\mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t)$	corrente de nêutrons, $cm^{-2}s^{-1}$
$k$	ordem da derivada fracionária
$l(t)$	vida média do nêutron no tempo $t$ , $s$
$n(t)$	densidade de nêutrons, $cm^{-3}$
$n_r(t)$	$r$ -ésimo termo da decomposição de $n(t)$ , $cm^{-3}$
$R$	ordem de truncamento da decomposição
$S(\mathbf{r}, E, t)$	termo fonte de nêutrons no tempo $t$ com energia $E$ na posição $\mathbf{r}$ provindos de fissão, nêutrons atrasados e fonte externa, $cm^{-3}s^{-1}$

$S_{ext}(t)$	fonte externa de nêutrons no tempo $t$ ,
$\hat{S}_{ext}(\mathbf{r}, E, t)$	fonte externa de nêutrons no tempo $t$ , com energia $E$ na posição $\mathbf{r}$ , $cm^{-3}s^{-1}$
$\mathbf{S}_r$	vetor de termos fonte da $r$ -ésima iteração da decomposição, $cm^{-3}s^{-1}$
$\mathbf{S}_r(t)$	vetor de termos fonte da $r$ -ésima iteração da decomposição no tempo $t$ , $cm^{-3}s^{-1}$
$s_r(t)$	$r$ -ésimo termo fonte da decomposição, $cm^{-3}s^{-1}$
$v(E)$	velocidade dos nêutrons com energia $E$ , $cm/s$
$\mathbf{W}$	matriz diagonal dos autovalores de $\mathbf{A}$ , $s^{-1}$
$\mathbf{W}_k$	primeira matriz diagonal de potências dos autovalores de $\mathbf{A}$ , $s^{-k}$
$\mathbf{W}_{k+1}$	segunda matriz diagonal de potências dos autovalores de $\mathbf{A}$ , $s^{-k-1}$
$w_q$	$q$ -ésimo autovalor de $\mathbf{A}$ , $s^{-1}$
$\mathbf{X}$	matriz dos autovetores de $\mathbf{A}$
$\mathbf{Y}(t)$	vetor de incógnitas de cinética pontual de nêutrons, $cm^{-3}$
$\mathbf{Y}_r(t)$	$r$ -ésimo vetor de soluções da decomposição, $cm^{-3}$

## 2. Caracteres Gregos

$\beta$	fração de nêutrons atrasados
$\beta_i$	fração de nêutrons atrasados do grupo $i$ de precursores de nêutrons atrasados
$\hat{\beta}_j$	fração de nêutrons atrasados para o isótopo $j$
$\hat{\beta}_{ji}$	fração de nêutrons atrasados para o isótopo $j$ que provém de um precursor do grupo $i$
$\Gamma(x)$	função gama
$\Lambda(t)$	tempo médio de geração de nêutrons, $s$
$\lambda_i$	constante de decaimento do grupo $i$ de precursores de nêutrons atrasados, $s^{-1}$
$\nu_j$	número médio de nêutrons gerados por fissão do isótopo $j$
$\phi(\mathbf{r}, E, t)$	fluxo escalar de nêutrons, $cm^{-2}s^{-1}$
$\rho(t)$	reatividade
$\Sigma_a(\mathbf{r}, E)$	seção de choque macroscópica de absorção na posição $\mathbf{r}$ da energia $E$ , $cm^{-1}$
$\Sigma_{fj}(\mathbf{r}, E)$	seção de choque macroscópica de fissão do isótopo $j$ na posição $\mathbf{r}$ da energia $E$ , $cm^{-1}$
$\Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E)$	densidade de seção de choque macroscópica de espalhamento na posição $\mathbf{r}$ da energia $E'$ para a energia $E$ , $cm^{-1}J^{-1}$
$\Sigma_t(\mathbf{r}, E)$	seção de choque macroscópica total na posição $\mathbf{r}$ da energia $E$ , $cm^{-1}$
$\Sigma_{tr}(\mathbf{r}, E)$	seção de choque macroscópica de transporte na posição $\mathbf{r}$ da energia $E$ , $cm^{-1}$
$\tau$	tempo de relaxação, $s$

## ÍNDICE DE FIGURAS

4.1	Densidade de nêutrons para $\rho(t) = a$ , $\tau = 10^{-4}s$ e diferentes valores de $k$ , com $a = 0,003$ .	31
4.2	Densidade de nêutrons normalizada para $\rho(t) = a$ , $\tau = 10^{-4}s$ e diferentes valores de $k$ , com $a = 0,003$ .	31
4.3	Densidade de nêutrons para $\rho(t) = a$ , $k = 0,96$ e diferentes valores de $\tau$ , com $a = 0,003$ .	32
4.4	Densidade de nêutrons normalizada para $\rho(t) = a$ , $k = 0,96$ e diferentes valores de $\tau$ , com $a = 0,003$ .	32
4.5	Densidade de nêutrons para $\rho(t) = a$ , $\tau = 10^{-4}s$ e diferentes valores de $k$ , com $a = 0,005$ .	33
4.6	Densidade de nêutrons normalizada para $\rho(t) = a$ , $\tau = 10^{-4}s$ e diferentes valores de $k$ , com $a = 0,005$ .	34
4.7	Densidade de nêutrons para $\rho(t) = a$ , $k = 0,96$ e diferentes valores de $\tau$ , com $a = 0,005$ .	34
4.8	Densidade de nêutrons normalizada para $\rho(t) = a$ , $k = 0,96$ e diferentes valores de $\tau$ , com $a = 0,005$ .	35
4.9	Densidade de nêutrons para $\rho(t) = bt$ , $\tau = 10^{-4}s$ e diferentes valores de $k$ , com $b = 0,00021s^{-1}$ .	38
4.10	Densidade de nêutrons normalizada para $\rho(t) = bt$ , $\tau = 10^{-4}s$ e diferentes valores de $k$ , com $b = 0,00021s^{-1}$ .	39
4.11	Densidade de nêutrons para $\rho(t) = bt$ , $k = 0,96$ e diferentes valores de $\tau$ , com $b = 0,00021s^{-1}$ .	39
4.12	Densidade de nêutrons normalizada para $\rho(t) = bt$ , $k = 0,96$ e diferentes valores de $\tau$ , com $b = 0,00021s^{-1}$ .	40

4.13	Densidade de nêutrons para $\rho(t) = bt$ , $\tau = 10^{-4}s$ e diferentes valores de $k$ , com $b = 0,00028s^{-1}$ . . . . .	41
4.14	Densidade de nêutrons normalizada para $\rho(t) = bt$ , $\tau = 10^{-4}s$ e diferentes valores de $k$ , com $b = 0,00028s^{-1}$ . . . . .	41
4.15	Densidade de nêutrons para $\rho(t) = bt$ , $k = 0,96$ e diferentes valores de $\tau$ , com $b = 0,00028s^{-1}$ . . . . .	42
4.16	Densidade de nêutrons normalizada para $\rho(t) = bt$ , $k = 0,96$ e diferentes valores de $\tau$ , com $b = 0,00028s^{-1}$ . . . . .	42
4.17	Densidade de nêutrons para $\rho(t) = A\text{sen}(ft)$ , $\tau = 10^{-4}s$ e diferentes valores de $k$ , com $A = 0,003$ e $f = 2\pi s^{-1}$ . . . . .	45
4.18	Densidade de nêutrons normalizada para $\rho(t) = A\text{sen}(ft)$ , $\tau = 10^{-4}s$ e diferentes valores de $k$ , com $A = 0,003$ e $f = 2\pi s^{-1}$ . . . . .	46
4.19	Densidade de nêutrons para $\rho(t) = A\text{sen}(ft)$ , $k = 0,96$ e diferentes valores de $\tau$ , com $A = 0,003$ e $f = 2\pi s^{-1}$ . . . . .	46
4.20	Densidade de nêutrons normalizada para $\rho(t) = A\text{sen}(ft)$ , $k = 0,96$ e diferentes valores de $\tau$ , com $A = 0,003$ e $f = 2\pi s^{-1}$ . . . . .	47
4.21	Densidade de nêutrons para $\rho(t) = A\text{sen}(ft)$ , $\tau = 10^{-4}s$ e diferentes valores de $k$ , com $A = 0,003$ e $f = \pi s^{-1}$ . . . . .	48
4.22	Densidade de nêutrons normalizada para $\rho(t) = A\text{sen}(ft)$ , $\tau = 10^{-4}s$ e diferentes valores de $k$ , com $A = 0,003$ e $f = \pi s^{-1}$ . . . . .	48
4.23	Densidade de nêutrons para $\rho(t) = A\text{sen}(ft)$ , $k = 0,96$ e diferentes valores de $\tau$ , com $A = 0,003$ e $f = \pi s^{-1}$ . . . . .	49
4.24	Densidade de nêutrons normalizada para $\rho(t) = A\text{sen}(ft)$ , $k = 0,96$ e diferentes valores de $\tau$ , com $A = 0,003$ e $f = \pi s^{-1}$ . . . . .	49
4.25	Densidade de nêutrons para $\rho(t) = A\text{sen}(ft)$ , $\tau = 10^{-4}s$ e diferentes valores de $k$ , com $A = 0,003$ e $f = \pi/2s^{-1}$ . . . . .	50
4.26	Densidade de nêutrons normalizada para $\rho(t) = A\text{sen}(ft)$ , $\tau = 10^{-4}s$ e diferentes valores de $k$ , com $A = 0,003$ e $f = \pi/2s^{-1}$ . . . . .	51
4.27	Densidade de nêutrons para $\rho(t) = A\text{sen}(ft)$ , $k = 0,96$ e diferentes valores de $\tau$ , com $A = 0,003$ e $f = \pi/2s^{-1}$ . . . . .	51

4.28	Densidade de nêutrons normalizada para	$\rho(t) = A \text{sen}(ft),$	
	$k = 0,96$ e diferentes valores de $\tau$ , com $A = 0,003$ e $f = \pi/2s^{-1}$ . . . . .		52
4.29	Densidade de nêutrons para $\rho(t) = 10^{-6},$	$S_{ext}(t) =$	
	$\exp(-dt)cm^{-3}s^{-1}$ , $\tau = 10^{-4}s$ e diferentes valores de $k$ , com $d = 1/30s^{-1}$ . . . . .		56
4.30	Densidade de nêutrons normalizada para $\rho(t) = 10^{-6},$	$S_{ext}(t) =$	
	$\exp(-dt)cm^{-3}s^{-1}$ , $\tau = 10^{-4}s$ e diferentes valores de $k$ , com $d = 1/30s^{-1}$ . . . . .		56
4.31	Densidade de nêutrons para $\rho(t) = 10^{-6},$	$S_{ext}(t) =$	
	$\exp(-dt)cm^{-3}s^{-1}$ , $k = 0,96$ e diferentes valores de $\tau$ , com $d = 1/30s^{-1}$ . . . . .		57
4.32	Densidade de nêutrons normalizada para $\rho(t) = 10^{-6},$	$S_{ext}(t) =$	
	$\exp(-dt)cm^{-3}s^{-1}$ , $k = 0,96$ e diferentes valores de $\tau$ , com $d = 1/30s^{-1}$ . . . . .		57
4.33	Densidade de nêutrons para $\rho(t) = 10^{-6},$	$S_{ext}(t) =$	
	$\exp(-dt)cm^{-3}s^{-1}$ , $\tau = 10^{-4}s$ e diferentes valores de $k$ , com $d = 1/10s^{-1}$ . . . . .		58
4.34	Densidade de nêutrons normalizada para $\rho(t) = 10^{-6},$	$S_{ext}(t) =$	
	$\exp(-dt)cm^{-3}s^{-1}$ , $\tau = 10^{-4}s$ e diferentes valores de $k$ , com $d = 1/10s^{-1}$ . . . . .		59
4.35	Densidade de nêutrons para $\rho(t) = 10^{-6},$	$S_{ext}(t) =$	
	$\exp(-dt)cm^{-3}s^{-1}$ , $k = 0,96$ e diferentes valores de $\tau$ , com $d = 1/10s^{-1}$ . . . . .		59
4.36	Densidade de nêutrons normalizada para $\rho(t) = 10^{-6},$	$S_{ext}(t) =$	
	$\exp(-dt)cm^{-3}s^{-1}$ , $k = 0,96$ e diferentes valores de $\tau$ , com $d = 1/10s^{-1}$ . . . . .		60
4.37	Densidade de nêutrons para $\rho(t) = 10^{-6},$	$S_{ext}(t) =$	
	$\exp(-dt)cm^{-3}s^{-1}$ , $\tau = 10^{-4}s$ e diferentes valores de $k$ , com $d = 0s^{-1}$ . . . . .		61
4.38	Densidade de nêutrons normalizada para $\rho(t) = 10^{-6},$	$S_{ext}(t) =$	
	$\exp(-dt)cm^{-3}s^{-1}$ , $\tau = 10^{-4}s$ e diferentes valores de $k$ , com $d = 0s^{-1}$ . . . . .		61
4.39	Densidade de nêutrons para $\rho(t) = 10^{-6},$	$S_{ext}(t) =$	
	$\exp(-dt)cm^{-3}s^{-1}$ , $k = 0,96$ e diferentes valores de $\tau$ , com $d = 0s^{-1}$ . . . . .		62
4.40	Densidade de nêutrons normalizada para $\rho(t) = 10^{-6},$	$S_{ext}(t) =$	
	$\exp(-dt)cm^{-3}s^{-1}$ , $k = 0,96$ e diferentes valores de $\tau$ , com $d = 0s^{-1}$ . . . . .		62

## ÍNDICE DE TABELAS

4.1	Parâmetros nucleares .....	29
4.2	Valores da densidade de nêutrons ( $n(t)$ ) para reatividade constante ( $\rho(t) = a$ ) e $\tau = 10^{-4}s$ para diferentes $k [cm^{-3}]$ . .....	36
4.3	Valores da densidade de nêutrons ( $n(t)$ ) para reatividade constante ( $\rho(t) = a$ ) e $k = 0,96$ para diferentes $\tau [cm^{-3}]$ . .....	37
4.4	Valores da densidade de nêutrons ( $n(t)$ ) para reatividade rampa ( $\rho(t) = bt$ ) e $\tau = 10^{-4}s$ para diferentes $k [cm^{-3}]$ . .....	43
4.5	Valores da densidade de nêutrons ( $n(t)$ ) para reatividade rampa ( $\rho(t) = bt$ ) e $k = 0,96$ para diferentes $\tau [cm^{-3}]$ . .....	44
4.6	Valores da densidade de nêutrons ( $n(t)$ ) para reatividade senoidal ( $\rho(t) = A\sin(ft)$ ) e $\tau = 10^{-4}s$ para diferentes $k [cm^{-3}]$ , com $A = 0,003$ . .....	53
4.7	Valores da densidade de nêutrons ( $n(t)$ ) para reatividade senoidal ( $\rho(t) = A\sin(ft)$ ) e $k = 0,96$ para diferentes $\tau [cm^{-3}]$ , com $A = 0,003$ . .....	54
4.8	Valores da densidade de nêutrons ( $n(t)$ ) para fonte externa ( $S_{ext}(t) = \exp(-dt)cm^{-3}s^{-1}$ ) e $\tau = 10^{-4}s$ para diferentes $k [cm^{-3}]$ . .....	64
4.9	Valores da densidade de nêutrons ( $n(t)$ ) para fonte externa ( $S_{ext}(t) = \exp(-dt)cm^{-3}s^{-1}$ ) e $k = 0,96$ para diferentes $\tau [cm^{-3}]$ . .....	65

## LISTA DE SÍGLAS E ABREVIATURAS

COPPE	Instituto Alberto Luiz Coimbra de Pós-Graduação e Pesquisa de Engenharia
PROMEC	Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica
UFRJ	Universidade Federal do Rio de Janeiro
UFRGS	Universidade Federal do Rio Grande do Sul
UFPel	Universidade Federal de Pelotas

## 1 INTRODUÇÃO

Em um reator nuclear em operação em nível de potência constante, a taxa de produção de nêutrons via fissão deve ser balanceada pela taxa de perda de nêutrons via fuga ou absorção. Se isto acontecer, considera-se que a densidade de nêutrons ou o fluxo de nêutrons não variam com o tempo, assim como a potência gerada. Qualquer desvio desta condição de regime permanente resulta em uma dependência do tempo na densidade de nêutrons, fluxo de nêutrons ou potência gerada. Este desvio pode ser causado por diversos fatores, pela alteração do regime de funcionamento do reator nuclear. Portanto, a cinética de reatores nucleares é a área da física de reatores que estuda o comportamento transiente de curta duração em reatores nucleares.

As equações que descrevem a dinâmica temporal e espaço-temporal da população de nêutrons da teoria de difusão de nêutrons são chamadas equações de cinética, classificadas respectivamente em equação da cinética pontual e equação de cinética espacial.

A equação de cinética pontual descreve o comportamento da amplitude do fluxo de nêutrons pelo tempo, supondo separabilidade entre sua amplitude e forma, na qual a forma espacial do fluxo de nêutrons é conhecida, o que torna a equação de cinética pontual de nêutrons dependente apenas da variável tempo. Este modelo possui sua relevância em cálculos de física de reatores pois descreve de forma sucinta variações na potência gerada pela fissão nuclear no núcleo do reator. Os parâmetros conhecidos da equação de cinética pontual são chamados parâmetros cinéticos e são uma forma de demonstrar determinadas características relevantes dos parâmetros nucleares na equação de cinética pontual de nêutrons.

A equação de cinética pontual de nêutrons possui caráter rígido (*stiff*), ou seja, os seus termos diferem muito em suas escalas, grande parte disso acontece devido à diferença de entre os parâmetros cinéticos de nêutrons prontos e atrasados. Isto implica que, ao aplicar um método numérico para encontrar sua solução, é necessário um incremento de tempo muito pequeno para a obtenção de uma solução precisa. Atualmente tem havido um grande esforço da comunidade da área de física de reatores na investigação de métodos numéricos

para encontrar soluções de cinética pontual, como encontrado em [Aboanber e Nahla, 2002; Nahla, 2011]. Estes métodos numéricos funcionam com sucesso para diversos casos, mas possuem desvantagens envolvendo o passo de tempo máximo para que garantir a estabilidade da solução, fenômeno causado pelo caráter rígido do problema. Em contrapartida, soluções analíticas para a cinética pontual são fundamentais no sentido que eliminam o caráter rígido presente neste tipo de equação. Alguns resultados recentes envolvendo soluções analíticas ou semi-analíticas para a cinética pontual de nêutrons podem ser encontrados na literatura para funções específicas da reatividade como por exemplo constante [Petersen, 2011; Palma et al., 2009; Buzano et al., 1995; Ceolin, 2010; Ganapol, 2009; Silva Júnior, 2011].

Tendo em vista que a equação de cinética pontual de nêutrons pode ser derivada a partir da equação de difusão de nêutrons, neste trabalho é estudada a generalização deste modelo pela concepção de uma modificação da lei de Fick baseada no comportamento fractal dos meios fissionáveis, incluindo assim termos derivativos de ordem fracionária na sua dedução. Portanto no modelo de difusão, operadores diferenciais e integrais de ordem fracionária estão sendo utilizados para modelar o fenômeno da difusão anômala [Nec e Nepomnyashchy, 2007a; Pedron e Mendes, 2005; Chen et al., 2008]. Apesar disto, o cálculo fracionário em cinética de difusão de nêutrons não foi totalmente explorado. Dentre os recentes trabalhos na área, citam-se [Espinosa-Paredes et al., 2008; Espinosa-Paredes et al., 2011; Saha Ray e Patra, 2012]. Em nenhum destes últimos casos são encontradas soluções analíticas para a equação fracionária de cinética pontual de nêutrons. O anexo I contém demais informações sobre o cálculo fracionário.

Dentre os métodos utilizados na equação de cinética pontual de nêutrons (e em qualquer outro modelo matemático), os métodos analíticos garantem precisão, exatidão e confiabilidade de forma mais que satisfatória na estimativa do comportamento da população de nêutrons. Estas características são necessárias no cálculo da população de nêutrons no núcleo de um reator nuclear, pois afetam a capacidade de controle do processo auto-sustentável de fissão nuclear. Além disto, os métodos analíticos geram uma expressão fechada, com dependência explícita dos parâmetros nucleares e cinéticos, o que também desperta interesse quando se quer ver a influência de um determinado parâmetro nuclear no resultado. Finalmente, uma solução analítica é apta para gerar bancos de dados de soluções, útil para a validação de códigos computacionais. É no contexto de implementação do modelo e geração

de soluções analíticas que esta dissertação se enquadra.

Com a finalidade de explorar o potencial da área de cinética pontual de nêutrons com o cálculo fracionário, é descrita neste trabalho uma forma de implementação fracionária na lei de fechamento de difusão (lei de Fick), em que se tenta capturar os efeitos da difusão anômala. A difusão anômala envolve processos do meio que aceleram ou dificultam o processo difusivo, e ultimamente vem sendo estudada fortemente com a utilização de operadores diferenciais e integrais de ordem fracionária em sua modelagem. Por exemplo, Nec e Nepomnyashchy ([Nec e Nepomnyashchy, 2007a]) mostram como uma implementação fracionária pode ser feita no cálculo de reações de reação-difusão, utilizando um operador integral fracionária no termo difusivo de suas equações cinéticas. No trabalho de Pedron e Mendes ([Pedron e Mendes, 2005]), estes exploram o fenômeno da difusão anômala ao seu limite, realizando uma análise de casos e verificando a viabilidade e aplicabilidade quando a difusão é caracterizada por variações de seus parâmetros (coeficiente de difusão) no espaço, utilizando efeitos da difusão não-linear com termo de arraste e inclusive com modelagem fracionária para o problema de fechamento da difusão. Além destes, vários outros pesquisadores devotam seus trabalhos ao fenômeno de difusão anômala utilizando o cálculo fracionário.

A partir da equação de balanço de nêutrons é realizada uma dedução, utilizando uma relação constitutiva não fickiana, contendo um termo com derivadas de ordem não inteira, para encontrar a equação de cinética espacial de nêutrons. A partir desta equação é feita a dedução da equação de cinética pontual de nêutrons realizando integrações no espaço e energia, supondo separabilidade do fluxo escalar de nêutrons em sua forma e amplitude (esta última dependente apenas do tempo).

Após isto, resolve-se com representação analítica a equação fracionária de cinética pontual pelo método da decomposição, semelhante ao método da decomposição de Adomian, [Adomian, 1994], utilizado para solucionar problemas não lineares. A ideia deste método é expandir a densidade de nêutrons e os precursores de nêutrons atrasados em uma série, posteriormente truncada segundo um critério de convergência. Substituem-se as séries na equação fracionária de cinética pontual e, a partir desta, um sistema recursivo de equações diferenciais lineares de primeira ordem é construído, idêntico à equação clássica de cinética pontual de nêutrons heterogênea. A solução deste sistema recursivo é obtida através do método direto da exponencial de matriz e convolução. Para assegurar a convergência da série

gerada pela decomposição, é utilizado um critério de estabilidade e convergência da solução seguindo a ideia de Lyapunov no contexto da estabilidade e convergência. Para averiguar os efeitos dos termos de ordem fracionária na equação fracionária de cinética pontual de nêutrons e seus parâmetros, alguns casos alterando a reatividade e a fonte externa são estudados, gerando resultados numéricos.

## 2 EQUAÇÕES FRACIONÁRIAS DE CINÉTICA DE NÊUTRONS

Neste capítulo é mostrada a dedução da equação de cinética pontual de nêutrons fracionária, explicitando as considerações e simplificações feitas no processo, partindo da primeira simplificação feita da equação de transporte de nêutrons. Para a dedução da equação de cinética espacial de nêutrons fracionária, é justificada e utilizada uma modelagem não fickiana de ordem não inteira, da qual o caráter fracionário da equação diferencial é oriundo. Em seguida, a fim de encontrar a equação de cinética pontual de nêutrons fracionária, é feita uma integração no volume e energia, bem como uma fatoração no fluxo escalar de nêutrons e na concentração espacial dos precursores em suas funções forma e amplitude. Durante esta dedução, são descritos os parâmetros cinéticos e é feito um relato sobre o modo de como encontrá-los. Enquanto é realizado o procedimento anteriormente descrito, é demonstrado que uma modelagem de ordem fracionária é generalizada, podendo-se recuperar o modelo original simplesmente alterando os parâmetros fracionários. Mais informações sobre a dedução das equações de cinética pontual e espacial de nêutrons podem ser encontradas em [Sekimoto, 2007; Duderstadt e Hamilton, 1976; Henry, 1975; Lamarsh, 1965].

### 2.1 Cinética Espacial de Nêutrons Fracionária

A equação de cinética espacial de nêutrons é uma forma de expressar matematicamente o balanço de nêutrons considerando sua difusão pelo meio. Após a realização da aproximação na equação de transporte de nêutrons, o que leva às equações (2.1a) e (2.1b), são feitas aproximações e considerações para ser encontrada a equação de cinética espacial de nêutrons, a qual será o começo da dedução da equação de cinética pontual de nêutrons. Este procedimento (e inclusive procedimentos anteriores, de dedução da equação de transporte) pode ser encontrado em [Duderstadt e Hamilton, 1976] para o caso clássico. Neste trabalho o enfoque é dado no caso fracionário.

O ponto de partida é a equação de difusão de nêutrons dependente do tempo e

energia, juntamente com a equação que descreve a corrente de nêutrons (ambas deduzidas através de integração no ângulo sólido da equação de transporte de nêutrons, conforme consta em [Duderstadt e Hamilton, 1976]):

$$\frac{1}{v(E)} \frac{\partial \phi(\mathbf{r}, E, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t) + \Sigma_t(\mathbf{r}, E) \phi(\mathbf{r}, E, t) = S(\mathbf{r}, E, t) , \quad (2.1a)$$

$$\frac{1}{v(E)} \frac{\partial \mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t)}{\partial t} + \frac{1}{3} \nabla \phi(\mathbf{r}, E, t) + \Sigma_{tr}(\mathbf{r}, E) \mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t) = 0 , \quad (2.1b)$$

em que:

- $v(E)$  representa a velocidade do nêutron;
- $\phi(\mathbf{r}, E, t)$  representa o fluxo escalar de nêutrons;
- $\mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t)$  representa a corrente de nêutrons;
- $\Sigma_t(\mathbf{r}, E)$  representa a seção de choque macroscópica total;
- $\Sigma_{tr}(\mathbf{r}, E)$  representa a seção de choque macroscópica de transporte;
- $S(\mathbf{r}, E, t)$  representa o termo fonte.

A partir da equação (2.1b) é deduzida a lei de Fick e, para tal, é necessário fazer as seguintes suposições:

- o fluxo angular pode ser representado com dependência apenas linearmente anisotrópica;
- fontes externas isotrópicas;
- densidade de corrente muda vagarosamente em comparação à escala do tempo médio de colisão;
- probabilidade de absorção consideravelmente menor que espalhamento;
- variação da distribuição espacial dos nêutrons é linear;

entre outros.

A terceira suposição implica que o primeiro termo da equação (2.1b) é irrelevante se comparado à taxa de colisão, ou seja:

$$\frac{1}{|\mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t)|} \left| \frac{\partial \mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t)}{\partial t} \right| \ll v(E) \Sigma_t(\mathbf{r}, E) , \quad (2.2)$$

e este fato se confirma na maioria dos casos em dinâmica de reatores, sabendo que  $v(E)\Sigma_t(\mathbf{r}, E)$  é tipicamente da ordem de  $10^5 s^{-1}$  ou maior. A constatação é que apenas variações extremamente rápidas invalidariam esta suposição. Sabendo disto, a equação (2.1b) torna-se

$$\frac{1}{3}\nabla\phi(\mathbf{r}, E, t) + \Sigma_{tr}(\mathbf{r}, E)\mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t) = 0 \quad (2.3)$$

ou, rearranjando os termos:

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t) = -D(\mathbf{r}, E)\nabla\phi(\mathbf{r}, E, t), \quad (2.4)$$

onde

$$D(\mathbf{r}, E) = \frac{1}{3\Sigma_{tr}(\mathbf{r}, E)} \quad \text{representa o coeficiente de difusão.}$$

A equação (2.4) é a clássica lei de Fick, e ela é uma boa aproximação na maior parte das situações. Entretanto, neste trabalho o foco é exatamente nestas variações extremas na corrente de nêutrons onde o termo  $\frac{1}{v(E)}\frac{\partial\mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t)}{\partial t}$  não pode ser simplesmente descartado. Posteriormente neste capítulo é comentado como este termo pode ser incluído na equação de difusão e qual sua influência na cinética pontual de nêutrons.

Retomando a equação (2.1a), o seu termo fonte representa a inclusão de nêutrons, ou seja, fissão, espalhamento e decaimento dos precursores. Trabalhando o termo fonte, resultaria em defini-lo da seguinte forma:

$$\begin{aligned} S(\mathbf{r}, E, t) = & \int \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E)\phi(\mathbf{r}, E', t) dE' + \sum_i f_i(E)\lambda_i\hat{C}_i(\mathbf{r}, t) + \hat{S}_{ext}(\mathbf{r}, E, t) \\ & + \sum_j f_p^j(E)(1 - \hat{\beta}_j)\nu_j \int \Sigma_{fj}(\mathbf{r}, E')\phi(\mathbf{r}, E', t) dE' , \end{aligned} \quad (2.5)$$

sendo que a equação para a concentração de precursores fica:

$$\sum_j \hat{\beta}_{ji}\nu_j \int \Sigma_{fj}(\mathbf{r}, E', t)\phi(\mathbf{r}, E', t) dE' - \lambda_i\hat{C}_i(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial\hat{C}_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} , \quad (2.6)$$

em que:

$f_p^j(E)$	representa a probabilidade que um nêutron pronto apareça como resultado de fissão do isótopo $j$ ;
$\hat{\beta}_j$	representa a fração de nêutrons atrasados para o isótopo $j$ ;
$\nu_j$	representa o número médio de nêutrons gerados por fissão do isótopo $j$ ;
$\Sigma_{fj}(\mathbf{r}, E)$	representa a seção de choque macroscópica de fissão do isótopo $j$ ;
$\Sigma_s(r, E' \rightarrow E)$	representa a densidade de seção de choque macroscópica de espalhamento;
$f_i(E)$	representa a probabilidade que um nêutron atrasado apareça como resultado de decaimento de um precursor do grupo $i$ ;
$\lambda_i$	representa a constante de decaimento do grupo $i$ de precursores de nêutrons atrasados;
$\hat{C}_i(r, t)$	representa a concentração espacial do grupo $i$ de precursores de nêutrons atrasados;
$\hat{\beta}_{ji}$	representa a fração de nêutrons atrasados para o isótopo $j$ que provém de um precursor do grupo $i$ ;
$\hat{S}_{ext}(\mathbf{r}, E, t)$	representa a fonte espacial externa de nêutrons.

para  $i = 1, 2, \dots, I$  e  $j = 1, 2, \dots, J$ .

O termo de fonte externa  $\hat{S}_{ext}(\mathbf{r}, E, t)$  pode ser desconsiderado na maioria dos problemas, pois o seu valor prático é muito menor que o próprio valor da densidade de nêutrons em um reator operando à regime permanente. Neste trabalho o termo fonte é desconsiderado a menos que explicitado o contrário.

Quanto às probabilidades de aparecimento de nêutrons devido a fissão ( $f_p^j(E)$ ) e devido a decaimento ( $f_i(E)$ ), é importante notar que

$$\int f_p^j(E) dE = \int f_i(E) dE = 1, \quad (2.7)$$

e quanto às frações de nêutrons atrasados ( $\hat{\beta}_{ji}$ ),

$$\sum_i \hat{\beta}_{ji} = \hat{\beta}_j. \quad (2.8)$$

Retomando o assunto da relação constitutiva de difusão, em diversos problemas físicos está sendo observado que alguns processos difusivos não necessariamente seguem a lei de Fick. Tal fenômeno é referido como difusão não clássica (ou anômala). Especificamente no

caso do reator nuclear, alguns fenômenos de difusão anômala ocorrem devido à configuração altamente heterogênea, em que um processo difusivo não pode ser descrito com exatidão se a relação constitutiva fickiana for utilizada.

Explorando os efeitos da difusão anômala, Nec e Nepomnyashchy propuseram em seu trabalho [Nec e Nepomnyashchy, 2007a] modificações de caráter fracionário em modelagens envolvendo difusão. A intenção é tentar capturar os efeitos da difusão anômala ao modificar a relação constitutiva de difusão por uma equivalente alterando a escala de difusão para uma escala mais abrangente (ou seja, a difusão clássica seria um caso particular desta nova modelagem) e, para isso, utilizaram a inclusão de um operador diferencial de ordem fracionária. A justificativa para isto é a utilização de uma nova ordem de grandeza para a difusão, alterando a escala da distância quadrática média ( $r^2(t)$ ) de uma partícula de trajetória randômica pelo tempo (tipicamente,  $\langle r^2(t) \rangle \sim t$ ) para uma mais abrangente:  $\langle r^2(t) \rangle \sim t^\gamma$ . Se  $0 < \gamma < 1$ , trata-se de um processo de sub-difusão, utilizado quando há a presença de diversos elementos frenadores do processo de transporte, como em meios porosos e soluções poliméricas. Se  $1 < \gamma < 2$ , trata-se de um processo de super-difusão, caracterizado pela aceleração do transporte, como em escoamentos turbulentos. Mais trabalhos envolvendo o fenômeno de difusão anômala podem ser encontrados em [Nec e Nepomnyashchy, 2007b; Chen et al., 2008]; e mais informações sobre cálculo fracionário e aplicações podem ser encontrados em [Trenčevski, 2003; Camargo, 2009; Debnath, 2003; Oldham e Spanier, 1974; Miller e Ross, 1993; Magin, 2006; Edwards et al., 2002; Hilfer, 2000; Kilbas et al., 2006].

Com estas ideias em mente, uma versão fracionária para a relação constitutiva entre a corrente de nêutrons e o fluxo escalar de nêutrons pode ser descrita como uma nova versão da equação (2.1b):

$$\tau^k \frac{\partial^k \mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t)}{\partial t^k} + \mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t) = -D(\mathbf{r}, E) \nabla \phi(\mathbf{r}, E, t), \quad (2.9)$$

na qual:

$\tau$  representa o tempo de relaxação;

$k$  representa a ordem de difusão anômala ( $0 < k \leq 1$ );

Sobre o tempo de relaxação\*, ele pode ser justificado baseado em aspectos mi-

---

\* $\tau$  rigorosamente seria dependente da posição e da energia, pois é inversamente proporcional a  $v(E)\Sigma_{tr}(\mathbf{r}, E)$ , porém devido ao seu significado físico ( $\tau$  pode ser visto como um período de colisão de

croscópicos. Além de ser uma extensão de cálculos da teoria cinética e da equação de Boltzmann para gases rarefeitos, é calculado através da mecânica estatística newtoniana.

Neste trabalho o cálculo do tempo de relaxação e da ordem de difusão anômala não são realizados. Ao invés disso, são considerados como parâmetros de entrada para o cálculo da densidade de nêutrons, e uma pequena noção da ordem de grandeza destes parâmetros é discutida. Apesar de uma estimativa conclusiva para estes parâmetros não ser levada em conta, este trabalho releva a importância na determinação precisa do tempo de relaxação e da ordem da derivada fracionária. Ou seja, o enfoque é dado na aproximação necessária para a estimativa dos parâmetros fracionários.

De acordo com as hipóteses ressaltadas na dedução da equação (2.4), o termo de  $\frac{\partial^k \mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t)}{\partial t^k}$  deve ser pequeno na maior parte dos casos. Portanto, neste trabalho, é atribuído um valor pequeno para  $\tau^k$  e, para capturar os efeitos de variação da corrente com o tempo, atribui-se um valor para  $k$  próximo de 1, porém menor que 1, considerando que em um reator nuclear há mais fenômenos frenadores da difusão de nêutrons do que aceleradores, o que caracteriza a sub-difusão. A intenção ao fazer esta hipótese é de capturar os efeitos de difusão anômala e manter a qualidade nos resultados onde a lei de Fick fornece uma boa aproximação.

É importante ressaltar que se considerarmos o caso em que  $\tau^k = 0$  na equação (2.9) a lei de Fick é recuperada. Também cabe considerar o caso no qual  $\tau = \frac{3D}{v}$  e  $k = 1$ , em que se encontra a relação constitutiva análoga à citada por Cattaneo e Vernotte em seus trabalhos, [Cattaneo, 1958; Vernotte, 1958], sobre difusão do calor. Em ambos os trabalhos, são propostas relações constitutivas não fickianas, o que solucionava o problema de uma inconsistência encontrada no clássico modelo difusivo do calor ao trocar o caráter da lei de Fick (também chamada de lei de Fourier na condução de calor) da forma parabólica para a hiperbólica. Posteriormente serão demonstradas as equações difusivas de nêutrons neste caso particular.

Com estas considerações relevadas, a equação (2.1a), com o termo fonte explícito, 

---

 transporte - que é praticamente constante), neste trabalho será considerado constante.

pode ser reescrita na seguinte forma:

$$\begin{aligned}
& -\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t) + \sum_j f_p^j(E)(1 - \hat{\beta}_j)\nu_j \int \Sigma_{fj}(\mathbf{r}, E')\phi(\mathbf{r}, E', t)dE' \\
& -\Sigma_t(\mathbf{r}, E)\phi(\mathbf{r}, E, t) + \int \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E)\phi(\mathbf{r}, E', t) dE' \\
& + \sum_i f_i(E)\lambda_i\hat{C}_i(\mathbf{r}, t) + \hat{S}_{ext}(\mathbf{r}, E, t) = \frac{1}{v(E)} \frac{\partial\phi(\mathbf{r}, E, t)}{\partial t}, \tag{2.10}
\end{aligned}$$

Ao estender a derivada convencional em  $\tau^k \frac{\partial^k (2.10)}{\partial t^k} + (2.10)$  e por conveniência omitir as dependências explícitas da posição, energia e tempo na corrente de nêutrons, fluxo escalar de nêutrons e concentração de precursores, bem como nos parâmetros nucleares, a equação (2.10) fica

$$\begin{aligned}
& -\nabla \cdot \left( \tau^k \frac{\partial^k \mathbf{J}}{\partial t^k} + \mathbf{J} \right) + \sum_j f_j^p (1 - \hat{\beta}_j) \nu_j \int \Sigma_{fj} \left( \tau^k \frac{\partial^k \phi}{\partial t^k} + \phi \right) dE' \\
& -\Sigma_t \left( \tau^k \frac{\partial^k \phi}{\partial t^k} + \phi \right) + \int \Sigma_s \left( \tau^k \frac{\partial^k \phi}{\partial t^k} + \phi \right) dE' \\
& + \sum_i f_i \lambda_i \left( \tau^k \frac{\partial^k \hat{C}_i}{\partial t^k} + \hat{C}_i \right) + \tau^k \frac{\partial^k \hat{S}_{ext}}{\partial t^k} + \hat{S}_{ext} = \frac{1}{v} \left( \tau^k \frac{\partial^{k+1} \phi}{\partial t^{k+1}} + \frac{\partial \phi}{\partial t} \right). \tag{2.11}
\end{aligned}$$

Esta operação realizada em (2.10) é realizada desta forma para favorecer a implementação da expressão (2.9) em (2.11), o que origina a equação

$$\begin{aligned}
& \nabla \cdot D\nabla\phi - \Sigma_t \left( \tau^k \frac{\partial^k \phi}{\partial t^k} + \phi \right) + \int \Sigma_s \left( \tau^k \frac{\partial^k \phi}{\partial t^k} + \phi \right) dE' \\
& + \sum_j f_j^p (1 - \hat{\beta}_j) \nu_j \int \Sigma_{fj} \left( \tau^k \frac{\partial^k \phi}{\partial t^k} + \phi \right) dE' \\
& + \sum_i f_i \lambda_i \left( \tau^k \frac{\partial^k \hat{C}_i}{\partial t^k} + \hat{C}_i \right) + \tau^k \frac{\partial^k \hat{S}_{ext}}{\partial t^k} + \hat{S}_{ext} = \frac{1}{v} \left( \tau^k \frac{\partial^{k+1} \phi}{\partial t^{k+1}} + \frac{\partial \phi}{\partial t} \right) \tag{2.12}
\end{aligned}$$

Esta é a equação fracionária de cinética espacial de nêutrons, com dependência da posição, tempo e energia, a partir da qual é deduzida a equação de cinética pontual de nêutrons. Percebe-se desde já que, como o fechamento da equação (2.1a) é feito através de uma relação entre a corrente e o fluxo escalar de nêutrons, as equações cinéticas dos precursores ficam inalteradas para o caso fracionário.

É importante ressaltar que a equação (2.12) é de cunho genérico, ou seja, atribuindo determinados valores para  $k$  e para  $\tau$  é possível retornar ao modelo clássico ou encontrar o

modelo de onda. Para fins de demonstração, primeiramente é considerado o caso em que  $\tau^k \rightarrow 0$ :

$$\begin{aligned} & \nabla \cdot D \nabla \phi - \Sigma_t \phi + \sum_j f_j^p (1 - \hat{\beta}_j) \nu_j \int \Sigma_{fj} \phi; dE' \\ & + \int \Sigma_s \phi dE' + \sum_i f_i \lambda_i \hat{C}_i + \hat{S}_{ext} = \frac{1}{v} \frac{\partial \phi}{\partial t}, \end{aligned} \quad (2.13)$$

que é a equação clássica de cinética espacial de nêutrons, útil para estimar o comportamento da densidade de nêutrons (ou “amplitude” do fluxo escalar de nêutrons) em um reator nuclear em operação. Esta equação é a mais conhecida e utilizada para realizar esta estimativa.

Caso seja considerado o caso em que  $\tau \rightarrow \frac{3D}{v}$  e  $k \rightarrow 1$ , a equação cinética difusiva de onda de nêutrons é encontrada:

$$\begin{aligned} & \nabla \cdot D \nabla \phi - \Sigma_t \left( \frac{3D}{v} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \phi \right) + \int \Sigma_s \left( \frac{3D}{v} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \phi \right) dE' \\ & + \sum_j f_j^p (1 - \hat{\beta}_j) \nu_j \int \Sigma_{fj} \left( \frac{3D}{v} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \phi \right) dE' \\ & + \sum_i f_i \lambda_i \left( \frac{3D}{v} \frac{\partial \hat{C}_i}{\partial t} + \hat{C}_i \right) + \frac{3D}{v} \frac{\partial \hat{S}_{ext}}{\partial t} + \hat{S}_{ext} = \frac{1}{v} \left( \frac{3D}{v} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} + \frac{\partial \phi}{\partial t} \right). \end{aligned} \quad (2.14)$$

Esta equação coincide com a equação deduzida por Cattaneo e Vernotte em seus trabalhos sobre a difusão do calor [Cattaneo, 1958; Vernotte, 1958], conforme citado anteriormente. Nestes trabalhos, Cattaneo e Vernotte tentaram solucionar o problema do modelo fickiano clássico, que contradiz leis relativísticas<sup>†</sup>

---

<sup>†</sup>Em seus trabalhos, Cattaneo e Vernotte modificaram a lei de Fick para uma outra lei constitutiva, mais abrangente ( $\mathbf{q} = -K \nabla T \rightarrow \tau_0 \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \mathbf{q} = -K \nabla T$ ). Esta lei não contradizia um paradoxo da lei de Fick: velocidade de propagação do calor infinita em meios contínuos, ou seja, de acordo com o modelo clássico, a velocidade de propagação do calor é maior do que a da luz no vácuo, o que contradiz a teoria da relatividade. Ou seja, de acordo com a clássica lei de Fick, um pulso de calor na origem resulta em um valor infinito no gradiente da temperatura na origem. Analogamente, se o mesmo caso é considerado para a difusão de nêutrons, uma fonte pulsada na origem resulta em um valor infinito no gradiente do fluxo escalar de nêutrons na origem.

## 2.2 Cinética Pontual de Nêutrons Fracionária

Para a dedução da equação de cinética pontual de nêutrons fracionária é feita uma integração no volume e energia da equação :

$$\begin{aligned}
& \int \int \nabla \cdot D \nabla \phi \, dE \, dV - \int \int \Sigma_t \left( \tau^k \frac{\partial^k \phi}{\partial t^k} + \phi \right) \, dE \, dV \\
& + \int \int \sum_j f_j^p (1 - \hat{\beta}_j) \nu_j \int \Sigma_{fj} \left( \tau^k \frac{\partial^k \phi}{\partial t^k} + \phi \right) \, dE' \, dE \, dV \\
& + \int \int \int \Sigma_s \left( \tau^k \frac{\partial^k \phi}{\partial t^k} + \phi \right) \, dE' \, dE \, dV \\
& + \int \int \sum_i f_i \lambda_i \left( \tau^k \frac{\partial^k \hat{C}_i}{\partial t^k} + \hat{C}_i \right) \, dE \, dV \\
& + \int \int \tau^k \frac{\partial^k \hat{S}_{ext}}{\partial t^k} + \hat{S}_{ext} \, dE \, dV \\
& = \int \int \frac{1}{v} \left( \tau^k \frac{\partial^{k+1} \phi}{\partial t^{k+1}} + \frac{\partial \phi}{\partial t} \right) \, dE \, dV .
\end{aligned} \tag{2.15}$$

Tendo em mente as relações (2.7), sabendo que

$$\int \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) \, dE = \Sigma_t(\mathbf{r}, E') - \Sigma_a(\mathbf{r}, E') \tag{2.16}$$

e rearranjando os termos, a equação (2.15) pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned}
& \int \int \left[ \nabla \cdot D \nabla \phi + \left( \sum_j (1 - \hat{\beta}_j) \nu_j \Sigma_{fj} - \Sigma_a \right) \phi \right] \, dE \, dV \\
& + \sum_i \int \lambda_i \hat{C}_i \, dV + \tau^k \frac{d^k}{dt^k} \sum_i \int \lambda_i \hat{C}_i \, dV \\
& + \int \int \tau^k \frac{\partial^k \hat{S}_{ext}}{\partial t^k} + \hat{S}_{ext} \, dE \, dV \\
& = \frac{d}{dt} \int \int \frac{1}{v} \phi \, dE \, dV + \tau^k \frac{d^{k+1}}{dt^{k+1}} \int \int \frac{1}{v} \phi \, dE \, dV \\
& + \tau^k \frac{d^k}{dt^k} \int \int \left( \Sigma_a - \sum_j (1 - \beta_j) \nu_j \Sigma_{fj} \right) \phi \, dE \, dV .
\end{aligned} \tag{2.17}$$

Neste instante é feita a suposição que o fluxo escalar de nêutrons e a concentração de nêutrons atrasados podem ser fatorados como uma amplitude dependente do tempo vezes

uma função forma:

$$\begin{aligned}\phi(\mathbf{r}, E, t) &= n(t)G(\mathbf{r}, E, t) \\ \hat{C}_i(\mathbf{r}, t) &= C_i(t)F_i(\mathbf{r}, t),\end{aligned}\tag{2.18}$$

na qual

$n(t)$  representa a densidade de nêutrons;

$G(\mathbf{r}, E, t)$  representa a função forma do fluxo escalar de nêutrons;

$C_i(t)$  representa a concentração de precursores de nêutrons atrasados do grupo  $i$ ;

$F_i(\mathbf{r}, t)$  representa a função forma da concentração espacial de precursores de nêutrons atrasados do grupo  $i$ ; .

As funções forma são atribuídas tais que

$$\int \int \frac{G(\mathbf{r}, E, t)}{v(E)} dE dV = \int F_i(\mathbf{r}, t) dV = 1,\tag{2.19}$$

ou seja, omitindo algumas dependências,

$$\begin{aligned}\int \int \frac{\phi}{v} dE dV &= \int \int \frac{n(t)G}{v} dE dV = n(t) \int \int \frac{G}{v} dE dV = n(t), \\ \int \hat{C}_i dV &= \int \int C_i(t)F_i dV = C_i(t) \int \int F_i dV = C_i(t).\end{aligned}\tag{2.20}$$

Reescrevendo a equação (2.17) considerando (2.18) e (2.20), encontra-se

$$\begin{aligned}&n(t) \int \int \left[ \nabla \cdot D \nabla G + \left( \sum_j \nu_j \Sigma_{fj} \right) G \right] dE dV \\ &- n(t) \sum_j \int \int \hat{\beta}_j \nu_j \Sigma_{fj} G dE dV \\ &+ \sum_i \lambda_i C_i + \tau^k \sum_i \lambda_i \frac{d^k C_i(t)}{dt^k} + \int \int \tau^k \frac{\partial^k \hat{S}_{ext}}{\partial t^k} + \hat{S}_{ext} dE dV \\ &= \frac{dn(t)}{dt} + \tau^k \frac{d^{k+1}n(t)}{dt^k} \\ &+ \tau^k \frac{d^k}{dt^k} \left\{ n(t) \int \int \left( \Sigma_a - \sum_j (1 - \hat{\beta}_j) \nu_j \Sigma_{fj} \right) G dE dV \right\}.\end{aligned}\tag{2.21}$$

Procedimento semelhante pode ser realizado na equação (2.6), resultando em:

$$n(t) \int \sum_j \hat{\beta}_{ji} \nu_j \int \Sigma_{fj}(r, E', t) G(r, E', t) dE' dV - \lambda_i C_i(t) = \frac{dC_i(t)}{dt}.\tag{2.22}$$

E quanto ao termo de fonte espacial externa  $\hat{S}_{ext}(\mathbf{r}, E, t)$ :

$$S_{ext}(t) = \int \int \tau^k \frac{\partial^k \hat{S}_{ext}(\mathbf{r}, E, t)}{\partial t^k} + \hat{S}_{ext}(\mathbf{r}, E, t) dE dV . \quad (2.23)$$

em que

$S_{ext}(t)$  representa a fonte externa de nêutrons.

A equação (2.21) indica que, uma vez conhecidas as funções forma  $G(\mathbf{r}, E, t)$  e  $F_i(\mathbf{r}, t)$ , as integrais na energia e volume podem ser realizadas, restando apenas a dependência temporal. Por conveniência, aqui são definidos os parâmetros cinéticos. As equações (2.21) e (2.22), quando escritas em termos dos parâmetros cinéticos, ficam

$$\begin{aligned} & n(t) \frac{\rho(t) - \beta(t)}{\Lambda(t)} + \sum_i \lambda_i C_i(t) + \tau^k \sum_i \lambda_i \frac{d^k C_i(t)}{dt^k} + S_{ext}(t) \\ & = \frac{dn(t)}{dt} + \tau^k \frac{d^{k+1} n(t)}{dt^{k+1}} + \tau^k \frac{d^k}{dt^k} \left\{ n(t) \left( \frac{1}{l(t)} - \frac{1 - \beta(t)}{\Lambda(t)} \right) \right\} , \end{aligned} \quad (2.24a)$$

$$n(t) \frac{\beta_i(t)}{\Lambda(t)} - \lambda_i C_i(t) = \frac{dC_i(t)}{dt} , \quad (2.24b)$$

em que

$\rho(t)$  representa a reatividade;

$\beta_i(t)$  representa a fração de nêutrons atrasados do grupo  $i$  de precursores;

$\beta(t)$  representa a fração (total) de nêutrons atrasados;

$\Lambda(t)$  representa o tempo médio de geração de nêutrons;

$l(t)$  representa a vida média do nêutron.

Considerando  $n(t)$  e  $C_i(t)$  como densidade de nêutrons e concentração de precursores de nêutrons atrasados respectivamente, estas funções representam a população de nêutrons e de precursores de nêutrons atrasados no meio. Estas funções têm o sentido de média volumétrica de populações, ou seja, a densidade de nêutrons é a média de nêutrons por  $cm^3$  do reator, e a concentração de precursores de nêutrons atrasados é a média de precursores de nêutrons atrasados por  $cm^3$  do reator. O tempo de vida média do nêutron,  $l(t)$  é considerado desde o momento de seu “nascimento”, ou seja, é o tempo que um nêutron demora até sofrer reação nuclear, seja provocando absorção, espalhamento ou fissão, e sua ordem de grandeza em reatores térmicos é em torno de  $10^{-4}s$ . O tempo médio de geração de nêutrons,  $\Lambda(t)$  é

o tempo médio que um nêutron demora desde seu aparecimento até sua absorção gerando fissão. Este parâmetro, juntamente do número de graus de liberdade que existem no sistema de equações de cinética pontual, é o responsável pelo caráter rígido da equação de cinética pontual (sua ordem de grandeza é em torno de  $10^{-5}s$ , podendo chegar a valores ainda menores em certas situações). As frações de nêutrons atrasados  $\beta_i(t)$  e  $\beta(t)$  são, respectivamente, a fração de nêutrons oriundos de decaimento beta dos precursores de nêutrons atrasados, ou seja, dentre todos os nêutrons gerados em um reator nuclear,  $\beta$  é a fração de nêutrons gerados através de decaimento. O parâmetro nuclear  $\rho(t)$  é o parâmetro mais importante, pois fornece uma ideia do balanço entre os nêutrons prontos no sistema. Este parâmetro tem uma relação forte com a fração de nêutrons atrasados,  $\beta(t)$ , e na equação (2.24) é possível observar o motivo: se  $\rho(t) > \beta(t)$ , o coeficiente de  $n(t)$  se torna positivo, o que é uma situação *crítica* para o reator nuclear. Exatamente este adjetivo, *crítico*, é utilizado para caracterizar o regime de operação de um reator nuclear, baseado na reatividade:  $\rho(t) < 0$  indica regime sub-crítico,  $\rho(t) = 0$  denota regime crítico (permanente),  $\rho(t) > 0$  indica regime supercrítico,  $\rho(t) = \beta$  representa regime pronto-crítico e se  $\rho(t) > \beta$  o reator nuclear está em regime super-pronto-crítico. Estes últimos são os mais graves, pois significam que o reator tem o processo sustentável de produção e perda de nêutrons apenas com os nêutrons gerados na fissão (ou estes em excesso, no último caso). Como o tempo de vida média do nêutron tem ordem de grandeza de  $10^{-4}s$ , a cada  $10^{-4}s$  um ciclo de fissão é realizado, gerando uma liberação de energia impossível de ser controlada na prática. A relação da reatividade com a fração de nêutrons atrasados é expressada explicitamente ao utilizar uma unidade adimensional que indica a sua magnitude em relação à fração de nêutrons atrasados. Esta unidade é o *dolar*, [ $\$$ ], em que  $\rho(t_0) = \beta \rightarrow \rho(t_0) = 1\$$ .

Fisicamente, a equação (2.24) pode ser interpretada como uma equação de balanço, em que os termos do lado esquerdo da equação são os termos de difusão clássica e os demais são os termos gerados através da difusão anômala. A equação (2.24) é a equação de cinética pontual de nêutrons fracionária, que é trabalhada e resolvida analiticamente posteriormente neste trabalho. É possível identificar os parâmetros cinéticos ao comparar as equações (2.21)

e (2.22) com as equações (2.24), concluindo que estes são calculados da seguinte maneira:

$$\begin{aligned}
\rho(t) &= \frac{\int \int \left[ \nabla \cdot D \nabla G + \left( \sum_j \nu_j \Sigma_{fj} - \Sigma_a \right) G \right] dE dV}{\int \int \sum_j \nu_j \Sigma_{fj} G dE dV}, \\
\beta_i(t) &= \frac{\int \int \sum_j \hat{\beta}_{ji} \nu_j \Sigma_{fj} G dE dV}{\int \int \sum_j \nu_j \Sigma_{fj} G dE dV}, \\
\beta(t) &= \frac{\sum_j \int \int \hat{\beta}_j \nu_j \Sigma_{fj} G dE dV}{\int \int \sum_j \nu_j \Sigma_{fj} G dE dV} = \sum_i \beta_i(t), \\
\Lambda(t) &= \frac{1}{\int \int \sum_j \nu_j \Sigma_{fj} G dE dV}, \\
l(t) &= \frac{1}{\int \int \Sigma_a G dE dV}.
\end{aligned} \tag{2.25}$$

Este modelo não fickiano inclui três termos adicionais com respeito às equações de cinética pontual clássicas, contendo derivadas de ordem fracionária:  $\frac{d^{k+1}n(t)}{dt^{k+1}}$ ,  $\frac{d^k n(t)}{dt^k}$  e  $\frac{d^k C_i(t)}{dt^k}$ . O significado físico destes três termos sugerem que, para processos de sub-difusão, o primeiro termo é uma contribuição devido à mudanças rápidas na densidade de nêutrons, enquanto o segundo termo representa a importância em mudanças relativamente lentas na densidade de nêutrons, por exemplo, durante o acionamento de uma usina nuclear envolvendo movimentos suaves e controlados das barras de controle. O terceiro termo se torna mais importante, por exemplo, quando o reator está em processo de desligamento. Este termo também pode ser relevante em processos de sistemas *accelerator driven systems* (ADS), que são caracterizados por uma fração pequena de nêutrons atrasados.

Conforme citado anteriormente, o modelo clássico e o de onda podem ser restaurados através da modelagem fracionária. Se considerarmos  $\tau^k \rightarrow 0$ , retorna-se ao modelo clássico de cinética pontual de nêutrons:

$$n(t) \frac{\rho(t) - \beta(t)}{\Lambda(t)} + \sum_i \lambda_i C_i(t) + S_{ext}(t) = \frac{dn(t)}{dt}. \tag{2.26}$$

Por outro lado, se for levado em conta o caso em que  $\tau \rightarrow \frac{3D}{v}$  e  $k \rightarrow 1$ , encontra-se a equação cinética de onda de nêutrons:

$$\begin{aligned} n(t) \frac{\rho(t) - \beta(t)}{\Lambda(t)} + \sum_i \lambda_i C_i(t) + \frac{3D}{v} \sum_i \lambda_i \frac{dC_i(t)}{dt} + S_{ext}(t) \\ = \frac{dn(t)}{dt} \left( 1 + \frac{3D}{v} \frac{1}{l(t)} - \frac{3D}{v} \frac{1 - \beta(t)}{\Lambda(t)} \right) + \frac{3D}{v} \frac{d^2 n(t)}{dt^2}. \end{aligned} \quad (2.27)$$

É importante ressaltar que a formulação para a concentração de precursores de nêutrons atrasados  $C_i(t)$  é idêntica ao modelo clássico, mesmo com um fechamento não fickiano.

Quanto ao cálculo dos parâmetros nucleares, a verdade é que não se sabe de fato exatamente o comportamento das funções forma  $G(\mathbf{r}, E, t)$  e  $F(\mathbf{r}, t)$ . Na verdade, são feitas aproximações para estas funções baseadas em medições e observações de casos já calculados de função forma. Estas aproximações feitas na estimativa das funções forma não caracterizam a imprecisão dos parâmetros cinéticos, uma vez que o cálculo dos mesmos é feito através de integrais. Além disso, cabe notar que os parâmetros  $\Lambda(t)$ ,  $l(t)$  e  $\beta_i(t)$  (e, por consequência,  $\beta(t)$ ), não são considerados dependentes do tempo nos modelos de cinética pontual. Este fato não acontece com a reatividade que, por praxe, possui dependência temporal e, rigorosamente, possui dependência da própria densidade de nêutrons. Levando estes fatos em conta, a equação de cinética pontual de nêutrons fracionária (2.24), considerando efeitos de fonte externa, pode finalmente ser reescrita:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} n(t) - \frac{\rho(t) - \beta}{\Lambda} n(t) - \sum_i \lambda_i C_i(t) - S_{ext}(t) &= -\tau^k \frac{d^{k+1}}{dt^{k+1}} n(t) \\ &- \tau^k \left( \frac{1}{l} - \frac{1 - \beta}{\Lambda} \right) \frac{d^k}{dt^k} n(t) \\ &+ \tau^k \sum_i \lambda_i \frac{d^k}{dt^k} C_i(t), \end{aligned} \quad (2.28)$$

$$\frac{d}{dt} C_i(t) - \frac{\beta_i}{\Lambda} n(t) + \lambda_i C_i(t) = 0, \quad i = 1, \dots, I.$$

### 3 SOLUÇÃO PELO MÉTODO DA DECOMPOSIÇÃO

A equação clássica de cinética pontual de nêutrons possui solução analítica conhecida através da exponencial de matrizes e convolução (se a fonte externa de nêutrons for considerada). Com a finalidade de desenvolver um resultado preciso e confiável para qualquer instante de tempo para o modelo matemático (2.28), é utilizado o método da decomposição como forma de obtenção de uma representação analítica como solução do problema. Este método da decomposição aqui utilizado é um método baseado na decomposição de Adomian para problemas não lineares \*. Utilizando esta metodologia e a decomposição da densidade de nêutrons e da concentração de precursores de nêutrons atrasados, um arranjo de equações recursivas é feito, utilizando os termos de fonte externa ( $S_{ext}(t)$ ) e derivadas fracionárias ( $\tau^k \frac{d^{k+1}n(t)}{dt^{k+1}}$ ,  $\tau^k \left( \frac{1}{l} - \frac{1-\beta}{\Lambda} \right) \frac{d^k n(t)}{dt^k}$  e  $\tau^k \lambda_i \frac{d^k C_i(t)}{dt^k}$ ) como termos fonte deste novo sistema de equações diferenciais ordinárias de primeira ordem. As soluções deste sistema recursivo são constituintes da solução final. Para encontrar o resultado em períodos de tempo muito longos, em que há a necessidade da consideração de muitos termos da série para um resultado preciso, é utilizada a continuidade analítica. Uma análise de convergência baseada no critério de Lyapunov é feita para a expansão em série realizada e para justificar a utilização da continuidade analítica.

#### 3.1 Metodologia Geral

No caso de cinética pontual de nêutrons fracionária, tanto a densidade de nêutrons quanto a concentração de precursores são expandidos nesta forma, considerando a série

---

\*O método da decomposição de Adomian, [Adomian, 1994], foi desenvolvido principalmente para a utilização em problemas não lineares. A aplicação da decomposição de Adomian envolve, entre outros tipos de manejo, os polinômios de Adomian para a determinação dos termos fonte de sua decomposição, uma vez que para o cálculo destes termos fonte há a necessidade de realizar produtos entre séries. Neste trabalho é utilizada uma metodologia similar para a obtenção da solução de (2.28), porém, como a equação fracionária de cinética pontual de nêutrons é linear, o uso dos polinômios de Adomian para problemas não lineares não é necessário.

truncada no  $R + 1$ -ésimo termo conforme um critério de parada. O critério de parada utilizado foi o de estabilidade relativa, ou seja, para uma suposta expansão em séries  $f(x) = \sum_{r=0}^{\infty} f_r(x)$ , a série truncada em  $R$ ,  $\hat{f}(x) = \sum_{r=0}^R f_r(x)$ , é uma aproximação satisfatória (ou seja,  $\hat{f}(x) \cong f(x)$ ) se, e somente se,  $\frac{f_r(x)}{f_{r-1}(x)} < \epsilon$  para todo  $x$ . Neste caso, o valor de  $\epsilon$  é  $\epsilon = 10^{-6}$ . Apesar deste critério de parada não garantir a convergência, ele é eficaz devido a aplicação do critério de Lyapunov para convergência e estabilidade de expansões em série. No final deste capítulo, o critério de convergência segundo Lyapunov e a justificativa do critério de parada utilizado são mostrados. Com isto em mente, a densidade de nêutrons e a concentração de precursores devidamente expandidos em séries de funções auxiliares ficam:

$$\begin{aligned} n(t) &= \sum_{r=0}^{\infty} n_r(t) \cong \sum_{r=0}^R n_r(t) , \\ C_i(t) &= \sum_{r=0}^{\infty} C_{ir}(t) \cong \sum_{r=0}^R C_{ir}(t) . \end{aligned} \tag{3.1}$$

Neste trabalho, as condições iniciais do problema são sempre consideradas no primeiro sistema recursivo, e as condições iniciais para as demais recursões da decomposição são nulas. No problema de cinética pontual clássica, é considerada uma situação de regime crítico ( $\rho = 0$ ), logo as derivadas de primeira ordem são nulas no instante de tempo de referência  $t = 0$ . No caso da modelagem fracionária, devido à definição de derivada fracionária utilizada, as derivadas fracionárias no tempo de referência também serão identicamente nulas<sup>†</sup>.

$$n_0(t = 0) = n(t = 0) = n(0) , \quad C_{i0}(t = 0) = C_i(t = 0) = \frac{\beta_i n(0)}{\lambda_i \Lambda} , \tag{3.2}$$

$$n_r(t = 0) = C_{ir}(t = 0) = 0 \quad r = 1, \dots, R ; i = 1, \dots, I. \tag{3.3}$$

Esta suposição não é uma regra da aplicação da decomposição, porém é um manejo para garantir a dominância do primeiro termo da série da decomposição. A importância deste fato está relacionada com a convergência da série, e será mostrada a seguir.

As expansões (3.1) inseridas nas equações de cinética pontual de nêutrons fracionária (2.28) (omitindo as dependências do tempo) e rearranjando a equação para que apenas os

---

<sup>†</sup>Algumas definições de derivada fracionária expressam a derivada fracionária de uma constante como sendo uma função dependente do tempo, neste caso. Neste trabalho, a escolha da definição de derivada fracionária ocorreu exatamente devido ao fato de a definição escolhida ao ser aplicada em uma constante resulta em zero.

termos com derivada de ordem fracionária fiquem ao lado direito da igualdade, ficam:

$$\begin{aligned}
\frac{d(n_0 + \dots + n_R)}{dt} &= \frac{\rho - \beta}{\Lambda} (n_0 + \dots + n_R) - \sum_{i=1}^I \lambda_i (C_{i0} + \dots + C_{iR}) - S_{ext} \\
&= -\tau^k \frac{d^{k+1}(n_0 + \dots + n_R)}{dt^{k+1}} + \tau^k \sum_{i=1}^I \lambda_i \frac{d^k(C_{i0} + \dots + C_{iR})}{dt^k} \\
&\quad - \tau^k \left[ \frac{1}{l} - \frac{1 - \beta}{\Lambda} \right] \frac{d^k(n_0 + \dots + n_R)}{dt^k}, \tag{3.4} \\
\frac{d(C_{i0} + \dots + C_{iR})}{dt} &= \frac{\beta_i}{\Lambda} (n_0 + \dots + n_R) + \lambda_i (C_{i0} + \dots + C_{iR}) = 0.
\end{aligned}$$

A partir destas equações, é feito um arranjo recursivo de equações diferenciais de primeira ordem. A equação diferencial da primeira recursão é

$$\begin{aligned}
\frac{dn_0(t)}{dt} - \frac{\rho(t) - \beta}{\Lambda} n_0(t) - \sum_{i=1}^I \lambda_i C_{i0}(t) &= S_{ext}(t), \tag{3.5} \\
\frac{dC_{i0}(t)}{dt} - \frac{\beta_i}{\Lambda} n_0(t) + \lambda_i C_{i0}(t) &= 0.
\end{aligned}$$

As demais recursões seguem o padrão

$$\begin{aligned}
\frac{dn_r(t)}{dt} - \frac{\rho(t) - \beta}{\Lambda} n_r(t) - \sum_{i=1}^I \lambda_i C_{ir}(t) &= s_r(t) \\
\frac{dC_{ir}(t)}{dt} - \frac{\beta_i}{\Lambda} n_r(t) + \lambda_i C_{ir}(t) &= 0, \tag{3.6} \\
s_r(t) &= -\tau^k \frac{d^{k+1}n_{r-1}(t)}{dt^{k+1}} - \tau^k \left[ \frac{1}{l} - \frac{1 - \beta}{\Lambda} \right] \frac{d^k n_{r-1}(t)}{dt^k} + \tau^k \sum_{i=1}^I \lambda_i \frac{d^k C_{i(r-1)}(t)}{dt^k}
\end{aligned}$$

para  $r = 1, \dots, R$ . As equações (3.6) e (3.5), reescritas em forma matricial, ficam

$$\frac{d\mathbf{Y}_r(t)}{dt} - \mathbf{A}(t)\mathbf{Y}_r(t) = \mathbf{S}_r(t), \tag{3.7}$$

em que

$$\mathbf{Y}_r(t) = \begin{pmatrix} n_r(t) \\ C_{1r}(t) \\ \vdots \\ C_{Ir}(t) \end{pmatrix}, \mathbf{A}(t) = \begin{pmatrix} \frac{\rho(t)-\beta}{\Lambda} & \lambda_1 & \dots & \lambda_I \\ \frac{\beta_1}{\Lambda} & -\lambda_1 & 0 & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & \vdots \\ \frac{\beta_I}{\Lambda} & 0 & \dots & -\lambda_I \end{pmatrix}, \mathbf{S}_r(t) = \begin{pmatrix} s_r(t) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.8)$$

para  $r = 0, \dots, R$ , considerando que o termo fonte da primeira iteração é o termo de fonte externa ( $s_0(t) = S_{ext}(t)$ ).

A solução da primeira recursão (3.5),  $\mathbf{Y}_0(t)$ , é determinada através das conhecidas soluções de sistemas lineares de primeira ordem por exponencial de matriz e convolução<sup>‡</sup>:

$$\mathbf{Y}_0(t) = \exp\left(\int_0^t \mathbf{A}(t') dt'\right) \mathbf{Y}_0(0) + \exp\left(\int_0^t \mathbf{A}(t') dt'\right) * \mathbf{S}_0(t'). \quad (3.10)$$

Com a intenção de resolver as demais equações recursivas, é preciso realizar o cálculo de  $s_r(t)$ . É conveniente lembrar que é possível determinar o termo fonte  $s_r(t)$ , uma vez que na iteração  $r$  é utilizado o resultado da iteração anterior,  $r - 1$ , para o cálculo de  $s_r(t)$  (para  $r = 1, \dots, R$ ). Porém, para a determinação do termo fonte, é necessário avaliar algumas derivadas fracionárias. A escolha da definição de derivada fracionária e o cálculo específico das derivadas deste problemas serão considerados na próxima seção.

As soluções das demais recursões (3.6) são encontradas através da conhecida solução por convolução. A solução das demais recursões  $\mathbf{Y}_r(t)$  é dada por

$$\mathbf{Y}_r(t) = \exp\left(\int_0^t \mathbf{A}(t') dt'\right) * \mathbf{S}_r(t'), \quad r = 1, \dots, R \quad (3.11)$$

lembrando que as condições iniciais  $\mathbf{Y}_r(0)$  são nulas para  $r = 1, \dots, R$ .

A partir das soluções  $\mathbf{Y}_r(t)$ , são reconstruídas as soluções do problema original pela

---

<sup>‡</sup>Note que o produto convolutivo entre  $f(t)$  e  $g(t)$  é

$$f(t) * g(t) = \int_0^t f(t-t')g(t') dt' = \int_0^t f(t')g(t-t') dt'. \quad (3.9)$$

relação (3.1).

É conveniente lembrar que este procedimento, inspirado na decomposição de Adomian, fornece uma solução analítica para qualquer instante de tempo, se as soluções (3.11) e (3.10) forem calculadas analiticamente. Nas próximas seções são descritas as aproximações realizadas no processo a fim de encontrar uma solução semi-analítica para a cinética pontual de nêutrons fracionária, porém sem perda de generalidade e precisão. Além disso, nas próximas seções é descrito o porquê da utilização da continuidade analítica para garantir a convergência da solução.

### 3.2 Derivada Fracionária

Para o cálculo dos termos de fonte da decomposição ( $s_r(t)$ ) é necessário encontrar uma definição de derivada fracionária apropriada. Dentre as definições mais utilizadas, destacam-se a de Riemann-Liouville, Caputo, Weyl e Grünwald-Letnikov. As três primeiras são semelhantes e são definidas como uma forma integral, enquanto a última é oriunda da definição de derivada utilizando o limite, sendo mais útil na aplicação de métodos discretos como diferenças finitas. Dentre estas, a utilizada neste trabalho é a de Riemann-Liouville, que além de ser uma das mais tradicionais, é a que melhor se adapta ao caso em questão. De qualquer forma, é importante ressaltar que o operador derivada fracionária (assim como o operador integral fracionária) é linear, ou seja:

$$\frac{d^\kappa}{dt^\kappa} (Af(t) + Bg(t)) = A \frac{d^\kappa}{dt^\kappa} f(t) + B \frac{d^\kappa}{dt^\kappa} g(t) \quad A, B, g \in \mathbb{C}. \quad (3.12)$$

A definição de derivada fracionária de Riemann-Liouville é representada por

$$\frac{d^\kappa f(t)}{dt^\kappa} = \frac{1}{\Gamma(m - \kappa)} \frac{d^m}{dt^m} \int_c^t \frac{f(t')}{(t - t')^{1+\kappa-m}} dt', \quad (3.13)$$

para  $0 < \kappa < m$ ,  $m$  é um número inteiro positivo e  $\Gamma(x)$  denota a função gama.  $c$  é um limite de integração arbitrário, e deve ser determinado dependendo da função a ser derivada. Neste trabalho, para o cálculo dos termos fonte da decomposição, é necessário avaliar derivadas fracionárias de funções exponenciais, e exatamente por esta razão, a escolha mais apropriada para  $c$  é  $-\infty$ . Esta escolha para  $c$  também caracteriza a chamada definição de Liouville para derivadas fracionárias. Além disto, neste trabalho é considerado o caso de sub-difusão, em

que a ordem da derivada fracionária é  $0 < k < 1$ , ou seja, não há necessidade de  $m$  ser maior que 1. Em termos práticos,  $m = 1$  e  $c \rightarrow -\infty$ , logo forma da definição de Riemann-Liouville utilizada neste trabalho fica

$$\frac{d^\kappa f(t)}{dt^\kappa} = \frac{1}{\Gamma(1 - \kappa)} \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^t \frac{f(t')}{(t - t')^\kappa} dt' . \quad (3.14)$$

Esta definição, quando utilizada em funções exponenciais, resulta em

$$\frac{d^k}{dt^k} \exp(at) = a^k \exp(at) , \quad (3.15)$$

e a derivada fracionária de constantes, utilizando  $\exp(0) = 1$  para representar as constantes, resulta em

$$\frac{d^k}{dt^k} \exp(0) = 0 . \quad (3.16)$$

Mais informações sobre o cálculo fracionário e algumas de suas aplicações podem ser encontrados posteriormente neste mesmo trabalho no anexo I.

### 3.3 Reatividade, Fonte Externa e Termos Fonte da Decomposição

Os parâmetros dependentes do tempo das equações (2.28),  $\rho(t)$  e  $S_{ext}(t)$ , exigem um esforço extra ao serem trabalhados num código computacional. Além destes termos, os termos de fonte gerados pela decomposição  $s_r(t)$  também geram complicação semelhante. Neste sentido são feitas considerações relativas à implementação computacional destes termos.

A tese de Petersen, [Petersen, 2011], demonstra com sucesso que a parte dependente do tempo da reatividade pode ser incluída no termo fonte do sistema da decomposição. Porém, no presente estudo, será utilizado o método da aproximação constante da reatividade, que consiste em aproximar a reatividade como uma função constante por partes. Caso a não ocorram mudanças bruscas na reatividade (grandes mudanças em sua derivada em um pequeno intervalo de tempo,  $\frac{d^2\rho(t)}{dt^2} \cong 0$ ), esta aproximação fornece um resultado satisfatoriamente preciso. Além disso, o resultado encontrado com esta aproximação depende fortemente do passo de tempo dado para cada parte considerada na aproximação. A fim de evitar confusão entre os passos de tempo da continuidade analítica e da aproximação da reatividade, neste trabalho é utilizado o mesmo intervalo para ambos, ou seja,  $\rho(t)$  será

representada somente como  $\rho$ , constante de agora em diante. Realizando esta aproximação e substituindo  $\rho(t)$  por  $\rho$  na matriz  $\mathbf{A}(t)$ , esta vira uma matriz de constantes  $\mathbf{A}$ .

O termo de fonte externa, como dito no capítulo anterior, é relevante somente em alguns casos, como no acionamento do reator nuclear. A fim de explorar a possibilidade de um caso cujo termo de fonte externa seja relevante, é analisada sua inclusão no método da decomposição. Assim como a reatividade, espera-se que a função fonte seja suave, ou seja,  $\frac{d^2 S_{ext}(t)}{dt^2} \cong 0$  para qualquer tempo e é realizada uma aproximação contínua por partes no termo de fonte externa. A precisão do resultado utilizando esta aproximação também depende do passo de tempo, que, como no caso da reatividade, é igual ao passo da continuidade analítica, ou seja,  $S_{ext}(t)$  será representado somente como  $S_{ext}$ , constante nas formulações posteriores. Este resultado afeta o vetor  $\mathbf{S}_0(t)$ , trocando seu único termo dependente do tempo em uma constante. Este vetor será descrito daqui para a frente sem a dependência temporal:  $\mathbf{S}_0$ .

Os termos de fonte da decomposição,  $s_r(t)$ , já calculados seguindo orientações dadas nas seções anteriores, também são aproximados por funções contínuas para cada determinado intervalo de tempo. Daqui para a frente,  $s_r(t)$  será representado como  $s_r$ , constante, para  $r = 1, \dots, R$  e, por consequência,  $\mathbf{S}_r(t)$  será descrito como  $\mathbf{S}_r$ , um vetor independente do tempo.

Cabe lembrar que, tanto no caso da reatividade quanto no caso de fonte externa e termos fonte da decomposição, na primeira seção deste capítulo é demonstrado que as soluções das recursões da decomposição  $\mathbf{Y}_r(t)$ , tanto na primeira iteração quanto nas demais, são encontradas utilizando um operador integral. Desta forma, as aproximações realizadas não possuem grande influência no resultado, se o intervalo de tempo for suficientemente pequeno para que o valor da integral não seja significativamente alterado devido às aproximações.

Por causa destas aproximações, a formulação do problema pode ser implementada. Como o operador da equação de cinética pontual de nêutrons é autoadjunto, os autovalores de  $\mathbf{A}$  são distintos, logo a sua exponencial pode ser calculada da forma

$$\exp\left(\int_0^t \mathbf{A}(t') dt'\right) = \exp(\mathbf{A}t) = \mathbf{X} \exp(\mathbf{W}t) \mathbf{X}^{-1}, \quad (3.17)$$

onde

$\mathbf{W}$  representa a matriz diagonal dos autovalores de  $\mathbf{A}$ ;

$\mathbf{X}$  representa a matriz dos autovetores de  $\mathbf{A}$ ;

e  $\mathbf{X}^{-1}$  denota a matriz inversa de  $\mathbf{X}$ .

Levando em conta estas simplificações e reescrevendo a expressão (3.10):

$$\begin{aligned} \mathbf{Y}_0(t) &= \exp\left(\int_0^t \mathbf{A}(t') dt'\right) \mathbf{Y}_0(0) + \exp\left(\int_0^t \mathbf{A}(t') dt'\right) * \mathbf{S}_0(t') \\ &= \exp(\mathbf{A}t) \mathbf{Y}_0(0) + \exp(\mathbf{A}t) * \mathbf{S}_0 \\ &= \mathbf{X} \exp(\mathbf{W}t) \mathbf{X}^{-1} \mathbf{Y}_0(0) + \mathbf{X} \mathbf{W}^{-1} [\exp(\mathbf{W}t) - \mathbf{I}] \mathbf{X}^{-1} \mathbf{S}_0, \end{aligned} \quad (3.18)$$

ou, finalmente,

$$\mathbf{Y}_0(t) = \mathbf{X} \left\{ \exp(\mathbf{W}t) \mathbf{X}^{-1} \mathbf{Y}_0(0) + \mathbf{W}^{-1} [\exp(\mathbf{W}t) - \mathbf{I}] \mathbf{X}^{-1} \mathbf{S}_0 \right\}, \quad (3.19)$$

onde  $\mathbf{I}$  denota a matriz identidade.

Procedimento semelhante é feito com a expressão para a solução de cada iteração da decomposição, (3.11), encontrando

$$\mathbf{Y}_r(t) = \mathbf{X} \mathbf{W}^{-1} [\exp(\mathbf{W}t) - \mathbf{I}] \mathbf{X}^{-1} \mathbf{S}_r, \quad (3.20)$$

sendo que, quando  $r = 1, \dots, R$ , a definição de derivada fracionária (3.14), citada na seção anterior, é utilizada:

$$\begin{aligned} \frac{d^k}{dt^k} \mathbf{Y}_0(t) &= \frac{d^k}{dt^k} \mathbf{X} \left\{ \exp(\mathbf{W}t) \mathbf{X}^{-1} \mathbf{Y}_0(0) + \mathbf{W}^{-1} [\exp(\mathbf{W}t) - \mathbf{I}] \mathbf{X}^{-1} \mathbf{S}_0 \right\} \\ &= \mathbf{X} \left\{ \frac{d^k}{dt^k} \exp(\mathbf{W}t) \mathbf{X}^{-1} \mathbf{Y}_0(0) + \mathbf{W}^{-1} \frac{d^k}{dt^k} [\exp(\mathbf{W}t) - \mathbf{I}] \mathbf{X}^{-1} \mathbf{S}_0 \right\} \\ &= \mathbf{X} \left\{ \mathbf{W}_k \exp(\mathbf{W}t) \mathbf{X}^{-1} \mathbf{Y}_0(0) + \mathbf{W}^{-1} \mathbf{W}_k \exp(\mathbf{W}t) \mathbf{X}^{-1} \mathbf{S}_0 \right\}, \end{aligned} \quad (3.21)$$

$$\frac{d^{k+1}}{dt^{k+1}} \mathbf{Y}_0(t) = \mathbf{X} \left\{ \mathbf{W}_{k+1} \exp(\mathbf{W}t) \mathbf{X}^{-1} \mathbf{Y}_0(0) + \mathbf{W}^{-1} \mathbf{W}_{k+1} \exp(\mathbf{W}t) \mathbf{X}^{-1} \mathbf{S}_0 \right\}. \quad (3.22)$$

Para os demais termos da decomposição,  $r = 1, \dots, R$ ,

$$\frac{d^k}{dt^k} \mathbf{Y}_r(t) = \mathbf{W}^{-1} \mathbf{W}_k \exp(\mathbf{W}t) \mathbf{X}^{-1} \mathbf{S}_r, \quad (3.23)$$

$$\frac{d^{k+1}}{dt^{k+1}} \mathbf{Y}_r(t) = \mathbf{W}^{-1} \mathbf{W}_{k+1} \exp(\mathbf{W}t) \mathbf{X}^{-1} \mathbf{S}_r, \quad (3.24)$$

em que, segundo a definição de derivada fracionária utilizada:

$$\mathbf{W}_k = \begin{pmatrix} w_1^k & 0 & & 0 \\ 0 & w_2^k & \cdots & 0 \\ & \vdots & \ddots & \\ 0 & 0 & & w_{I+1}^k \end{pmatrix}, \quad \mathbf{W}_{k+1} = \begin{pmatrix} w_1^{k+1} & 0 & & 0 \\ 0 & w_2^{k+1} & \cdots & 0 \\ & \vdots & \ddots & \\ 0 & 0 & & w_{I+1}^{k+1} \end{pmatrix}, \quad (3.25)$$

nos quais

$w_q$  representa o  $q$ -ésimo autovalor de  $\mathbf{A}$ ,  $q = 1, \dots, I + 1$ .

Nas expressões (3.19) e (3.20) é mostrado explicitamente, e através de um método direto, o cálculo de  $\mathbf{Y}_r(t)$  ( $r = 0, \dots, R$ ), que são partes constituintes do termo fonte  $\mathbf{S}_r$  e da solução final,  $\mathbf{Y}(t)$ , relacionados através de (3.1). É importante ressaltar que, com esta metodologia, os resultados tanto para a densidade de nêutrons quanto para as concentrações de precursores serão uma soma de exponenciais, como no caso da cinética pontual clássica, ou seja,

$$\begin{aligned} n(t) &= \sum_{q=1}^Q a_q \exp(\alpha_q t) \\ C_i(t) &= \sum_{q=1}^Q b_{iq} \exp(\alpha_q t) \end{aligned} \quad (3.26)$$

### 3.4 Critério de Lyapunov

Com a intenção de garantir a estabilidade e convergência da solução obtida através do método da decomposição de Adomian, o critério de convergência e estabilidade de Lyapunov é utilizado. Sem perder generalidade, a análise realizada por este critério é feita considerando a densidade de nêutrons, tendo em vista que o procedimento para as concentrações de precursores de nêutrons atrasados é análogo. A forma do critério de Lyapunov utilizada foi a mesma utilizada em [Petersen, 2011] devido à semelhança nas formulações matemática e física envolvidas. Este critério de convergência implica que, se na expressão

$$\|n(t)\| \leq m \exp(-\alpha(t - t_0)) \|n(t_0)\| \quad (3.27)$$

existirem  $m, \alpha > 0$  e  $\epsilon > 0$  tais que  $\|n(t_0)\| \leq \epsilon$ ,  $n(t)$  é dito exponencialmente estável para  $t \geq t_0$ . Este é o caso na aplicação do método da decomposição, de acordo com a equação (3.26). Este tipo de estabilidade é uma estabilidade forte, assintótica, o que garante a convergência da solução do problema aqui proposto. Além disso, o maior valor de  $\alpha$  que pode ser utilizado na expressão (3.27) é chamada a *razão de convergência*.

No caso dos problema resolvidos neste trabalho, esta metodologia se torna necessária para garantir a convergência das séries geradas através da decomposição, pois seu raio de convergência é restrito. Neste sentido, é escolhido um passo de tempo  $\Delta t$  menor que o raio de convergência da série, o que garante a convergência da solução naquele intervalo de tempo. Além disso, devido às manipulações realizadas na reatividade e termos fonte, o passo de tempo  $\Delta t$  utilizado deve ser tal que satisfaça as aproximações realizadas por todas estas suposições, ou seja, deve ser o menor passo de tempo entre os requisitados por estas suposições e pela convergência da série segundo o critério de Lyapunov.

Com isto, o resultado do cálculo da densidade de nêutrons e concentração de precursores é considerado uma *representação semi-analítica*, no sentido que mantém a precisão e exatidão da solução analítica, porém com aproximações e manejos necessários para o cálculo de cinética pontual de nêutrons à larga escala. Em suma, o procedimento utilizado tem a intenção de ser preciso o suficiente e prático o suficiente para uma solução de engenharia em que, por fim, seja possível enxergar os objetivos do trabalho sem problemas.

## 4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Com a intenção de analisar os efeitos da difusão anômala e do tempo de relaxação no comportamento da densidade de nêutrons, o modelo matemático (2.28) é resolvido analiticamente de acordo com a metodologia descrita anteriormente. Para fins de avaliação numérica são utilizados os seguintes parâmetros nucleares obtidos de Kinard e Allen [Kinard e Allen, 2004] para todos os casos para comparação entre casos:

Tabela 4.1 – Parâmetros nucleares

$\Lambda = 0,00001s$	$l = 0,00024s$				$\beta = 0,007$	
$\beta_i \times 10^3 :$	0,266	1,491	1,316	2,849	0,896	0,182
$\lambda_i [s^{-1}] :$	0,0127	0,0317	0,1550	0,311	1,40	3,87

Considerando  $\tau$  e  $k$ , aqui chamados de parâmetros fracionários, são realizados testes para diferentes combinações entre esses a fim de analisar suas influências nos resultados, ou seja, para um mesmo caso são considerados diferentes tempos de relaxação (0 - modelo clássico,  $10^{-6}s$ ,  $10^{-5}s$  e  $10^{-4}s$ ) e diferentes ordens de derivada fracionária (1; 0,99; 0,98; 0,97 e 0,96). Também é mostrada uma comparação entre os resultados obtidos com o modelo fracionário e os encontrados utilizando o modelo clássico, aqui chamado de resultado normalizado, calculado como sendo a razão entre um determinado resultado utilizando o modelo fracionário (para determinados valores de  $\tau$  e  $k$ ) e o resultado do modelo clássico de cinética pontual.

Neste capítulo, são analisados casos de reatividades constantes e dependentes do tempo, simulando um afastamento da criticalidade do reator. Também são considerado alguns casos de partida do reator nuclear, partindo da condição de densidade de nêutrons e concentração de precursores nulas, considerando o termo fonte da equação (2.28). Aqui, devido ao estado de equilíbrio do reator nuclear, para tempos menores que 0s a reatividade é

considerada nula. Para os casos em que a fonte de nêutrons é desconsiderada e as alterações no regime do reator ocorrem apenas devido à mudanças na reatividade, as condições iniciais utilizadas são

$$n(0) = 1cm^{-3} , C_i(0) = \left( \frac{\beta_i}{\Lambda\lambda_i} \right) cm^{-3} \quad i = 1, \dots, I , \quad (4.1)$$

enquanto no caso de simulação da partida do reator, as condições iniciais ficam

$$n(0) = 0cm^{-3} , C_i(0) = 0cm^{-3} \quad i = 1, \dots, I . \quad (4.2)$$

#### 4.1 Reatividade Constante

Para os primeiros casos, são calculadas a densidade de nêutrons e a concentração de precursores de nêutrons atrasados considerando três valores constantes para a reatividade, sendo dois sub-pronto-críticos ( $\rho < \beta$ ) e um pronto-crítico ( $\rho = \beta$ ) para diferentes tempos. O caso super-crítico ( $\rho > \beta$ ) não é considerado neste trabalho pois seus resultados numéricos atingem o limite numérico (*overflow*) rapidamente para o modelo fracionário. De qualquer forma, os casos de reatividade constante considerados nesta seção são suficientes para que sejam percebidos os efeitos do modelo fracionário.

Esta seção tem a intenção de mostrar qual influência que a modelagem fracionária tem ao haver uma mudança brusca na reatividade em comparação com o modelo clássico, considerando então  $\rho(t) = 0$  para  $t \leq 0$  e  $\rho(t) = a$  para  $t > 0$ , em que  $a$  é constante no tempo. São considerados os valores de  $a = 0,003$ ,  $a = 0,005$  e  $a = 0,007 = 1\%$ , em que esta última denota a reatividade pronto-crítica. A seguir, as figuras 4.1, 4.2, 4.3 e 4.4 mostram os gráficos do comportamento da densidade de nêutrons através do tempo entre 0s e 20s, em seu valor absoluto e normalizado, para o caso em que  $a = 0,003$  ao atribuir diferentes valores de  $k$  e  $\tau$  \*.

---

\*Nos gráficos em que são atribuídos diferentes valores de  $\tau$ , este não é expresso em sua letra grega, mas sim em seu análogo fonético para o alfabeto português “tau”. Além disso, nos mesmos gráficos os seus valores são representados da forma como o software de programação *SciLab*<sup>®</sup> interpreta como potência. Por exemplo: tau=10^-4s deve ser lido como  $\tau = 10^{-4}s$  nos gráficos.

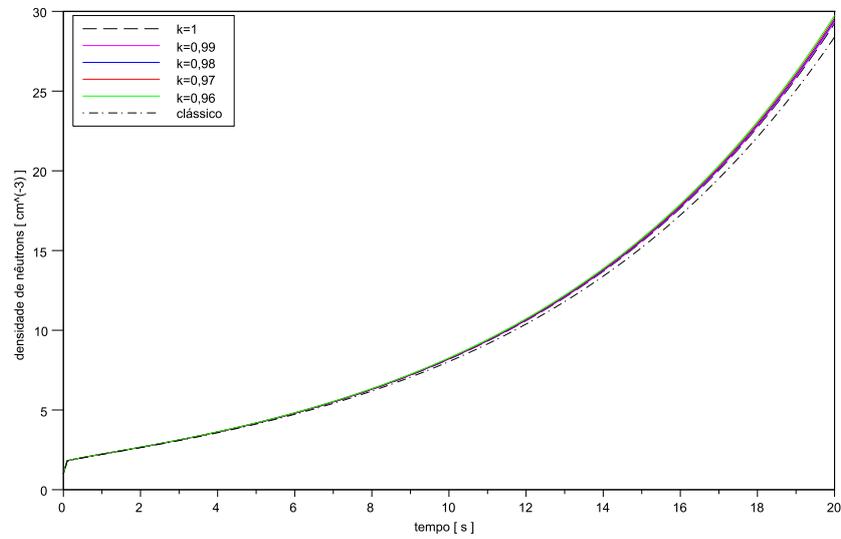


Figura 4.1 – Densidade de nêutrons para  $\rho(t) = a$ ,  $\tau = 10^{-4}s$  e diferentes valores de  $k$ , com  $a = 0,003$ .

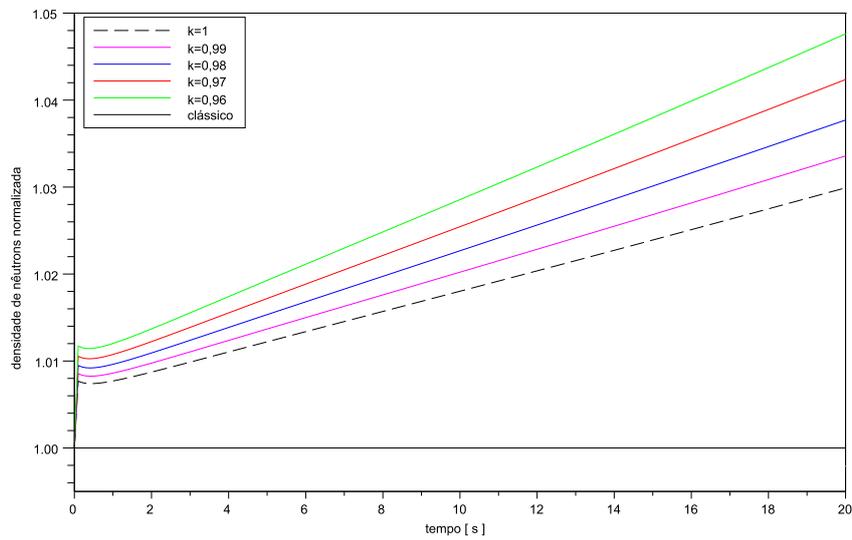


Figura 4.2 – Densidade de nêutrons normalizada para  $\rho(t) = a$ ,  $\tau = 10^{-4}s$  e diferentes valores de  $k$ , com  $a = 0,003$ .

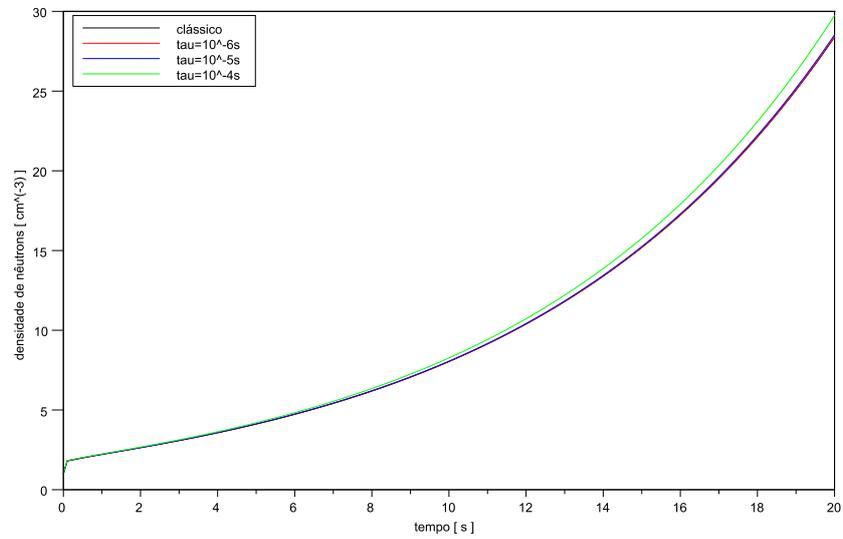


Figura 4.3 – Densidade de nêutrons para  $\rho(t) = a$ ,  $k = 0,96$  e diferentes valores de  $\tau$ , com  $a = 0,003$ .

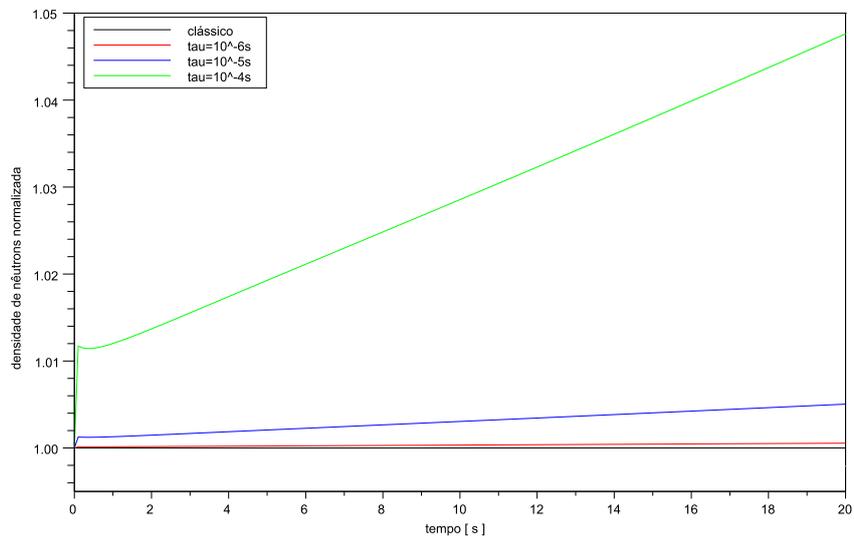


Figura 4.4 – Densidade de nêutrons normalizada para  $\rho(t) = a$ ,  $k = 0,96$  e diferentes valores de  $\tau$ , com  $a = 0,003$ .

De acordo com estes gráficos é possível concluir que o modelo fracionário não possui uma diferença relativa relevante nos resultados em relação ao modelo clássico. Mesmo para instantes de tempo em torno de 20s, observa-se que os resultados não diferem em mais do que 5%, o que indica que a aplicação do modelo fracionário se assemelha ao clássico em termos práticos e o uso de um ou de outro não afeta significativamente a operação de um reator nuclear quando há este específico caso de salto de 0,003 na reatividade.

A seguir são mostrados os gráficos para a densidade de nêutrons para  $a = 0,005$ , o que indica um valor ainda menor que  $\beta$  para a reatividade. As figuras 4.5, 4.6, 4.7 e 4.8 mostram os gráficos do comportamento da densidade de nêutrons através do tempo entre 0s e 5s, em seu valor absoluto e normalizado, para este caso, em que cada gráfico é variado um dos parâmetros fracionários.

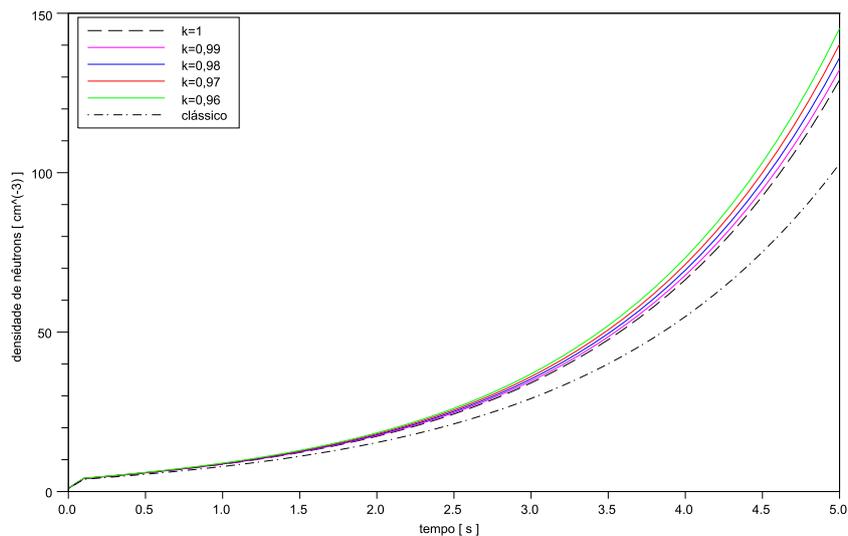


Figura 4.5 – Densidade de nêutrons para  $\rho(t) = a$ ,  $\tau = 10^{-4}s$  e diferentes valores de  $k$ , com  $a = 0,005$ .

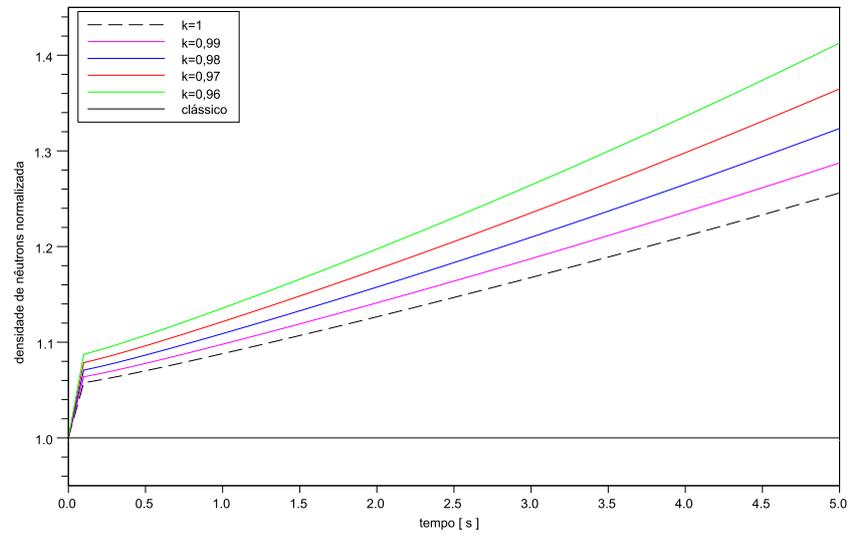


Figura 4.6 – Densidade de nêutrons normalizada para  $\rho(t) = a$ ,  $\tau = 10^{-4} s$  e diferentes valores de  $k$ , com  $a = 0,005$ .

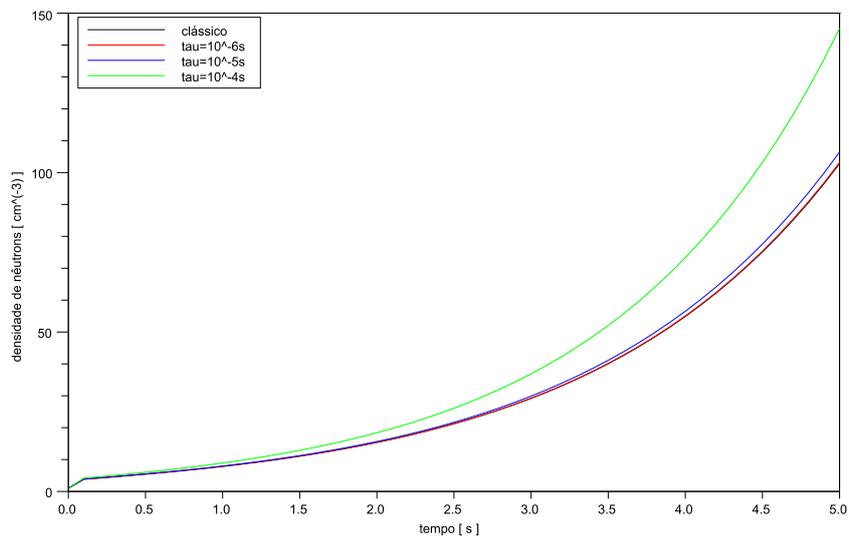


Figura 4.7 – Densidade de nêutrons para  $\rho(t) = a$ ,  $k = 0,96$  e diferentes valores de  $\tau$ , com  $a = 0,005$ .

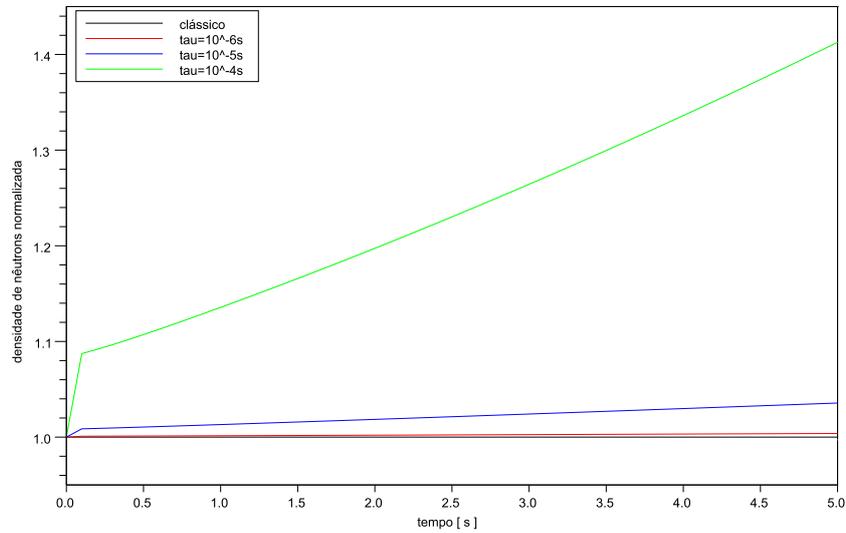


Figura 4.8 – Densidade de nêutrons normalizada para  $\rho(t) = a$ ,  $k = 0,96$  e diferentes valores de  $\tau$ , com  $a = 0,005$ .

Estes gráficos acima mostram com clareza que um salto maior na reatividade provoca uma mudança maior no resultado entre os modelos fracionário e clássico. É possível observar também que os valores de  $k = 0,96$  e  $\tau = 10^{-4}s$  representam o modelo que mais se distancia do caso clássico. Além disso, apesar de estes gráficos representarem apenas uma fração do intervalo de tempo considerado para o caso em que  $a = 0,003$ , os resultados dos modelos fracionários se distanciaram muito mais se for considerado  $a = 0,005$ , chegando a atingir mais de 40% de diferença relativa em algumas combinações de  $k$  e  $\tau$ . Esta diferença pode ser observada de forma semelhante para casos de reatividades pronto-críticas ( $a = \beta$ ) e super pronto-críticas ( $a > \beta$ ), porém o resultado atinge o limite numérico (*overflow*) rapidamente, levando a análise a ser feita considerando apenas intervalos de tempo na ordem de 1s ou menores. Apesar disso, alguns valores numéricos são demonstrados a seguir para o caso de reatividade pronto-crítica  $a = 0,007 = \beta$ . Para estes casos, então, não são demonstrados os gráficos, ficando apenas o conhecimento de que quanto maior for o salto na reatividade, maior a diferença relativa entre os modelos fracionários e clássico para reatividade constante. A seguir, nas tabelas 4.2 e 4.3 são mostrados alguns valores numéricos da densidade de nêutrons

para os casos avaliados em diversos instantes de tempo.

Tabela 4.2 – Valores da densidade de nêutrons ( $n(t)$ ) para reatividade constante ( $\rho(t) = a$ ) e  $\tau = 10^{-4}s$  para diferentes  $k$  [ $cm^{-3}$ ].

$a$	$k$	$t = 1s$	$t = 2s$	$t = 5s$	$t = 10s$	$t = 20s$
0,003	1	2,2297054	-	-	8,1814408	29,241476
	0,99	2,2317091	-	-	8,1990402	29,345623
	0,98	2,2339491	-	-	8,2188183	29,462901
	0,97	2,2364540	-	-	8,2410568	29,595066
	0,96	2,2392560	-	-	8,2660767	29,744132
	clássico	2,2126583	-	-	8,0365911	28,392266
0,005	1	8,5531686	17,317646	129,09743	-	-
	0,99	8,6307948	17,541407	132,32729	-	-
	0,98	8,7180092	17,794152	136,02668	-	-
	0,97	8,8162156	18,080449	140,28278	-	-
	0,96	8,9270787	18,405789	145,20405	-	-
	clássico	7,8610561	15,372080	102,78221	-	-
0,007	1	$2,952 \times 10^{79}$	$3,32 \times 10^{157}$	overflow	-	-
	0,99	$7,042 \times 10^{80}$	$1,88 \times 10^{160}$	overflow	-	-
	0,98	$1,679 \times 10^{82}$	$1,07 \times 10^{163}$	overflow	-	-
	0,97	$3,999 \times 10^{83}$	$6,03 \times 10^{165}$	overflow	-	-
	0,96	$9,518 \times 10^{84}$	$3,39 \times 10^{168}$	overflow	-	-
	clássico	$4,027 \times 10^8$	$7,456 \times 10^{15}$	$4,734 \times 10^{37}$	-	-

Tabela 4.3 – Valores da densidade de nêutrons ( $n(t)$ ) para reatividade constante ( $\rho(t) = a$ ) e  $k = 0,96$  para diferentes  $\tau$  [ $cm^{-3}$ ].

$a$	$\tau$ [s]	$t = 1s$	$t = 2s$	$t = 5s$	$t = 10s$	$t = 20s$
0,003	0	2,2126583	-	-	8,0365911	28,392266
	$10^{-6}$	2,2129713	-	-	8,0392701	28,407895
	$10^{-5}$	2,2155192	-	-	8,0610942	28,53535
	$10^{-4}$	2,239256	-	-	8,2660767	29,744132
0,005	0	7,8610561	15,372080	102,78221	-	-
	$10^{-6}$	7,8722184	15,402825	103,17424	-	-
	$10^{-5}$	7,9641766	15,656939	106,44399	-	-
	$10^{-4}$	8,9270787	18,405789	145,20405	-	-
0,007	0	$4,027 \times 10^8$	$7,456 \times 10^{15}$	$4,734 \times 10^{37}$	-	-
	$10^{-6}$	$3,824 \times 10^{10}$	$6,267 \times 10^{19}$	$2,756 \times 10^{47}$	-	-
	$10^{-5}$	$1,455 \times 10^{38}$	$7,954 \times 10^{74}$	$1,17 \times 10^{185}$	-	-
	$10^{-4}$	$9,518 \times 10^{84}$	$3,39 \times 10^{168}$	overflow	-	-

De acordo com os resultados obtidos, percebe-se uma maior influência dos termos com derivadas fracionárias à medida que a intensidade da mudança brusca da reatividade é ressaltada. O tempo de relaxação demonstra ser sensível a mudanças bruscas, influenciando o resultado significativamente mesmo para pequenas variações, enquanto a ordem da derivada fracionária não varia muito o resultado ao compará-la com a ordem inteira da derivada,  $k = 1$ . No caso de reatividade pronto-crítica  $\rho = 0,007$  para  $t = 5s$  o resultado sofre *overflow* para todos os casos fracionários, enquanto ainda gerava um valor numérico para o caso clássico, o que indica que o resultado da modelagem fracionária nos casos citados são muitas vezes maiores que o clássico. Ou seja, quanto maior é o tamanho do salto na reatividade, maior é a influência dos termos fracionários no modelo de cinética pontual. Além disso, é possível perceber, ao observar as figuras das densidades de nêutrons normalizadas para diferentes valores de  $k$ , que o resultado se aproxima do valor clássico quando  $k$  se aproxima da unidade. Apesar deste fato, mesmo os resultados quando  $k = 1$  são relativamente afastados

do resultado clássico e, assim como nos modelos em que  $0 < k < 1$ , um salto maior na reatividade também causa uma diferença entre este modelo e o clássico.

## 4.2 Reatividade Rampa

Nesta seção é analisada a situação em que a reatividade varia linearmente, ou seja,  $\rho(t) = bt$ , em que  $b$  é uma constante arbitrária. A intenção do estudo nesta seção é a comparação entre os valores da densidade de nêutrons para os mesmos instantes de tempo, considerando uma mínima alteração no valor de  $b$  de um caso para outro. São considerados os casos em que  $b = 0,00021s^{-1} = 0,03\$/s$  e  $b = 0,00028s^{-1} = 0,04\$/s$  entre  $0s$  e  $20s$ . As figuras 4.9, 4.10, 4.11 e 4.12, abaixo, mostram o comportamento da densidade de nêutrons através do tempo para o caso de  $b = 0,00021s^{-1}$ , para seus valores absolutos e normalizados, relevando a variação de um parâmetro fracionário a cada gráfico.

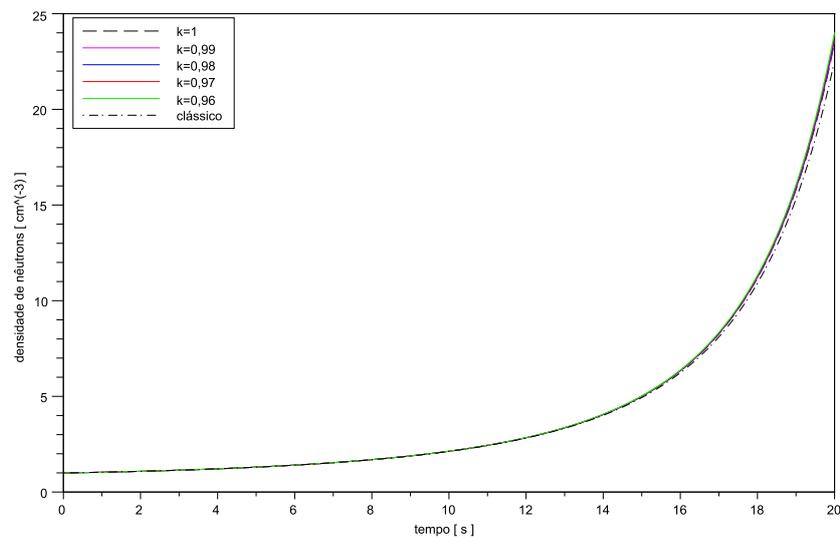


Figura 4.9 – Densidade de nêutrons para  $\rho(t) = bt$ ,  $\tau = 10^{-4}s$  e diferentes valores de  $k$ , com  $b = 0,00021s^{-1}$ .

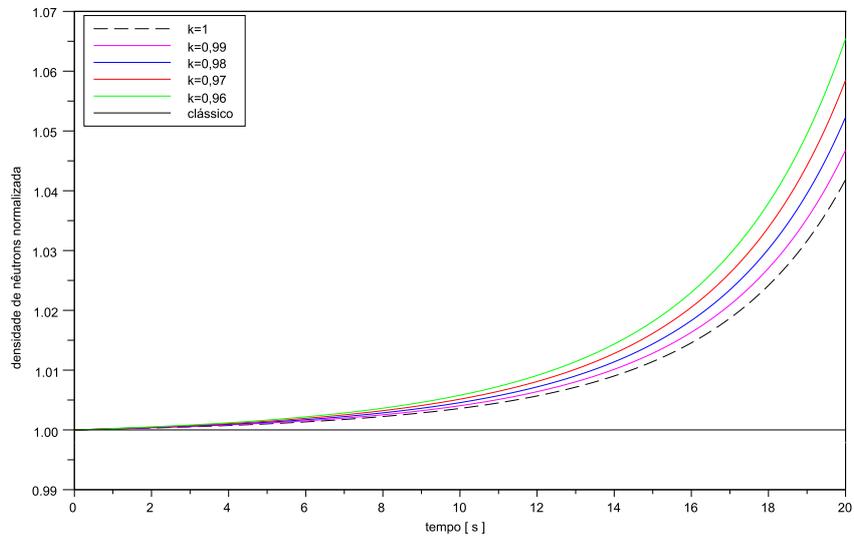


Figura 4.10 – Densidade de nêutrons normalizada para  $\rho(t) = bt$ ,  $\tau = 10^{-4}s$  e diferentes valores de  $k$ , com  $b = 0,00021s^{-1}$ .

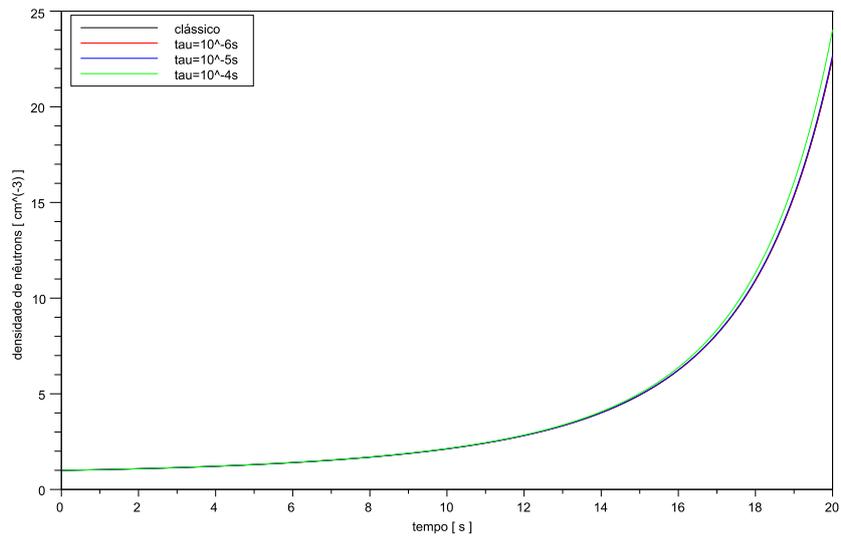


Figura 4.11 – Densidade de nêutrons para  $\rho(t) = bt$ ,  $k = 0,96$  e diferentes valores de  $\tau$ , com  $b = 0,00021s^{-1}$ .

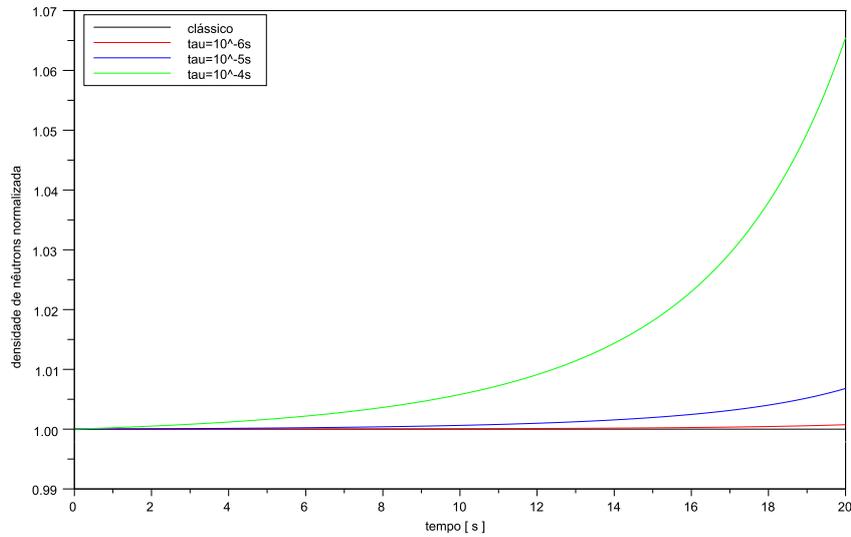


Figura 4.12 – Densidade de nêutrons normalizada para  $\rho(t) = bt$ ,  $k = 0,96$  e diferentes valores de  $\tau$ , com  $b = 0,00021s^{-1}$ .

Com estes gráficos, observa-se que, assim como para o caso de reatividade constante em que  $a = 0,003$ , para a reatividade rampa ( $b = 0,00021s^{-1}$ ) não há variação significativa entre o modelo fracionário e o clássico devido à pequena magnitude da reatividade em ambos os casos. A diferença relativa nos piores casos não supera 7%, sendo bem menor que isso na maior parte dos casos. Em seguida é mostrado o comportamento da densidade de nêutrons através do tempo para um  $b = 0,00028s^{-1}$  nas figuras 4.13, 4.14, 4.15 e 4.16, também analisando variações no modelo fracionário através de seus parâmetros  $k$  e  $\tau$ .

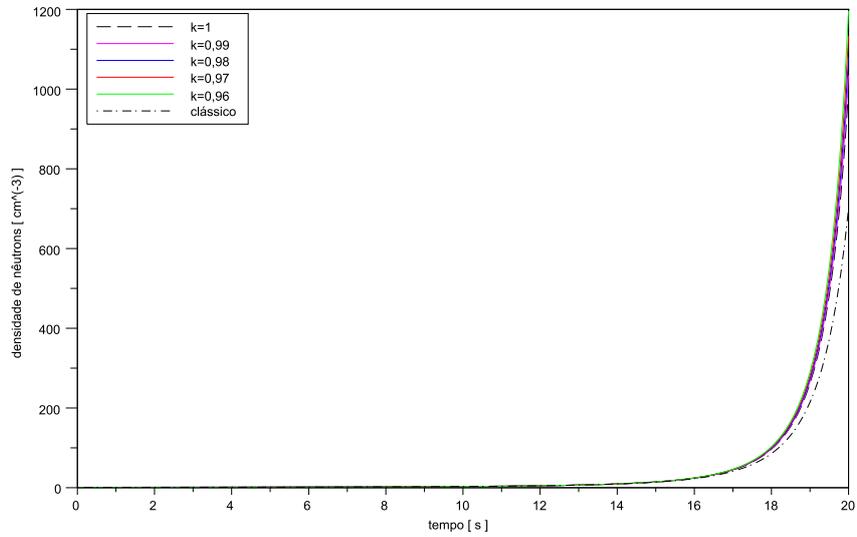


Figura 4.13 – Densidade de nêutrons para  $\rho(t) = bt$ ,  $\tau = 10^{-4}s$  e diferentes valores de  $k$ , com  $b = 0,00028s^{-1}$ .

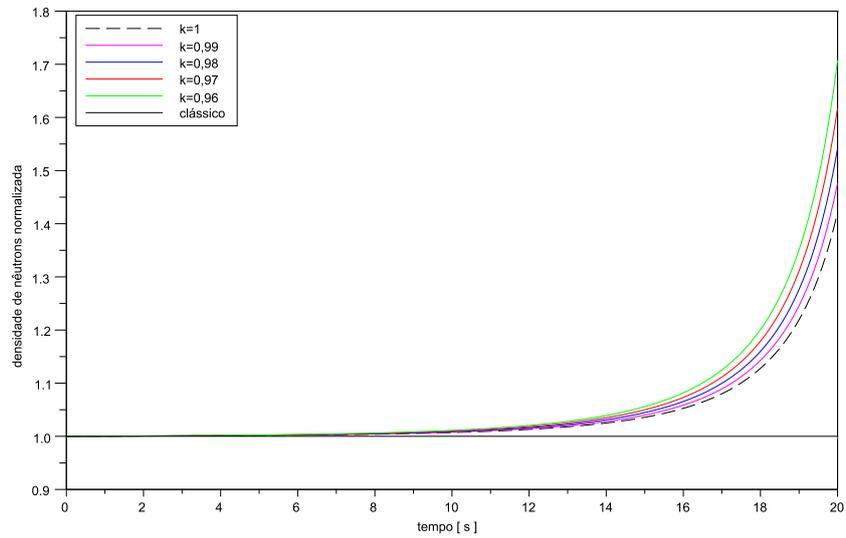


Figura 4.14 – Densidade de nêutrons normalizada para  $\rho(t) = bt$ ,  $\tau = 10^{-4}s$  e diferentes valores de  $k$ , com  $b = 0,00028s^{-1}$ .

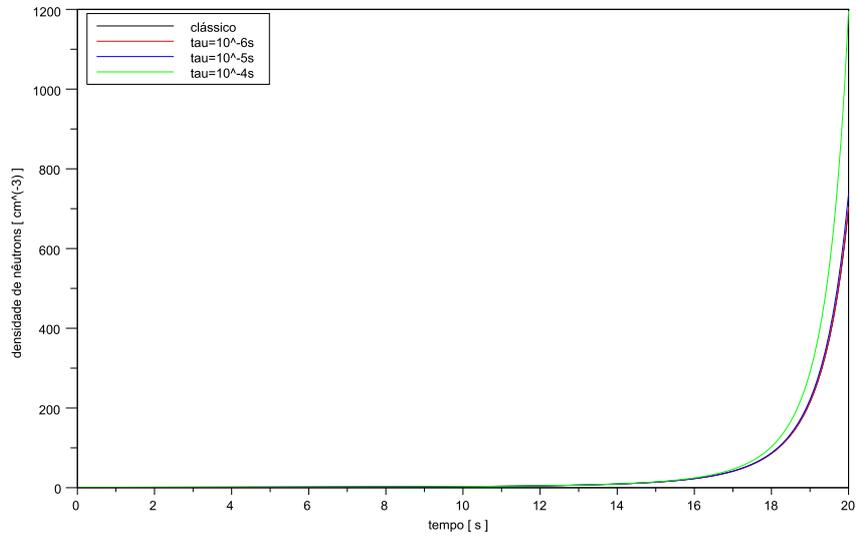


Figura 4.15 – Densidade de nêutrons para  $\rho(t) = bt$ ,  $k = 0,96$  e diferentes valores de  $\tau$ , com  $b = 0,00028\text{s}^{-1}$ .

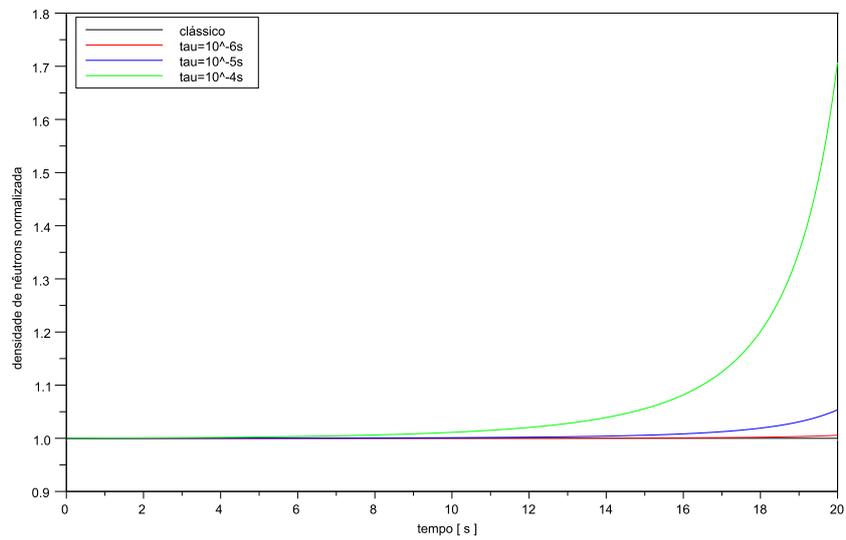


Figura 4.16 – Densidade de nêutrons normalizada para  $\rho(t) = bt$ ,  $k = 0,96$  e diferentes valores de  $\tau$ , com  $b = 0,00028\text{s}^{-1}$ .

Pode ser observado um acréscimo significativo na diferença entre os modelos fracionário e clássico em certos casos, podendo ter valor superior a 70%. Uma pequena modificação na reatividade ( $0,00007s^{-1}$  ou  $0,01\$/s$ ) provoca uma mudança extrema na diferença entre os resultados. É sabido que esta pequena alteração provoca a reatividade a assumir valores bem maiores que os anteriores, mas cabe ressaltar que o modelo fracionário não releva os efeitos da reatividade diretamente, e sim da densidade de nêutrons. Esta pequena variação na reatividade provoca uma variação modificada na densidade de nêutrons, o que, por sua vez, provoca uma relevância dos termos fracionários na equação de cinética pontual. As tabelas 4.4 e 4.5, abaixo, mostram valores numéricos da densidade de nêutrons avaliada em diversos instantes de tempo para diferentes  $\tau$  e  $k$ , respectivamente.

Tabela 4.4 – Valores da densidade de nêutrons ( $n(t)$ ) para reatividade rampa ( $\rho(t) = bt$ ) e  $\tau = 10^{-4}s$  para diferentes  $k$  [ $cm^{-3}$ ].

$b$	$k$	$t = 1s$	$t = 2s$	$t = 10s$	$t = 20s$
$0,00021s^{-1}$ ou $0,03\$/s$	1	1,0347948	1,2998965	2,1306430	23,489036
	0,99	1,0348141	1,3000663	2,1316119	23,599813
	0,98	1,0348357	1,3002578	2,1327035	23,724160
	0,97	1,0348601	1,3004738	2,1339336	23,863885
	0,96	1,0348876	1,3007177	2,1353201	24,021073
	clássico	1,0346400	1,2985845	2,1230160	22,545160
$0,00028s^{-1}$ ou $0,04\$/s$	1	1,0469144	1,4370581	3,0505170	995,48713
	0,99	1,0469408	1,4373426	3,0531506	1034,3546
	0,98	1,4697040	1,4376632	3,0561095	1079,6896
	0,97	1,0470038	1,4380245	3,0594348	1132,9392
	0,96	1,0470413	1,4384316	3,0631731	1195,9844
	clássico	1,0467012	1,4348326	3,0291037	700,50253

Tabela 4.5 – Valores da densidade de nêutrons ( $n(t)$ ) para reatividade rampa ( $\rho(t) = bt$ ) e  $k = 0,96$  para diferentes  $\tau$  [ $cm^{-3}$ ].

$b$	$\tau$ [s]	$t = 1s$	$t = 5s$	$t = 10s$	$t = 20s$
0,00021 $s^{-1}$ ou 0,03\$/s	0	1,03464	1,2985845	2,1230160	22,545160
	$10^{-6}$	1,034643	1,2986100	2,1231623	22,561882
	$10^{-5}$	1,034667	1,2988169	2,1243515	22,698544
	$10^{-4}$	1,0348876	1,3007177	2,1353201	24,021073
0,00028 $s^{-1}$ ou 0,04\$/s	0	1,0467012	1,4348326	3,0291037	700,50253
	$10^{-6}$	1,0467052	1,4348755	3,0295062	704,48091
	$10^{-5}$	1,0467382	1,4352243	3,0327814	738,07751
	$10^{-4}$	1,0470413	1,4384316	3,0631731	1195,9844

É possível observar que a densidade de nêutrons não sofre uma variação muito significativa ao variar os parâmetros fracionários para  $b = 0,03 \times 0,007s^{-1}$ , mesmo para o tempo de 20s, que indica um valor relativamente alto para a reatividade,  $\rho(t = 20s) = 0,0042 = 0,60\%$ . Os dados coletados para  $b = 0,04 \cdot 0,007s^{-1}$  indicam que há uma mudança significativa na densidade de nêutrons ao considerar o modelo fracionário. A ordem da derivada próxima da unidade se destaca quando instantes de tempo afastados da origem são considerados, enquanto os tempos de relaxação mais próximos de zero amenizam o efeito do modelo fracionário. Ao comparar estes casos, é observado que uma mudança de 0,01\$/s na reatividade é capaz de causar uma alteração acentuada na densidade de nêutrons normalizada. Este fato ocorre principalmente por causa da diferença entre o desenvolvimento da densidade de nêutrons em relação ao tempo. Como é de se esperar, uma alteração neste desenvolvimento, mesmo suave, é capaz de alterar a influência dos termos de derivadas fracionárias na solução final. Apesar disso é possível amenizar os efeitos da modelagem fracionária com uma escolha adequada de  $k$  e principalmente  $\tau$ , caso seja for necessário.

### 4.3 Reatividade Senoidal

Para fins de análise de reatividade senoidal, são considerados três casos nesta seção, alterando apenas o período da função trigonométrica (seno) entre um e outro caso. São estudadas as reatividades do tipo  $\rho(t) = A \sin(ft)$ , em que  $A = 0,003$  e para  $f$  são atribuídos os valores  $f = 2\pi s^{-1}$ ,  $f = \pi s^{-1}$  e  $f = \pi/2 s^{-1}$ . O objetivo desta seção é averiguar a influência da modelagem fracionária quando a densidade de nêutrons tem comportamento oscilatório com o tempo, verificando se esta modifica o período de oscilação ou sua amplitude. As figuras 4.17, 4.18, 4.19 e 4.20, a seguir, mostram as influências dos parâmetros  $k$  e  $\tau$  na modelagem fracionária para a reatividade senoidal, em comparação com os resultados da cinética pontual de nêutrons clássica e entre outras combinações de parâmetros fracionários.

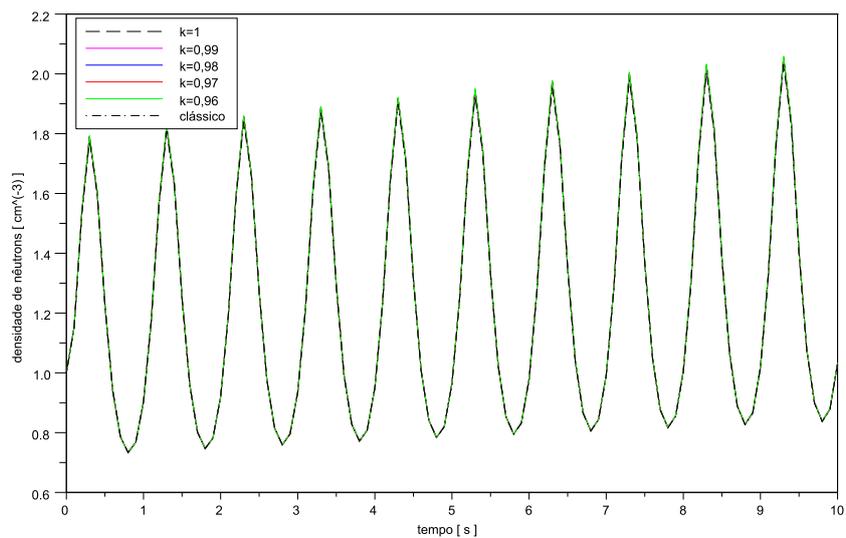


Figura 4.17 – Densidade de nêutrons para  $\rho(t) = A \sin(ft)$ ,  $\tau = 10^{-4} s$  e diferentes valores de  $k$ , com  $A = 0,003$  e  $f = 2\pi s^{-1}$ .

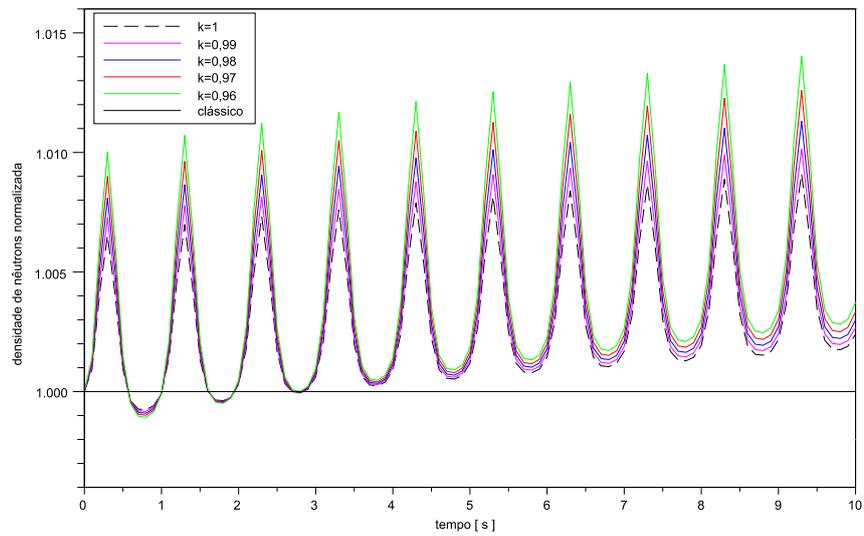


Figura 4.18 – Densidade de nêutrons normalizada para  $\rho(t) = A \sin(ft)$ ,  $\tau = 10^{-4} s$  e diferentes valores de  $k$ , com  $A = 0,003$  e  $f = 2\pi s^{-1}$ .

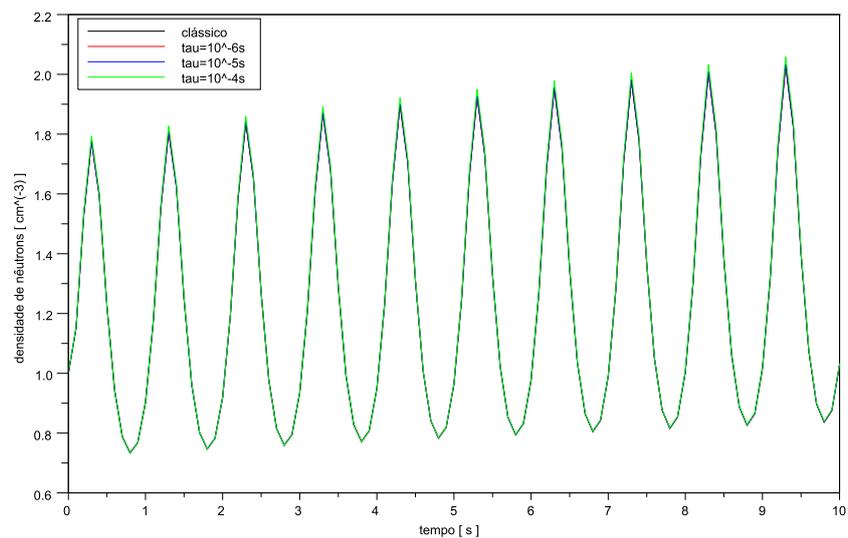


Figura 4.19 – Densidade de nêutrons para  $\rho(t) = A \sin(ft)$ ,  $k = 0,96$  e diferentes valores de  $\tau$ , com  $A = 0,003$  e  $f = 2\pi s^{-1}$ .

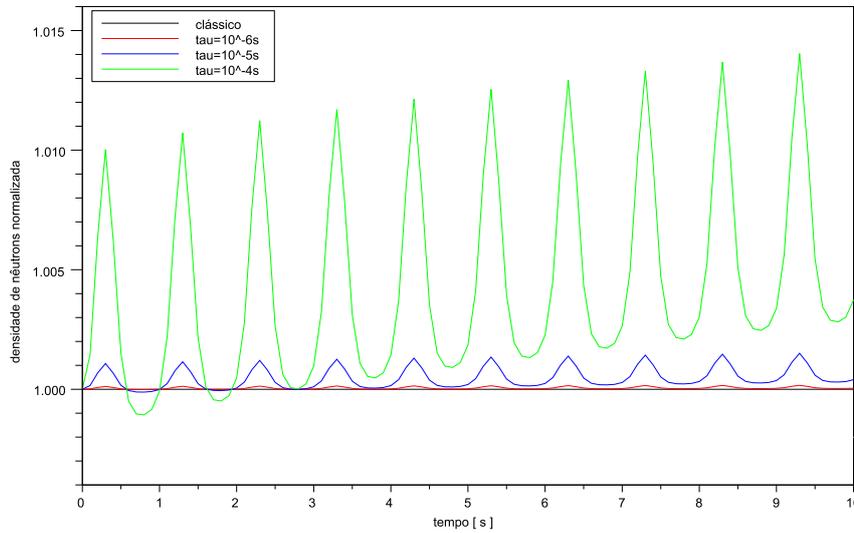


Figura 4.20 – Densidade de nêutrons normalizada para  $\rho(t) = A \text{sen}(ft)$ ,  $k = 0,96$  e diferentes valores de  $\tau$ , com  $A = 0,003$  e  $f = 2\pi \text{s}^{-1}$ .

Estes gráficos mostram que a modelagem fracionária influencia pouco quando há a presença de um fator oscilatório na equação fracionária de cinética pontual de nêutrons. Este fato ocorre devido principalmente à definição de derivada fracionária escolhida, uma vez que a forma da definição de derivada fracionária de Riemann-Liouville escolhida, quando aplicada em uma função trigonométrica, mantém o caráter trigonométrico. O resultado também não sofre alteração significativa em relação aos resultados clássicos, contendo suas soluções em um desvio relativo de não mais que 1,5% nos piores casos nos gráficos mostrados. Apesar disto, destaca-se o fato que a densidade de nêutrons normalizada tem seus maiores valores nos picos dos gráficos ( $ft = q\pi/2$ , com  $q = 1, 5, 9, 13 \dots$ ). Isto ocorre devido à magnitude dada a pequenas variações na densidade de nêutrons em um curto intervalo de tempo, o que reforça o fato de que o modelo fracionário dá importância para os transientes curtos. A seguir, as figuras 4.21, 4.22, 4.23 e 4.24 mostram os valores da densidade de nêutrons em seus valores absolutos e normalizados para diferentes combinações de  $\tau$  e  $k$  para reatividade senoidal, porém para  $f = \pi \text{s}^{-1}$ .

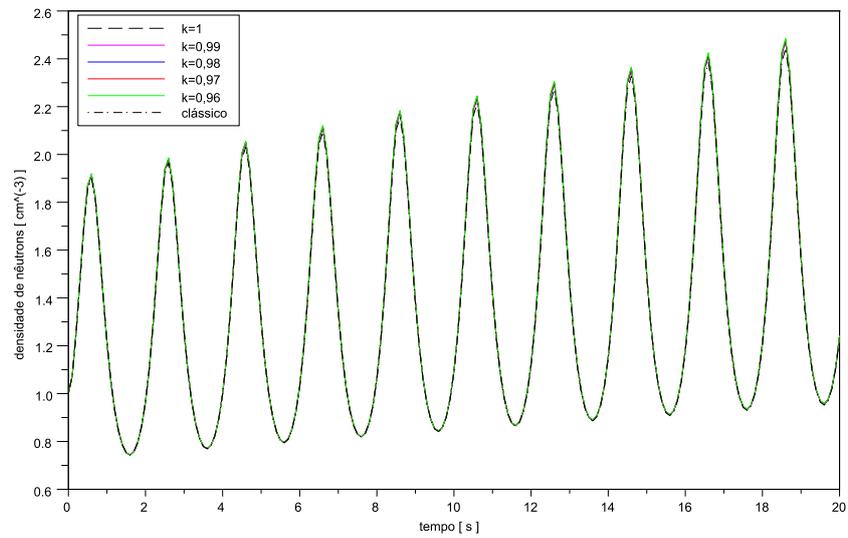


Figura 4.21 – Densidade de nêutrons para  $\rho(t) = A \sin(ft)$ ,  $\tau = 10^{-4} s$  e diferentes valores de  $k$ , com  $A = 0,003$  e  $f = \pi s^{-1}$ .

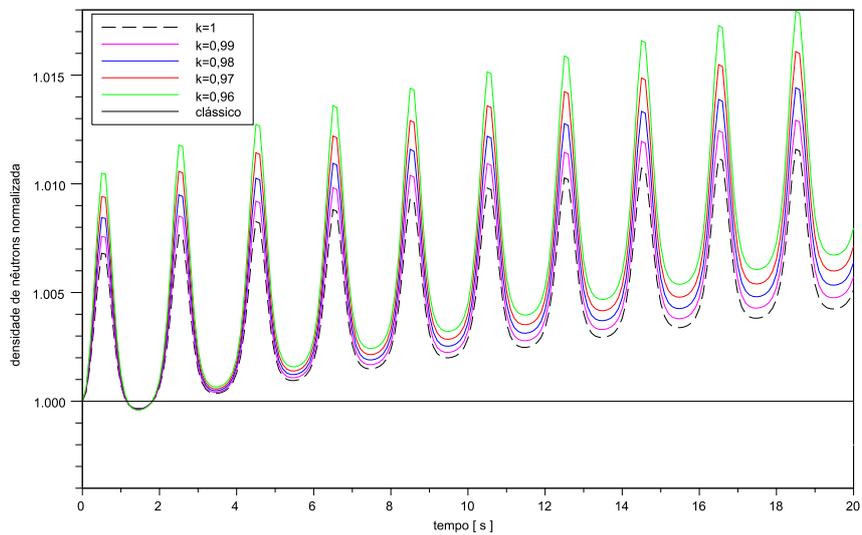


Figura 4.22 – Densidade de nêutrons normalizada para  $\rho(t) = A \sin(ft)$ ,  $\tau = 10^{-4} s$  e diferentes valores de  $k$ , com  $A = 0,003$  e  $f = \pi s^{-1}$ .

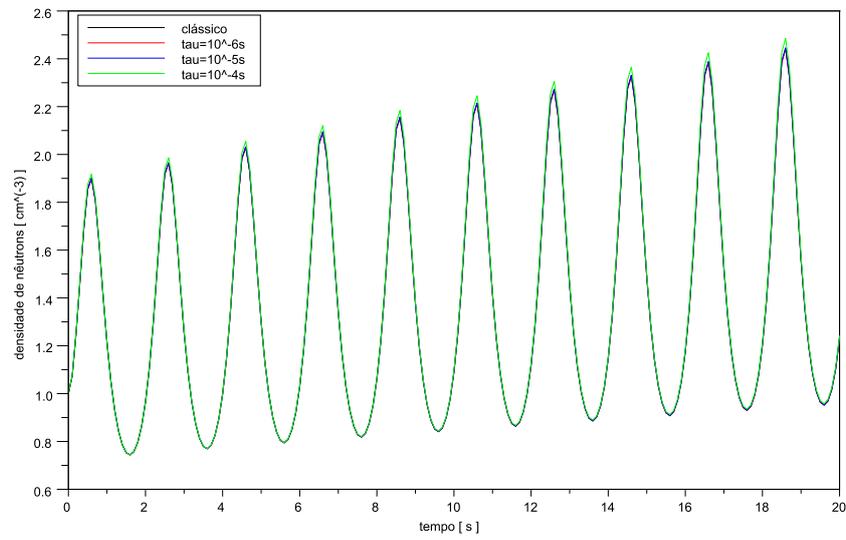


Figura 4.23 – Densidade de nêutrons para  $\rho(t) = A \sin(ft)$ ,  $k = 0,96$  e diferentes valores de  $\tau$ , com  $A = 0,003$  e  $f = \pi s^{-1}$ .

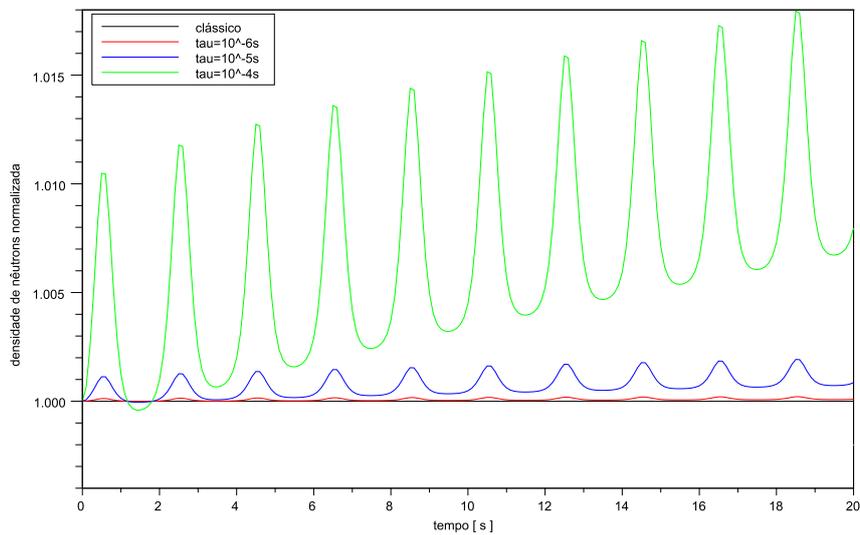


Figura 4.24 – Densidade de nêutrons normalizada para  $\rho(t) = A \sin(ft)$ ,  $k = 0,96$  e diferentes valores de  $\tau$ , com  $A = 0,003$  e  $f = \pi s^{-1}$ .

Nestes gráficos há uma diferença maior na densidade de nêutrons normalizada do que o caso anterior, alcançando 2% em algumas combinações de  $k$  e  $\tau$  (comparando com os 1,5% para  $f = 2\pi s^{-1}$ ). Isto não acontece por causa da derivada fracionária em si, mas sim pelo próprio desenvolvimento temporal do problema. A evolução no tempo aumenta a incidência da relevância dos termos fracionários na equação de cinética pontual para qualquer problema na verdade, não apenas para este caso específico. Para maiores demonstrações deste fato, são mostradas as figuras 4.25, 4.26, 4.27 e 4.28, que são os gráficos da densidade de nêutrons para reatividade senoidal com  $f = \pi/2s^{-1}$ . Assim como em todos os casos deste capítulo, os gráficos representam o comportamento da densidade de nêutrons pelo tempo para diferentes combinações de  $k$  e  $\tau$ , em seus valores absolutos e normalizados.

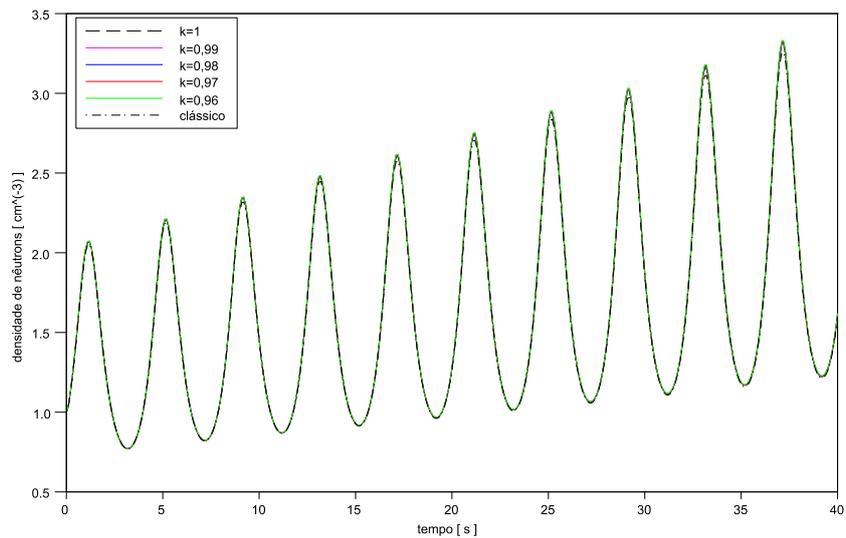


Figura 4.25 – Densidade de nêutrons para  $\rho(t) = A\text{sen}(ft)$ ,  $\tau = 10^{-4}s$  e diferentes valores de  $k$ , com  $A = 0,003$  e  $f = \pi/2s^{-1}$ .

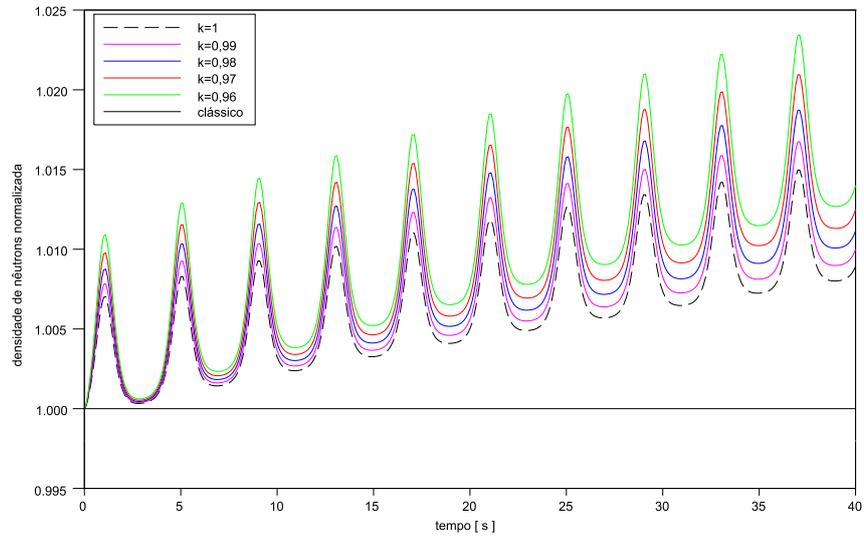


Figura 4.26 – Densidade de nêutrons normalizada para  $\rho(t) = A \operatorname{sen}(ft)$ ,  $\tau = 10^{-4} \text{ s}$  e diferentes valores de  $k$ , com  $A = 0,003$  e  $f = \pi/2 \text{ s}^{-1}$ .

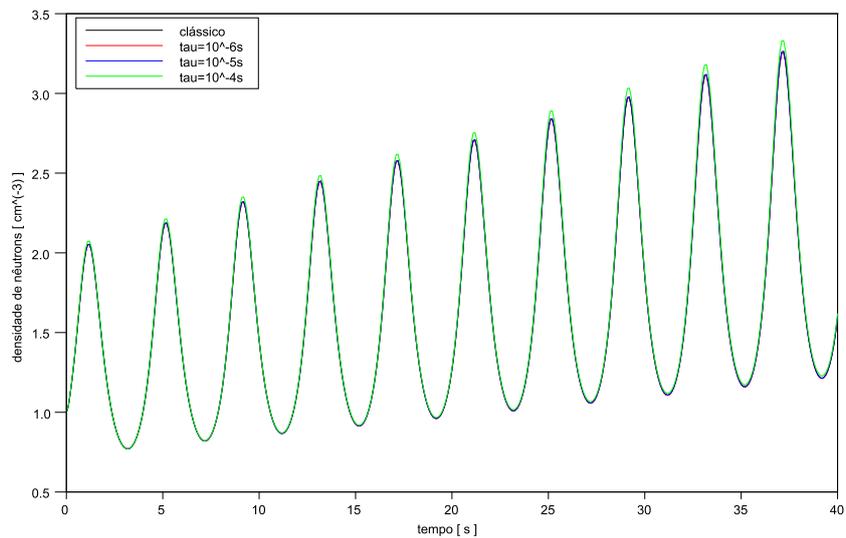


Figura 4.27 – Densidade de nêutrons para  $\rho(t) = A \operatorname{sen}(ft)$ ,  $k = 0,96$  e diferentes valores de  $\tau$ , com  $A = 0,003$  e  $f = \pi/2 \text{ s}^{-1}$ .

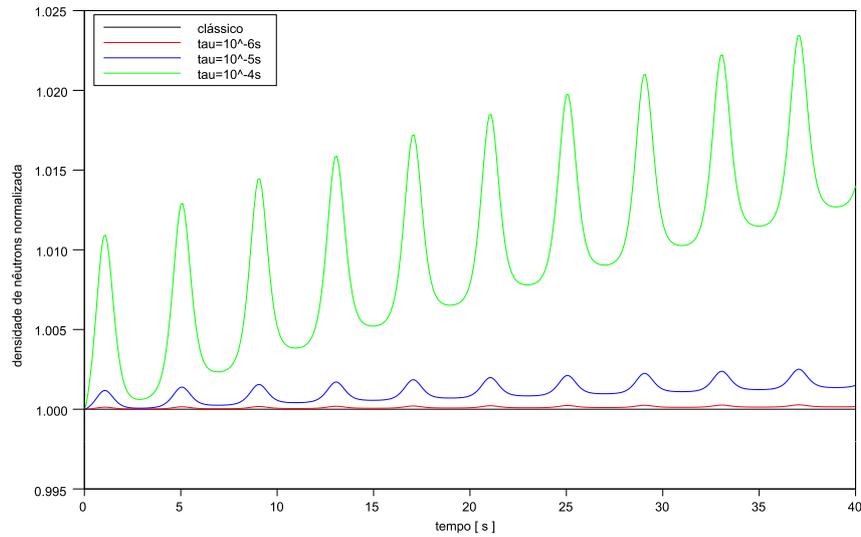


Figura 4.28 – Densidade de nêutrons normalizada para  $\rho(t) = A \operatorname{sen}(ft)$ ,  $k = 0,96$  e diferentes valores de  $\tau$ , com  $A = 0,003$  e  $f = \pi/2s^{-1}$ .

Estes gráficos representados desde a figura 4.17 até a figura 4.28 mostram que o modelo fracionário não influencia significativamente no resultado para a densidade de nêutrons oscilatória, em contrapartida dos casos de reatividade constante e rampa citados nas seções anteriores. Com um valor máximo de 2,5% de diferença entre os resultados dos modelos fracionários e clássico, os gráficos anteriores mostram que mesmo para casos de baixa frequência ou alta frequência o modelo fracionário não altera tanto o resultado em comparação com o clássico. Nas próximas páginas constam tabelas com valores numéricos para a densidade de nêutrons considerando os três casos:  $f = 2\pi s^{-1}$ ,  $f = \pi s^{-1}$  e  $f = \pi/2s^{-1}$  considerando variações em um dos parâmetros fracionários em cada tabela. Nestas tabelas os valores das densidades de nêutrons são averiguados para um mesmo número de oscilações, ou seja, um mesmo valor de  $P = \frac{ft}{2\pi}$ , em que  $P$  denota o número de ciclos no tempo da função senoidal da reatividade, ou seja,  $t = \frac{2\pi P}{f}$ .

Tabela 4.6 – Valores da densidade de nêutrons ( $n(t)$ ) para reatividade senoidal ( $\rho(t) = A \sin(ft)$ ) e  $\tau = 10^{-4} s$  para diferentes  $k$  [ $cm^{-3}$ ], com  $A = 0,003$ .

$f$ [ $s^{-1}$ ]	$k$	$P = 1$	$P = 5$	$P = 10$
$2\pi$	1	0,9032765	0,9646923	1,0315063
	0,99	0,9032719	0,9648265	1,0317950
	0,98	0,9032674	0,9649772	1,0321183
	0,97	0,9032631	0,9651463	1,0324805
	0,96	0,9032590	0,9653363	1,0328866
	clássico	0,9033303	0,9635540	1,0290403
$\pi$	1	0,9659586	1,0933182	1,2389145
	0,99	0,9660275	1,0936833	1,2396499
	0,98	0,9661041	1,0940912	1,2404721
	0,97	0,9661896	1,0945473	1,2413919
	0,96	0,9662850	1,0950576	1,2424214
	clássico	0,9653377	1,0901665	1,2326042
$\pi/2$	1	1,0207177	1,2728152	1,6113512
	0,99	1,0208758	1,2735643	1,6130431
	0,98	1,0210520	1,2744028	1,6149389
	0,97	1,0212485	1,2753418	1,6170644
	0,96	1,0214678	1,2763939	1,6194488
	clássico	1,0193238	1,2664587	1,5971063

Tabela 4.7 – Valores da densidade de nêutrons ( $n(t)$ ) para reatividade senoidal ( $\rho(t) = A \text{sen}(ft)$ ) e  $k = 0,96$  para diferentes  $\tau$  [ $cm^{-3}$ ], com  $A = 0,003$ .

$f$ [ $s^{-1}$ ]	$\tau$ [ $s$ ]	$P = 1$	$P = 5$	$P = 10$
$2\pi$	0	0,9033303	0,9635540	1,0290403
	$10^{-6}$	0,9033294	0,9635750	1,0290856
	$10^{-5}$	0,9033220	0,9637456	1,0294540
	$10^{-4}$	0,9032590	0,9653363	1,0328866
$\pi$	0	0,9653377	1,0901665	1,2326042
	$10^{-6}$	0,9653489	1,0902241	1,2327196
	$10^{-5}$	0,9654397	1,0906930	1,2336593
	$10^{-4}$	0,9662850	1,0950576	1,2424214
$\pi/2$	0	1,0193238	1,2664587	1,5971063
	$10^{-6}$	1,0193491	1,2665757	1,5973685
	$10^{-5}$	1,0195551	1,2675280	1,5995034
	$10^{-4}$	1,0214678	1,2763939	1,6194488

Concluindo, com este caso de reatividade senoidal, considerando os diferentes valores de  $f$ , os parâmetros fracionários puderam ser averiguados sem dúvida. Sua influência neste tipo de situação é bem definida e bem “comportada”. Quanto ao tempo de relaxação, para  $\tau = 10^{-5}s$ , a densidade de nêutrons normalizada não ultrapassa 1,004, enquanto que para  $\tau = 10^{-4}s$  este valor sobe para mais de 1,02, conforme está representado na figura 4.28, por exemplo. Além disso a ordem da derivada fracionária modifica o resultado praticamente da mesma forma para praticamente qualquer ordem de derivada fracionária (inclusive  $k = 1$ ), conforme consta nas figuras 4.18, 4.22 e 4.26. Apesar disto, a influência da modelagem fracionária neste caso é muito pequena se comparada aos casos anteriores de reatividade constante e rampa. Isto provavelmente acontece devido ao fato da derivada fracionária de uma função trigonométrica ser também uma função trigonométrica (assim como derivadas de ordem inteiras), o que mantém o caráter oscilatório da função, alterando muito pouco o

resultado final. Para  $f = \pi/2s^{-1}$  a diferença entre resultados é maior, porém isto também já é esperado uma vez que no último caso foi considerado um maior desenvolvimento do tempo, o que favorece alterações no resultado devido ao caráter de memória das derivadas fracionárias.

#### 4.4 Fonte Externa

Para simular a partida de um reator nuclear utilizando a modelagem fracionária são utilizadas fontes externas constantes e exponenciais nesta seção, utilizando uma reatividade praticamente nula para simular a situação de reator desligado estável. Nesta seção é utilizada a reatividade de  $\rho(t) = 10^{-6}$  e fontes externas do tipo  $S_{ext}(t) = \exp(-dt)cm^{-3}s^{-1}$ , em que  $d$  pode assumir os valores  $d = 1/30s^{-1}$ ,  $d = 1/10s^{-1}$  e  $d = 0s^{-1}$ , em que este último torna o termo fonte constante e igual à unidade. Como mencionado anteriormente, a condição inicial para a densidade de nêutrons nesta seção é  $n(t = 0) = 0cm^{-3}$ , porém aqui ela é aproximada por  $n(t = 0) = 10^{-7}cm^{-3}$  para fins de cálculo do valor da densidade de nêutrons normalizada. A seguir, as figuras 4.29, 4.30, 4.31 e 4.32 mostram o comportamento da densidade de nêutrons normal e normalizada para diversos modelos fracionários com diferentes  $k$  e  $\tau$ , para  $d = 1/30s^{-1}$ , entre os instantes de tempo  $0s$  e  $120s$ .

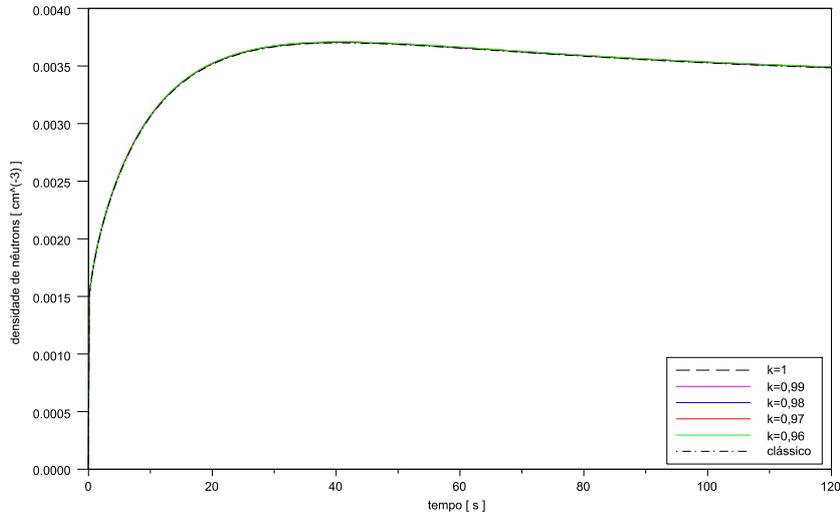


Figura 4.29 – Densidade de nêutrons para  $\rho(t) = 10^{-6}$ ,  $S_{ext}(t) = \exp(-dt)\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}$ ,  $\tau = 10^{-4}\text{s}$  e diferentes valores de  $k$ , com  $d = 1/30\text{s}^{-1}$ .

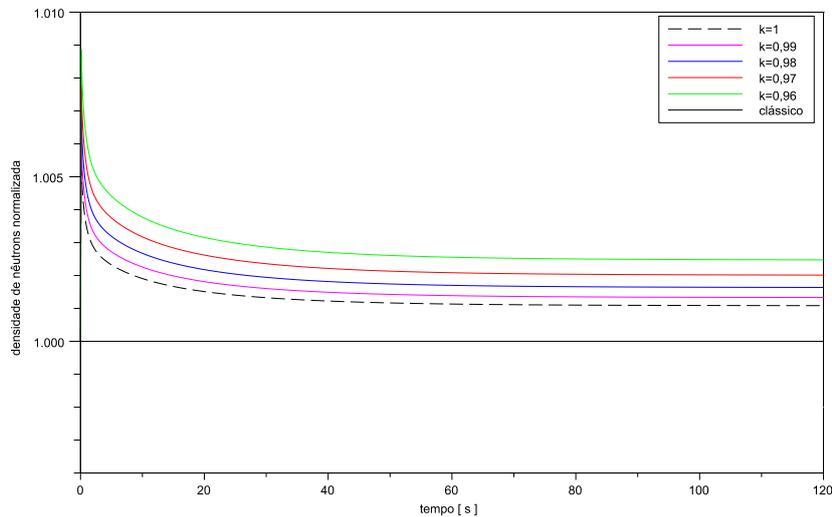


Figura 4.30 – Densidade de nêutrons normalizada para  $\rho(t) = 10^{-6}$ ,  $S_{ext}(t) = \exp(-dt)\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}$ ,  $\tau = 10^{-4}\text{s}$  e diferentes valores de  $k$ , com  $d = 1/30\text{s}^{-1}$ .

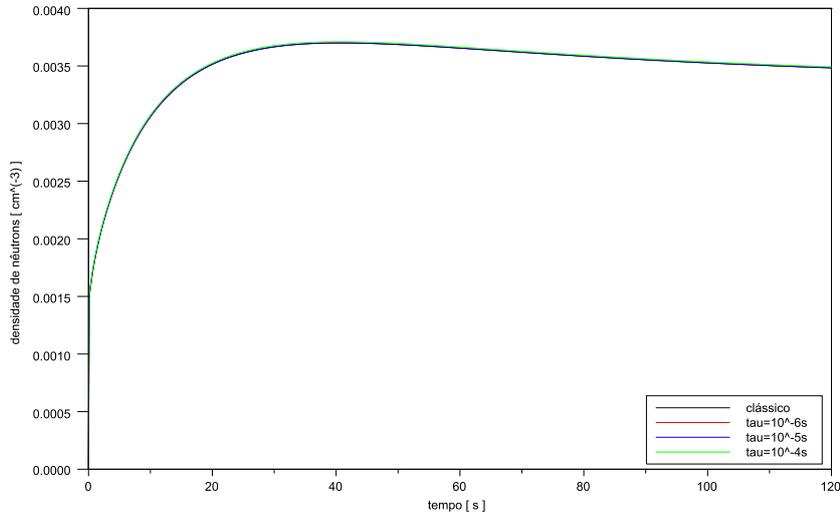


Figura 4.31 – Densidade de nêutrons para  $\rho(t) = 10^{-6}$ ,  $S_{ext}(t) = \exp(-dt) \text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$ ,  $k = 0,96$  e diferentes valores de  $\tau$ , com  $d = 1/30 \text{s}^{-1}$ .

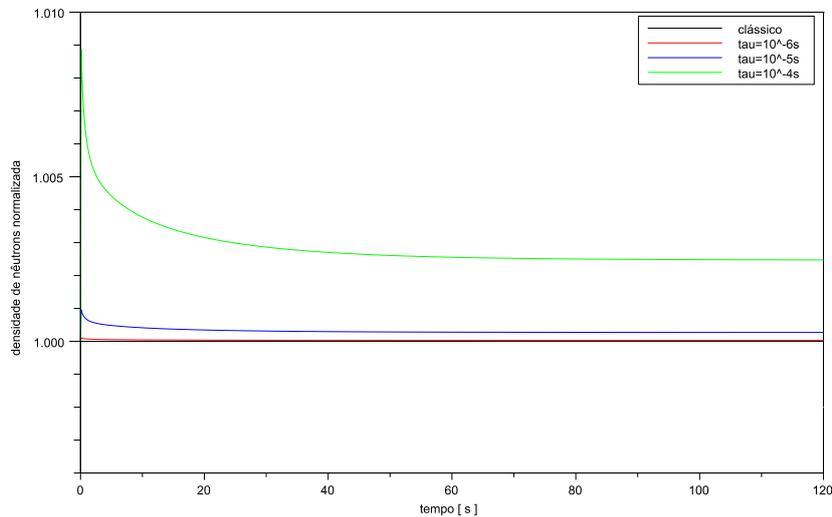


Figura 4.32 – Densidade de nêutrons normalizada para  $\rho(t) = 10^{-6}$ ,  $S_{ext}(t) = \exp(-dt) \text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$ ,  $k = 0,96$  e diferentes valores de  $\tau$ , com  $d = 1/30 \text{s}^{-1}$ .

Estes gráficos mostrados anteriormente mostram que, para este caso de fonte externa, não há influência significativa da modelagem fracionária no resultado. De forma geral, com diferenças relativas menores que 1%, os resultados utilizando modelagem fracionária são semelhantes aos encontrados utilizando a modelagem clássica fickiana. Nas figuras 4.33, 4.34, 4.35 e 4.36 constam gráficos da densidade de nêutrons normalizada e em seu valor absoluto para diferentes combinações de  $k$  e  $\tau$ , considerando a fonte externa e a reatividade nula, em que  $d = 1/10s^{-1}$ .

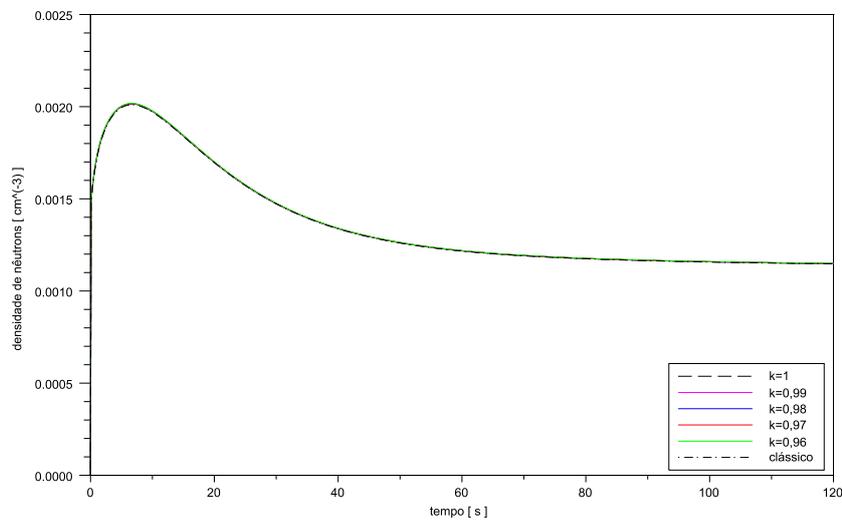


Figura 4.33 – Densidade de nêutrons para  $\rho(t) = 10^{-6}$ ,  $S_{ext}(t) = \exp(-dt)cm^{-3}s^{-1}$ ,  $\tau = 10^{-4}s$  e diferentes valores de  $k$ , com  $d = 1/10s^{-1}$ .

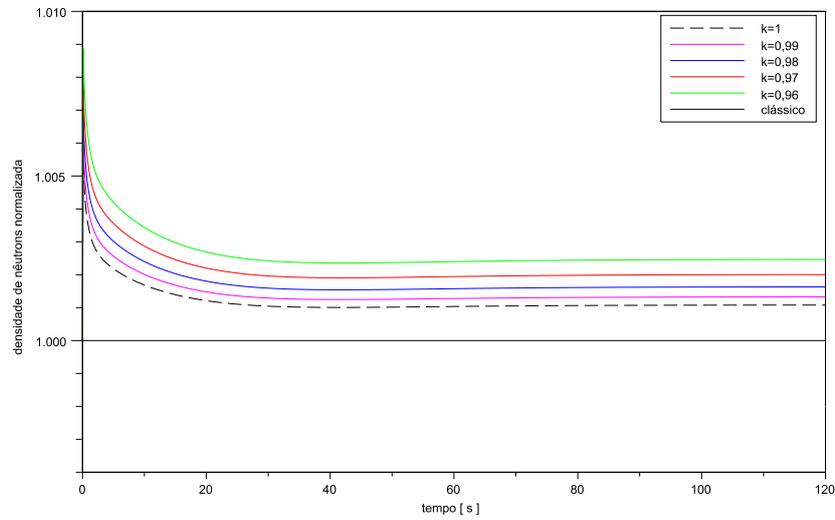


Figura 4.34 – Densidade de nêutrons normalizada para  $\rho(t) = 10^{-6}$ ,  $S_{ext}(t) = \exp(-dt)cm^{-3}s^{-1}$ ,  $\tau = 10^{-4}s$  e diferentes valores de  $k$ , com  $d = 1/10s^{-1}$ .

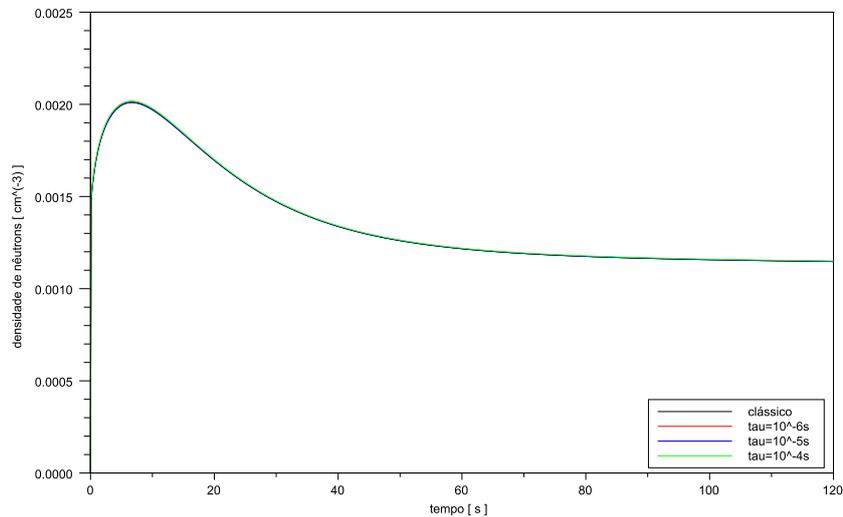


Figura 4.35 – Densidade de nêutrons para  $\rho(t) = 10^{-6}$ ,  $S_{ext}(t) = \exp(-dt)cm^{-3}s^{-1}$ ,  $k = 0,96$  e diferentes valores de  $\tau$ , com  $d = 1/10s^{-1}$ .

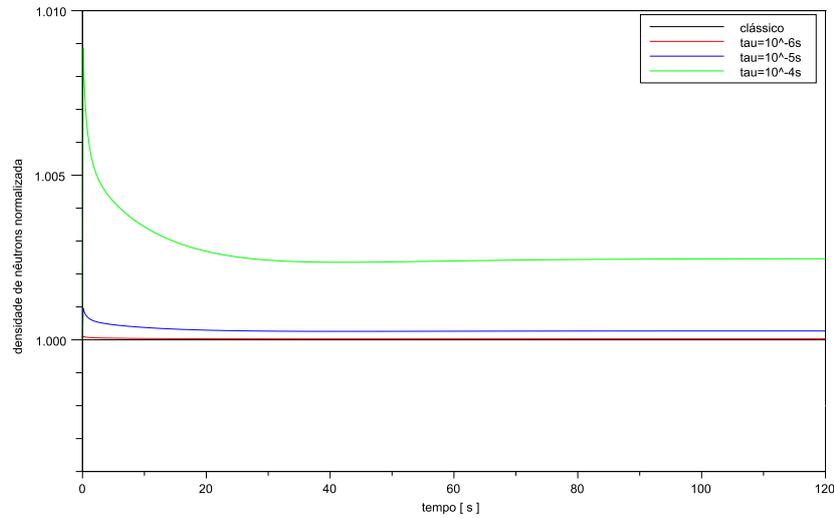


Figura 4.36 – Densidade de nêutrons normalizada para  $\rho(t) = 10^{-6}$ ,  $S_{ext}(t) = \exp(-dt)cm^{-3}s^{-1}$ ,  $k = 0,96$  e diferentes valores de  $\tau$ , com  $d = 1/10s^{-1}$ .

Os gráficos acima mostram que nem para um amortecimento mais suave da função fonte externa o resultado com modelagem fracionária é alterado para quaisquer combinações de  $k$  e  $\tau$ . Na verdade os resultados normalizados são aproximadamente os mesmos, como pode ser observado em 4.30, 4.32, 4.34 e 4.36. A seguir, as figuras 4.37 e 4.39 mostram o comportamento da densidade de nêutrons através do tempo considerando o caso de fonte externa em que  $d = 0s^{-1}$  para diferentes valores de  $k$  e  $\tau$ . Este caso denota a situação em que  $S_{ext}(t) = 1cm^{-3}s^{-1}$ . Também é mostrado o comportamento da normalização da densidade de nêutrons através do tempo nas figuras 4.38 e 4.40.

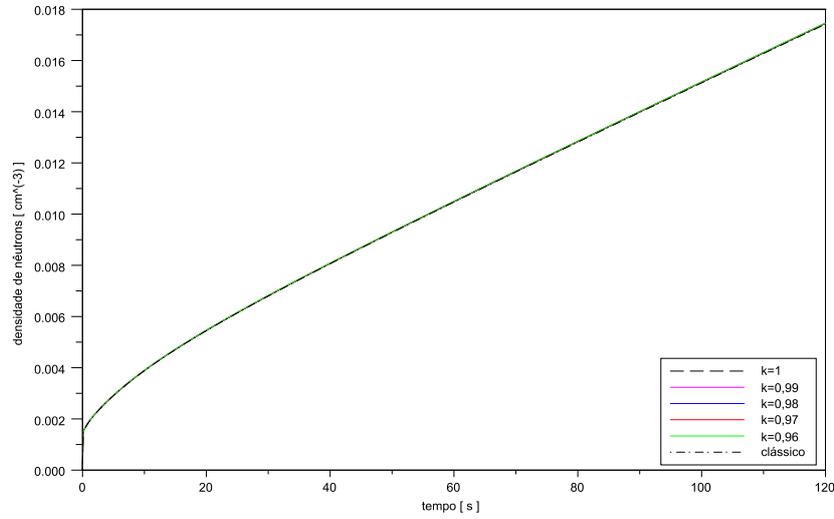


Figura 4.37 – Densidade de nêutrons para  $\rho(t) = 10^{-6}$ ,  $S_{ext}(t) = \exp(-dt)cm^{-3}s^{-1}$ ,  $\tau = 10^{-4}s$  e diferentes valores de  $k$ , com  $d = 0s^{-1}$ .

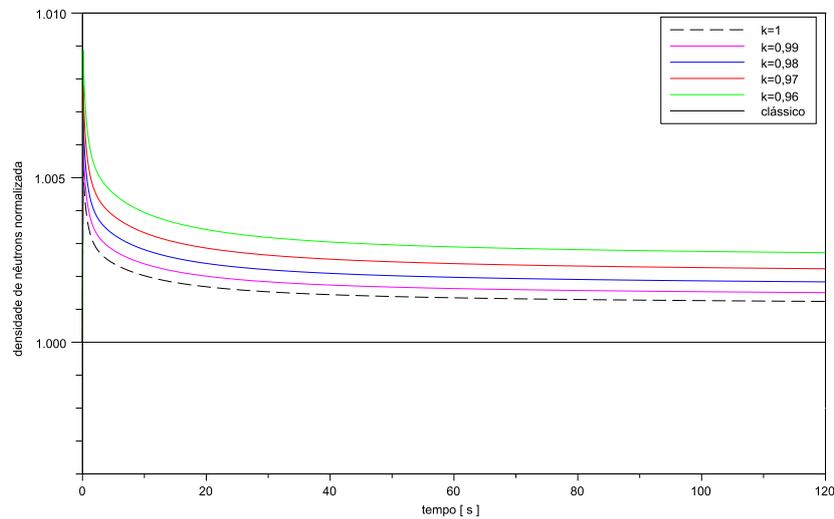


Figura 4.38 – Densidade de nêutrons normalizada para  $\rho(t) = 10^{-6}$ ,  $S_{ext}(t) = \exp(-dt)cm^{-3}s^{-1}$ ,  $\tau = 10^{-4}s$  e diferentes valores de  $k$ , com  $d = 0s^{-1}$ .

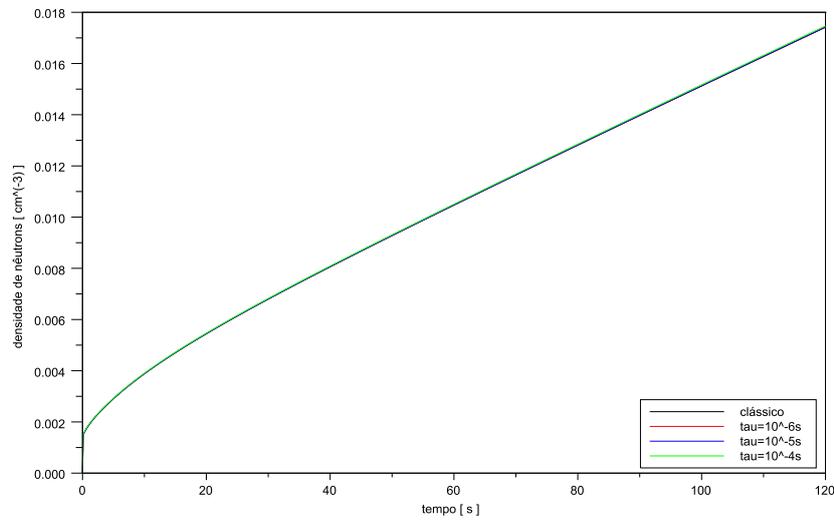


Figura 4.39 – Densidade de nêutrons para  $\rho(t) = 10^{-6}$ ,  $S_{ext}(t) = \exp(-dt)\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}$ ,  $k = 0,96$  e diferentes valores de  $\tau$ , com  $d = 0\text{s}^{-1}$ .

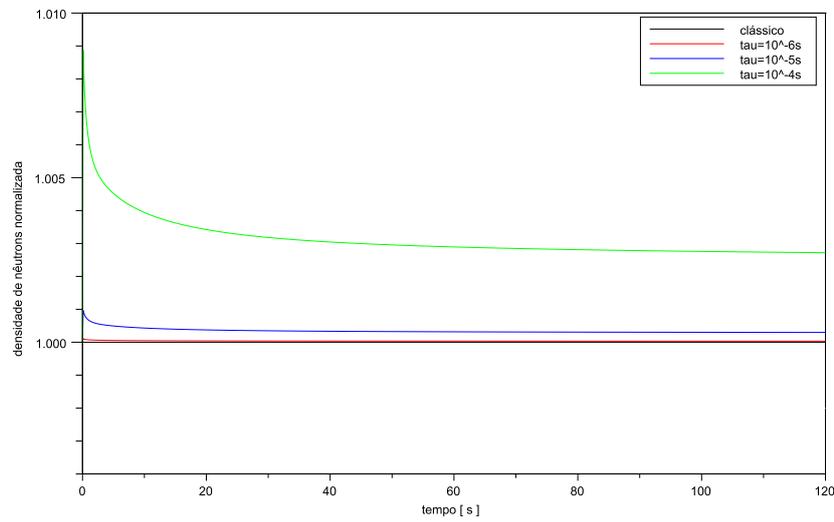


Figura 4.40 – Densidade de nêutrons normalizada para  $\rho(t) = 10^{-6}$ ,  $S_{ext}(t) = \exp(-dt)\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}$ ,  $k = 0,96$  e diferentes valores de  $\tau$ , com  $d = 0\text{s}^{-1}$ .

Estes gráficos mostram claramente que para uma função fonte amortecida de forma exponencial, como são os casos mostrados, o comportamento da modelagem fracionária em relação aos casos de modelagem clássica não muda para qualquer tipo de fonte externa, mesmo para uma grande evolução no tempo (120s). Isto acontece devido ao fato da fonte externa ser um termo a mais na equação de cinética pontual de nêutrons, ao contrário de alterações na reatividade, que é coeficiente da densidade de nêutrons. Através do método da decomposição aqui aplicado fica claro que a solução para casos de fonte externa com modelagem fracionária sofre muito pouca alteração em relação a resultados do modelo clássico, pois a modificação proposta tem sua influência logo na primeira recursão da decomposição, em que a solução particular para a fonte externa é calculada através da sua convolução com a matriz de coeficientes de  $n(t)$ , e em nenhum outro termo da decomposição a fonte externa é considerada. Por causa disto, estima-se que os mesmos motivos que a modelagem fracionária tem para se comportar do jeito que se comporta para fonte externa amortecida de forma exponencial estão presentes também em qualquer caso de fonte externa. Em seguida, tabelas mostram os valores da densidade de nêutrons para diversos instantes de tempo para as condições de parâmetros fracionários relevados nesta sessão.

Tabela 4.8 – Valores da densidade de nêutrons ( $n(t)$ ) para fonte externa ( $S_{ext}(t) = \exp(-dt)cm^{-3}s^{-1}$ ) e  $\tau = 10^{-4}s$  para diferentes  $k [cm^{-3}]$ .

$d [s^{-1}]$	$k$	$t = 1s$	$t = 60s$	$t = 120s$
1/30	1	0,0018209	0,0036512	0,0034751
	0,99	0,0018219	0,0036522	0,0034759
	0,98	0,0018229	0,0036533	0,0034770
	0,97	0,0018242	0,0036547	0,0034783
	0,96	0,0018257	0,0036563	0,0034798
	clássico	0,0018146	0,0036471	0,0034713
1/10	1	0,0017204	0,0012145	0,0011436
	0,99	0,0017212	0,0012148	0,0011439
	0,98	0,0017222	0,0012152	0,0011442
	0,97	0,0017234	0,0012156	0,0011447
	0,96	0,0017248	0,0012161	0,0011452
	clássico	0,0017145	0,0012133	0,0011424
0	1	0,0018735	0,0104698	0,0173995
	0,99	0,0018745	0,0104728	0,0174041
	0,98	0,0018756	0,0104763	0,0174097
	0,97	0,0018769	0,0104806	0,0174165
	0,96	0,0018785	0,0104857	0,0174248
	clássico	0,0018671	0,0104558	0,0173780

Tabela 4.9 – Valores da densidade de nêutrons ( $n(t)$ ) para fonte externa ( $S_{ext}(t) = \exp(-dt)cm^{-3}s^{-1}$ ) e  $k = 0,96$  para diferentes  $\tau [cm^{-3}]$ .

$d [s^{-1}]$	$\tau [s]$	$t = 1s$	$t = 60s$	$t = 120s$
1/30	0	0,0018146	0,0036471	0,0034713
	$10^{-6}$	0,0018148	0,0036472	0,0034714
	$10^{-5}$	0,0018158	0,0036481	0,0034723
	$10^{-4}$	0,0018257	0,0036563	0,0034798
1/10	0	0,0017145	0,0012133	0,0011424
	$10^{-6}$	0,0017146	0,0012133	0,0011424
	$10^{-5}$	0,0017156	0,0012136	0,0011427
	$10^{-4}$	0,0017248	0,0012161	0,0011452
0	0	0,0018671	0,0104558	0,0173780
	$10^{-6}$	0,0018672	0,0104561	0,0173786
	$10^{-5}$	0,0018683	0,0104561	0,0173831
	$10^{-4}$	0,0018785	0,0104857	0,0174248

Estes dados mostram com clareza que a modelagem fracionária influencia muito pouco no resultado em casos de partida do reator nuclear. Ainda por cima, é constatado que a maior influência no procedimento a curto prazo da partida do reator nuclear é no começo, quando a fonte de nêutrons assume seu maior valor e, novamente, causa uma tendência brusca de mudança na densidade de nêutrons, provocando a diferença acentuada entre os resultados dos modelos fracionário e clássico.

De acordo com os resultados obtidos ao observar os casos-teste deste capítulo, a influência da modelagem fracionária ocorre com maior magnitude quando a tendência de mudança da densidade de nêutrons é grande. É percebido que, para os casos aqui estudados, os termos fracionários adicionados à equação de cinética pontual de nêutrons têm um destaque maior ao interpretar os efeitos de transientes curtos, como as mudanças bruscas na reatividade descritos nos casos de reatividade constante e rampa. Além disso, o

tempo de relaxação tem sua maior contribuição no resultado no sentido de “amplitude”, servindo como um multiplicador dos efeitos de captura de transientes curtos; já a ordem da derivada fracionária, como visto claramente no caso de reatividade senoidal, serve como um amplificador de efeitos oscilatórios. Também é possível perceber que o tempo de relaxação  $\tau$  provoca as maiores mudanças, o que constata que este deve ser o parâmetro fracionário que deve ser avaliado com a maior precisão. A ordem de derivada fracionária próxima da unidade gera resultados próximos do modelo de onda de nêutrons, visto no segundo capítulo. Os resultados gerados com este modelo de onda também diferem bastante do resultado fickiano clássico, o que também reforça a implementação de uma modelagem fracionária: “qual seriam os melhores valores de  $k$  e  $\tau$  para que o modelo fracionário satisfizesse tanto os resultados obtidos pelo modelo clássico de Fick quanto pelo modelo hiperbólico de onda?”. Finalmente, através deste estudo, é possível dizer que uma combinação apropriada do tempo de relaxação e da ordem da derivada fracionária podem ser implementados em problemas nos cálculos de cinética de reatores nucleares que utilizam a metodologia descrita neste trabalho ou semelhante.

## 5 CONCLUSÃO

De acordo com a dedução das equações de cinética pontual, as equações fracionárias para a cinética pontual de nêutrons são uma generalização das equações clássicas. É demonstrado neste trabalho que se  $\tau = 0$ , a equação de cinética pontual baseada na lei de Fick são recuperadas, enquanto se  $\tau = 3D/v$  e  $k = 1$  a equação “de onda” de nêutrons baseada no modelo difusivo de Cattaneo é encontrado. Além disso, o método da decomposição fornece uma solução analítica para o problema encontrada de forma recursiva, utilizando uma metodologia conhecida de solução para o caso clássico. Além disso, as definições dos parâmetros cinéticos foram mantidas em suas deduções, a fim de evitar o cálculo do fluxo adjunto. Os resultados demonstram que, quando há um transiente curto na densidade, como nos casos de reatividades constante ou rampa (em que a reatividade muda bruscamente seu comportamento), pode haver uma maior diferença entre os resultados clássico e fracionário. Este resultado geral mostra o que já era conhecido, que o modelo clássico funciona bem quando não há transientes curtos que afetam a população de nêutrons em reatores nucleares. Para ilustrar o começo da pesquisa de cinética fracionária de nêutrons, é citado [Schramm et al., 2012], apresentado no XII Congresso De Métodos Integrais em Ciência e Engenharia (IMSE2012).

Observando as soluções dos problemas estudados para diferentes funções de reatividade e fonte externa, é possível imaginar que as soluções estão localizadas entre as encontradas pelo modelo clássico e os resultados da teoria de transporte de nêutrons, com a devida “calibração” dos parâmetros nucleares, [Espinosa-Paredes et al., 2008]. Afora a boa comparação dos resultados obtidos, os argumentos físicos para justificar o uso da derivada fracionária para a solução da equação cinética são os que seguem: fenômenos em meios multiplicativos decorrentes da fissão nuclear possuem analogia com leis de escala e dimensões fractais, o que reforça o uso de um operador fracionário na construção do modelo matemático. Pela definição de derivada fracionária torna-se evidente que a ordem da derivada fracionária está relacionada a uma escala diferencial com o “volume efetivo” que não necessariamente coincide com um número inteiro.

Devido a raridade na literatura, a metodologia proposta apresenta as seguintes questões abertas. Em primeiro, ressalta-se o estabelecimento de critérios para a determinação da ordem da derivada fracionária, que neste trabalho foi analisada via tentativa e comparação. Também deve-se mencionar o desenvolvimento da lei de Fick generalizada com derivada fracionária para o modelo de difusão anômala. De fato, na difusão clássica, onde a hipótese de Fick é utilizada, várias restrições são feitas no coeficiente de difusão, onde a razão da  $x$ -ésima derivada da densidade de corrente pela  $x + 1$ -ésima derivada do fluxo escalar se mantém constante independente de  $x$ . Não é totalmente plausível o porquê de um processo difusivo em meio multiplicativo deva seguir tal restrição. Investigações neste aspecto serão enfocados em um trabalho futuro.

Outra questão que não foi respondida foi a discussão da existência e forma específica do fluxo adjunto. No presente estágio do trabalho, permanece em aberto se o fluxo adjunto coincide com a expressão clássica. Todavia, das diferenças encontradas entre as soluções clássicas e as fracionárias pode-se questionar se o fluxo adjunto clássico representa pelo menos uma primeira aproximação do fluxo adjunto fracionário, especialmente devido ao fato da dependência das funções forma serem fracas. Implementação teórica neste sentido estão em progresso.

## I Cálculo Fracionário

O cálculo fracionário vêm ganhando espaço no ramo da modelagem desde 1970, porém várias dúvidas surgem a existência, sobre o que seria e quais são as aplicações do cálculo fracionário. Neste anexo são ditos alguns breves tópicos sobre o cálculo fracionário. Inicialmente será mostrada uma breve introdução sobre o assunto, com algum apanhado histórico desde a data de surgimento, contribuições de matemáticos e importância nos dias de hoje. Em seguir, são mostradas, para fim de ilustração, a demonstração das definições de integral fracionária de Riemann-Liouville, assim como as definições de derivada fracionária de Riemann-Liouville, Caputo e Grünwald-Letnikov. Por último, é mostrado um apanhado de argumentos de modelagens utilizando cálculo fracionário, com exemplos e com a resposta para a frequente pergunta “qual seria o sentido físico de um operador fracionário?”.

### I.1 História e Demais Informações

A rigor, o cálculo fracionário deveria ser chamado “cálculo de ordem arbitrária”, uma vez que esta área de estudo engloba operadores diferenciais e integrais com valores inteiros, racionais, reais e até imaginários e complexos. A intenção da construção do cálculo fracionário é generalizar o cálculo convencional, ou seja, suas definições devem englobar as definições clássicas do cálculo convencional. Em outras palavras, o cálculo convencional é um caso particular do cálculo fracionário.

Conforme citado no corpo do texto do trabalho, o cálculo fracionário é quase tão antigo quanto o cálculo diferencial e integral clássico, porém devido a falta de modelos com sua aplicação e inconsistência (de certa forma, até discordância) entre as definições de operador fracionário, este cálculo não teve destaque até meados de 1970. A primeira citação que se sabe sobre o cálculo fracionário ocorreu em 1665 em uma carta de l’Hopital a Leibniz. Na suposta carta, l’Hopital pergunta qual seria o significado de  $\frac{d^n y}{dx^n}$  quando  $n = 1/2$ . A resposta de Leibniz continha a seguinte frase: este é um aparente paradoxo do qual um dia importantes aplicações serão obtidas.

Durante os anos, diversos pesquisadores desenvolveram conceitos que, apesar de aparentemente triviais, auxiliaram na construção do cálculo fracionário. Dentre eles, Lagrange, Lacroix, Fourier, Abel, Liouville e Riemann se destacam.

Lagrange teve sua contribuição no desenvolvimento do cálculo fracionário quando desenvolveu, em 1772, a lei dos expoentes, que implicava que:

$$\frac{d^m}{dx^m} \frac{d^n}{dx^n} y = \frac{d^{m+n}}{dx^{m+n}} y .$$

A lei dos expoentes tem sua importância principalmente na definição da derivada fracionária que, segundo a definição de Riemann-Liouville, seria a derivada inteira de uma integral fracionária.

Em 1819, Lacroix publicou um livro em que citava de forma sucinta como seria uma derivada fracionária de um polinômio. Partindo dos conhecidos resultados de derivadas inteiras de uma função  $f(x) = x^m$ ,  $m > 0$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} x^m &= mx^{m-1} \\ \frac{d^2}{dx^2} x^m &= m(m-1)x^{m-2} \\ &\vdots \\ \frac{d^r}{dx^r} x^m &= \frac{m!}{(m-r)!} x^{m-r}, \quad m > r, r \in \mathbb{N}, \end{aligned}$$

com o uso da função gama, expandiu o resultado para derivadas de ordem arbitrária:

$$\frac{d^\alpha}{dx^\alpha} x^m = \frac{\Gamma(m+1)}{\Gamma(m-\alpha+1)} x^{m-\alpha}, \quad m > \alpha, \alpha \in \mathbb{C}_+ .$$

Fourier, em 1822, utilizando sua representação integral de funções

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(\hat{x}) \int_{-\infty}^{\infty} \cos(p(x-\hat{x})) dp d\hat{x} ,$$

conhecendo as derivadas inteiras das funções trigonométricas

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \cos(\alpha(x - x_0)) &= -\alpha \sin(\alpha(x - x_0)) = \alpha \cos\left(\alpha(x - x_0) + \frac{\pi}{2}\right) \\ \frac{d^2}{dx^2} \cos(\alpha(x - x_0)) &= -\alpha^2 \cos(\alpha(x - x_0)) = \alpha^2 \cos\left(\alpha(x - x_0) + 2\frac{\pi}{2}\right) \\ &\vdots \\ \frac{d^n}{dx^n} \cos(\alpha(x - x_0)) &= \alpha^n \cos\left(\alpha(x - x_0) + n\frac{\pi}{2}\right), \quad n \in \mathbb{Z} \end{aligned}$$

e estendendo para as derivadas de ordem arbitrária

$$\frac{d^\gamma}{dx^\gamma} \cos(\alpha(x - x_0)) = \alpha^\gamma \cos\left(\alpha(x - x_0) + \gamma\frac{\pi}{2}\right), \quad \gamma \in \mathbb{C},$$

encontrou que

$$\frac{d^\gamma}{dx^\gamma} f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(\hat{x}) \int_{-\infty}^{\infty} p^\gamma \cos\left(p(x - \hat{x}) + \gamma\frac{\pi}{2}\right) dp d\hat{x}.$$

Liouville, em 1832, inspirado pelos trabalhos de Fourier e Abel (citado a seguir), foi o primeiro grande autor do estudo do cálculo fracionário. Liouville considerou funções exponenciais para sua primeira expressão para derivadas fracionárias, partindo das relações conhecidas de derivadas de exponenciais

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \exp(ax) &= a \exp(ax) \\ \frac{d^2}{dx^2} \exp(ax) &= a^2 \exp(ax) \\ &\vdots \\ \frac{d^n}{dx^n} \exp(ax) &= a^n \exp(ax) \quad n \in \mathbb{N}, \end{aligned}$$

Liouville estendeu esta expressão para derivadas fracionárias:

$$\frac{d^\alpha}{dx^\alpha} \exp(ax) = a^\alpha \exp(ax) \quad \alpha \in \mathbb{C}_+.$$

A partir desta relação, Liouville descreveu a primeira fórmula para a derivada fracionária:

$$\frac{d^\alpha}{dx^\alpha} f(x) = \sum_{q=0}^{\infty} c_q a_q^\alpha \exp(a_q x).$$

Riemann teve uma grande participação no desenvolvimento do cálculo fracionário,

ao ter seu trabalho publicado em 1892 (posterior à sua morte) em que dizia ter encontrado a fórmula para a integral fracionária:

$$\frac{d^{-\alpha}}{dx^{-\alpha}} f(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_c^x \frac{f(\hat{x})}{(x - \hat{x})^{1-\alpha}} d\hat{x} + \Psi(x) \quad \alpha \in \mathbb{C}_+,$$

em que  $c$  é uma constante arbitrária e  $\Psi(x)$  é uma função complementar. O operador de derivada com expoente negativo descrito acima denota a integral.

Apesar deste progresso no cálculo fracionário e as fórmulas anteriores englobarem uma série de funções, estes estudos estão longe de serem definidos como definição de derivada fracionária. A seguir será mostrada a dedução da chamada integral fracionária, a partir da qual a maioria das definições de derivada fracionária são descritas.

## I.2 Operadores Fracionários

Para iniciar o conceito de operadores fracionários, é considerada uma analogia com operações com expoentes. É de conhecimento geral que

$$\begin{aligned} X^2 &= X \times X \\ X^3 &= X \times X \times X = X \times X^2 \\ &\vdots \\ X^N &= X \times X \times X \cdots X \quad (N \text{ vezes}) . \end{aligned}$$

Se, por analogia, tentar descrever  $\sqrt{X} = X^{1/2}$  da mesma forma, o resultado será frustrado. Porém, ao tentar seguir uma lógica inversa o seguinte resultado é encontrado:

$$\begin{aligned} X^{1/2} = Y &\Leftrightarrow Y^2 = X \\ Y \times Y &= X . \end{aligned}$$

Desta forma,  $X^{1/2}$  se é descrito como “o número o qual elevado à 2ª potência é igual a  $X$ ”. O mesmo pode ser feito para demais potências não inteiras de  $X$ , o que torna todas as potências racionais de  $X$  conhecidas de acordo com esta dedução lógica. Sem o rigor de tentar realizar a dedução para potências irracionais e complexas, para a derivada fracionária uma lógica de construção semelhante pode ser aplicada segundo a lei dos expoentes, sem

perda de generalidade. É sabido que:

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dx^2}f(x) &= \frac{d}{dx} \frac{d}{dx} f(x) \\ \frac{d^3}{dx^3}f(x) &= \frac{d}{dx} \frac{d}{dx} \frac{d}{dx} f(x) = \frac{d}{dx} \frac{d^2}{dx^2} f(x) \\ &\vdots \\ \frac{d^N}{dx^N}f(x) &= \frac{d}{dx} \frac{d}{dx} \dots \frac{d}{dx} f(x) \quad (N \text{ vezes}),\end{aligned}$$

e, por analogia, tentar encontrar o que seria  $\frac{d^{1/2}}{dx^{1/2}}f(x)$  resulta em:

$$\frac{d^{1/2}}{dx^{1/2}}f(x) = \mathbb{A}f(x) \Leftrightarrow \mathbb{A}^2 f(x) = \frac{d}{dx} f(x),$$

em que  $\mathbb{A}$  representa o operador  $\frac{d^{1/2}}{dx^{1/2}}$ . Com esta relação é possível tentar encontrar as derivadas fracionárias de diversas funções. Apesar deste breve estudo ser incompleto e de certa forma ingênuo ele fornece uma tentativa de justificativa para as derivadas fracionárias. Neste sentido, uma derivada de ordem racional seria um operador pelo qual, ao ser aplicado em uma determinada função diversas vezes, uma derivada de ordem inteira é encontrada. Prosseguindo, para continuar este trabalho, é considerada primeira a dedução da integral fracionária.

A fim de encontrar uma expressão para a integral fracionária, a seguinte integral será considerada:

$$INT = \frac{d^{-\alpha}}{dx^{-\alpha}}f(x) = \int_c^x \int_c^{x_1} \int_c^{x_2} \dots \int_c^{x_{\alpha-1}} f(\hat{x})d\hat{x} dx_{\alpha-1} dx_{\alpha-2} \dots dx_1.$$

A efetuação desta integral, por sua vez, pode ser alterada segundo o teorema de Goursat, gerando uma expressão para  $\alpha = 2$ :

$$\frac{d^{-2}}{dx^{-2}}f(x) = \int_c^x \int_c^{x_1} f(x_2)dx_2 dx_1 = \int_c^x \int_{x_1}^x f(x_1)dx_2 dx_1 = \int_c^x (x - x_1)f(x_1)dx_1;$$

para  $\alpha = 3$ :

$$\begin{aligned}\frac{d^{-3}}{dx^{-3}}f(x) &= \int \frac{d^{-2}}{dx^{-2}}f(x)dx = \int_c^x \int_c^{x_1} (x_1 - x_2)f(x_2)dx_2 dx_1 \\ &= \int_c^x \int_{x_1}^x (x - x_1)f(x_1)dx_2 dx_1 = \int_c^x \frac{(x - x_1)^2}{2} f(x_1)dx_1;\end{aligned}$$

e, por analogia, para um  $\alpha$  arbitrário:

$$INT = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_c^x (x - x_1)^{\alpha-1} f(x_1) dx_1 .$$

Esta relação, quando  $\alpha \in \mathbb{C}$ , é a definição de integral fracionária de Riemann-Liouville, que é a mais aceita atualmente. Se  $c = 0$ , diz-se que é a definição de Riemann (ou igualmente Riemann-Liouville, segundo alguns autores), enquanto se  $c \rightarrow -\infty$ , esta definição também é chamada de definição de Liouville.

A partir da definição da integral fracionária de Riemann-Liouville é definida a derivada fracionária segundo Riemann-Liouville, que nada mais é do que a derivada inteira de uma integral fracionária, de acordo com a lei dos expoentes:

$$\frac{d^\alpha}{dx^\alpha} f(x) = \frac{1}{\Gamma(N - \alpha)} \frac{d^N}{dx^N} \int_c^x (x - x_1)^{N-\alpha-1} f(x_1) dx_1 \quad 0 < \alpha < N, N \in \mathbb{N}$$

Se o valor de  $c$  for  $c \rightarrow -\infty$ , esta definição é apropriada para manter o caráter transcendental ao avaliar a derivada fracionária de funções transcendentais, ou seja:

$$\frac{d^\alpha}{dx^\alpha} \exp(ax) = a^\alpha \exp(ax) ,$$

que coincide pelo resultado encontrado por Liouville e, por tabela, com o utilizado por Fourier na sua tentativa de encontrar o valor da derivada fracionária da representação em integral de Fourier de uma função. Por outro lado, para esta definição, o valor de  $c$  mais utilizado é  $c = 0$ , pois há a garantia da existência da integral fracionária, entre outras características. Esta definição é a mais recomendada para o uso de funções da forma  $f(x) = x^m$ ,  $m > -1$ . Utilizando este valor de  $c$ , chega-se a seguinte relação:

$$\frac{d^\alpha}{dx^\alpha} x^m = \frac{\Gamma(m + 1)}{\Gamma(m + 1 - \alpha)} x^{m-\alpha} .$$

Esta relação é notável, e coincide com a expressão encontrada por Lacroix. Por outro lado, funções transcendentais não seguem as regras descritas por Fourier e Liouville. Outro fato notável desta definição de derivada fracionária com  $c = 0$  é que a derivada de uma constante não é 0. Portanto, como esta escolha de  $c$  é mais apropriada para funções tipo potências de  $x$ , a forma de trabalhar com funções exponenciais é via expansão em série de Taylor. Com isso é conveniente definir agora as funções de Mittag-Leffler, que são generalizações da

expansão de funções exponenciais em série de Taylor:

$$E_{a,b}(x) = \sum_{q=0}^{\infty} \frac{x^q}{\Gamma(aq + b)} \quad \text{Re}(a) > 0, \text{Re}(b) > 0 .$$

É pertinente comentar que esta definição depende dos parâmetros  $a$  e  $b$ , escolhidos de acordo com cada situação. No caso em que  $a = 1$  e  $b = 1$ , a função de Mittag-Leffler é idêntica à expansão em série de Taylor da função exponencial, ou seja,  $E_{1,0}(x) = \exp(x)$ . A partir desta função são definidas as derivadas fracionárias das funções exponenciais:

$$\frac{d^\alpha}{dx^\alpha} \exp(ax) = \sum_{q=0}^{\infty} \frac{\frac{d^\alpha}{dx^\alpha} (ax)^q}{\Gamma(q+1)} = a^q \sum_{q=0}^{\infty} \frac{x^{q-\alpha}}{\Gamma(q+1-\alpha)} = x^{-\alpha} E_{1,1-\alpha}(ax) .$$

Principalmente devido ao fato de a derivada de uma constante não ser nula de acordo com a definição de Riemann-Liouville, em alguns trabalhos é considerada a versão de Caputo para a derivada fracionária, que é basicamente idêntica à de Riemann-Liouville, porém com a derivada inteira dentro da integral. Esta definição normalmente é utilizada com  $c = 0$ :

$$\frac{d^\alpha}{dx^\alpha} f(x) = \frac{1}{\Gamma(N-\alpha)} \int_c^x (x-x_1)^{N-\alpha-1} \frac{d^N}{dx_1^N} f(x_1) dx_1 \quad 0 < \alpha < N, N \in \mathbb{N} .$$

Atualmente esta definição é mais aplicada em problemas de balanço devido ao fato de a derivada da constante ser nula, desta forma uma contradição envolvendo geração de energia ou massa em regimes permanentes é evitada.

Por último, é descrita a definição de derivada fracionária segundo Grünwald-Letnikov, que parte diretamente da definição de derivada pelo limite:

$$\frac{d^\alpha}{dx^\alpha} f(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\sum_{q=0}^{\infty} (-1)^q \binom{\alpha}{q} f(x - qh)}{h^\alpha} .$$

Nitidamente esta definição é mais apropriada para a implementação computacional utilizando métodos numéricos discretos, como o de diferenças finitas.

### I.3 Atualizações e Aplicações

O primeiro a encontrar aplicação para o cálculo fracionário foi Abel, que solucionou o problema da tautócrona utilizando operadores fracionários. O problema da tautócrona

consiste em responder à pergunta “qual curva pela qual o tempo de descida de um corpo deixado em uma posição arbitrária sobre ela seria o mesmo?”. Na sua forma clássica, o problema da tautócrona é descrito matematicamente na seguinte equação:

$$\hat{t} = \int_0^x (x - \hat{x})^{-1/2} f(\hat{x}) d\hat{x}$$

em que  $\hat{t}$  representa o tempo de descida. Esta equação escrita em forma fracionária fica

$$\frac{d^{1/2}}{dx^{1/2}} \hat{t} = \sqrt{\pi} f(x) .$$

Por vários anos o cálculo fracionário foi praticamente deixado de lado, voltando à tona apenas em meados da década de 1970, quando vários modelos físicos progrediram para sua forma fracionária. Os operadores fracionários estão relacionados com a heterogeneidade de fenômenos e fractais, logo são aplicáveis em diversos problemas físicos. Ultimamente o cálculo fracionário vem sendo utilizado em grande escala em problemas de conservação de massa, nas equações de onda de Schrödinger e em problemas envolvendo difusão e cinética. Ainda há uma gama de pesquisadores mais interessados em aprimorar as definições de derivada fracionária, uma vez que não há uma definição definitiva.

Os problemas envolvendo alta heterogeneidade são os mais propensos à implementação fracionária em seus modelos. Apesar disto, um operador fracionário não é prontamente implementado em modelos já conhecidos. Ao invés disso, seria necessária uma análise microscópica de balanço, em que o volume de controle escolhido pode ser maleável com a finalidade de manter propriedades de sistema. Neste caso, um operador integral fracionário seria apropriado como demonstração de uma média periódica do volume de controle escolhido, e com isso a alteração da equação da equação inteira seria realizada ao aplicar o operador derivada fracionária para evitar trabalhar com a integral fracionária. Neste trabalho isto foi feito levando em conta o balanço de nêutrons no nível microscópico. Como o balanço de nêutrons no volume de controle, mesmo em regime permanente, o volume microscópico considerado poderia não ter exatamente a mesma quantidade de nêutrons, o que indica uma implementação integral no tempo que, com a função de “média”, teria uma ordem fracionária.

Outro fator importante na implementação fracionária em problemas de difusão é a

discussão da distância quadrática média, que classicamente segue a lei de escala  $r^2 \sim t$ . A problemas difusivos que utilizam a clássica lei de Fick, esta relação de escala é utilizada, mas a fim de implementação fracionária é considerada uma relação mais abrangente  $r^2 \sim t^\alpha$ , em que  $0 < \alpha < 1$  nos casos de sub-difusão ou  $1 < \alpha < 2$  no caso de superdifusão.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Aboanber, A. E. and Nahla, A. A., 2002. "Solution of the point kinetics equations in the presence of newtonian temperature feedback by padé approximations via the analytical inversion method", **Journal of Physics A: Mathematical and General**, vol. 35(45), pp. 9609–9627.

Adomian, G., 1994. "**Solving frontier problems of physics: the decomposition method**". Kluwer Academic Publishers, Aarhus C., Dinamarca.

Buzano, M. L., Corno, S. E., and Cravero, I., 1995. "A New Procedure for Integrating the Point Kinetic Equations for Fission Reactors", **Computers and Mathematics with Applications**, vol. 29(5), pp. 5–19.

Camargo, R. F., 2009. "**Cálculo Fracionário e Aplicações**", Tese de doutorado, Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica, UNICAMP.

Cattaneo, C. R., 1958. "Sur une forme de l'équation de la chaleur éliminant le paradoxe d'une propagation instantanée", **Comptes Rendus**, vol. 247(4), pp. 431–433.

Ceolin, C., 2010. "**Solução analítica da equação cinética de difusão multi-grupo de nêutrons em geometria cartesiana unidimensional pela técnica da transformada integral**", Dissertação de mestrado, Programa de pós-graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS.

Chen, W.-B., Wang, J., Qiu, W.-Y., and Ren, F.-Y., 2008. "Solutions for time-fractional diffusion equation with absorption: influence of different diffusion coefficients and external forces", **Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical**, vol. 41(4), pp. 45003–45012.

Debnath, L., 2003. "Recent applications of fractional calculus to science and engineering", **International Journal of Mathematics and Mathematical Sciences**, vol. 2003, pp. 3413–3442.

Duderstadt, J. J. and Hamilton, L. J., 1976. "**Nuclear Reactor Analysis**". John Wiley & Sons, Ann Arbor, Michigan, Estados Unidos da América.

Edwards, J. T., Ford, N., and Simpson, A. C., 2002. "The numerical solution of linear multi-term fractional differential equations", **Journal of Computational and Applied Mathematics**, vol. 148, pp. 401–418.

Espinosa-Paredes, G., Morales-Sandoval, J., Vázquez-Rodríguez, R., and Espinosa-Martínez, E.-G., 2008. "Constitutive laws for the neutron density current", **Annals of Nuclear Energy**, vol. 35, pp. 1963–1967.

Espinosa-Paredes, G., Polo-Labarríos, M., Espinosa-Martínez, E. G., and Valle-Galegos, E., 2011. "Fractional neutron point kinetics equations for nuclear reactor dynamics", **Annals of Nuclear Energy**, vol. 38, pp. 307–330.

Ganapol, B. D., 2009. "A refined way of solving reactor point kinetics equations for imposed reactivity insertions", **Nuclear Technology and Radiation Protection**, vol. 24(3), pp. 157–166.

Henry, A., 1975. "**Nuclear-Reactor Analysis**". The MIT Press, Cambridge, Estados Unidos da América.

Hilfer, R., 2000. "**Applications of Fractional Calculus in Physics**". World Scientific, Farrer Road, Singapura.

Kilbas, A. A., Srivastava, H. M., and Trujillo, J. J., 2006. "**Theory and Applications of Fractional Differential Equations**". Begell House, Amsterdam, Países Baixos.

Kinard, M. and Allen, K. E. J., 2004. "Efficient numerical solution of the point kinetics equations in nuclear reactor dynamics", **Annals of Nuclear Energy**, vol. 31, pp. 1039–1051.

Lamarsh, J. R., 1965. **"Introduction to Nuclear Reactor Theory"**. Addison-Wesley Publishing Company Inc., New York, Estados Unidos da América.

Magin, R. L., 2006. **"Fractional Calculus in Bioengineering"**. Wiley-Interscience, New York, Estados Unidos da América.

Miller, K. S. and Ross, B., 1993. **"An Introduction to the Fractional Integrals and Derivatives: Theory and Applications"**. Wiley-Interscience, New York, Estados Unidos da América.

Nahla, A. A., 2011. "Taylor's series method for solving the nonlinear point kinetics equations", **Nuclear Engineering and Design**, vol. 241, pp. 1502–1505.

Nec, Y. and Nepomnyashchy, A. A., 2007a. "Linear stability of fractional reaction diffusion systems", **Mathematical Modelling Of Natural Phenomena**, vol. 2(2), pp. 77–105.

Nec, Y. and Nepomnyashchy, A. A., 2007b. "Turing instability in sub-diffusive reaction-diffusion system", **Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical**, vol. 40(49), pp. 14687–14702.

Oldham, K. and Spanier, J., 1974. **"The Fractional Calculus"**. Academic Press, New York, Estados Unidos da America.

Palma, D. A. P., Martinez, A. S., and Gonçalves, A., 2009. "Analytical solution of point kinetics equations for linear reactivity variation during the start-up of a nuclear reactor", **Annals of Nuclear Energy**, vol. 36, pp. 1469–1471.

Pedron, I. T. and Mendes, R. S., 2005. "Difusão anômala e equações generalizadas de difusão", **Revista Brasileira de Ensino de Física**, vol. 27, pp. 251–258.

Petersen, C. Z., 2011. **"Solução Analítica das Equações da Cinética Pontual e Espacial da Teoria de Difusão de Nêutrons pelas Técnicas da GITT e Decomposição"**, Tese de doutorado, Programa de pós-graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS.

Saha Ray, S. and Patra, A., 2012. "An Explicit Finite Difference scheme for numerical solution of fractional neutron point kinetic equation", **Annals of Nuclear Energy**, vol. 41, pp. 61–66.

Schramm, M., Petersen, C. Z., Vilhena, M. T., and Bodmann, B. E. J., 2012, "**On the Fractional Neutron Point Kinetics Equations**". Integral Methods in Science and Engineering. Resumo publicado.

Sekimoto, H., 2007. "**Nuclear Reactor Theory**". COE-INES, Tokyo, Japão.

Silva Júnior, J. A., 2011. "**Cinética Pontual com Realimentação de Temperatura Considerando Um Grupo de precursores de Nêutrons Atrasados**", Dissertação de mestrado, Programa de pós-graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS.

Trenčevski, K., 2003. "New Approach to The Fractional Derivatives", **International Journal of Mathematics and Mathematical Sciences**, vol. 2003(5), pp. 315–325.

Vernotte, P., 1958. "Les paradoxes de la théorie continue del'équation de la chaleur", **Comptes Rendus**, vol. 246, pp. 3154–3155.