



ANÁLISE DE SEGURANÇA DETERMINÍSTICA E ESTOCÁSTICA EM UM
CENÁRIO DE INFILTRAÇÃO DE ÁGUA NO INTERIOR DE UM REPOSITÓRIO
PRÓXIMO À SUPERFÍCIE PARA A DEPOSIÇÃO DE REJEITOS RADIOATIVOS

Antônio Sérgio De Martin Alves

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Nuclear, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Engenharia Nuclear.

Orientador: Paulo Fernando Ferreira Frutuoso e
Melo

Rio de Janeiro
Novembro de 2014

ANÁLISE DE SEGURANÇA DETERMINÍSTICA E ESTOCÁSTICA EM UM
CENÁRIO DE INFILTRAÇÃO DE ÁGUA NO INTERIOR DE UM REPOSITÓRIO
PRÓXIMO À SUPERFÍCIE PARA A DEPOSIÇÃO DE REJEITOS RADIOATIVOS

Antônio Sérgio De Martin Alves

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ
COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE) DA
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS
REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM
CIÊNCIAS EM ENGENHARIA NUCLEAR.

Examinada por:

Prof. Paulo Fernando Ferreira Frutuoso e Melo, D.Sc.

Prof. Antônio Carlos Marques Alvim, Ph.D.

Dr. Cláudio Márcio do Nascimento Abreu Pereira, D.Sc.

Prof. Marcelo Ramos Martins, D.Sc.

Prof. Alexandre Santos Francisco, D.Sc.

Dr. Marco Antonio Bayout Alvarenga, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

NOVEMBRO DE 2014

Alves, Antônio Sérgio De Martin

Análise de segurança determinística e estocástica em um cenário de infiltração de água no interior de um repositório próximo à superfície para a deposição de rejeitos radioativos/Antônio Sérgio De Martin Alves. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2014.

XXXII, 305 p.: il.; 29,7 cm.

Orientador: Paulo Fernando Ferreira Frutuoso e Melo
Tese (Doutorado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Nuclear, 2014.

Referências Bibliográficas: p. 181-195.

1. Análise de segurança. 2. Repositório de rejeitos radioativos. 3. Infiltração de água. I. Melo, Paulo Fernando Ferreira Frutuoso e. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Nuclear. III. Título.

*Aos meus queridos Hermes (“in
memorian”), Maria Helena, Maria Cristina
e Leonardo.*

“A descoberta consiste em ver o que todos viram e em pensar no que ninguém pensou.”

Albert von Szent-Györgyi Nagyrápolt

AGRADECIMENTOS

Primeiramente a Deus por ter me dado força e entusiasmo para prosseguir nesta caminhada.

Aos meus pais Hermes (*in memoriam*) e Maria Helena, fontes inesgotáveis de amor, carinho e dedicação incondicional aos seus oito filhos.

A minha esposa Maria Cristina e ao meu filho Leonardo meus companheiros mais amados.

Aos meus irmãos, tios, primos, amigos e demais familiares que torcem de maneira desmedida pelo meu sucesso e enxergam em mim qualidades que, na maioria das vezes, eu não as possuo.

Ao Professor Paulo Fernando Ferreira Frutuoso e Melo orientador e grande incentivador para a realização deste trabalho. Sou profundamente grato por sua receptividade, amizade e ajuda constantes, que tornaram o desenvolvimento desta tese uma tarefa extremamente agradável, prazerosa e descontraída.

Ao Professor Antônio Carlos Marques Alvim por sua participação na banca examinadora e por ter ministrado de forma brilhante o curso de segurança de reatores, cujos conceitos contribuíram de maneira relevante para a elaboração desta tese.

Ao Professor Alexandre Santos Francisco por sua participação na banca examinadora e pelas discussões técnicas que foram determinantes para o desenvolvimento deste trabalho.

Ao professor Marcelo Ramos Martins por sua participação na banca examinadora e também pelas discussões técnicas e sugestões para o desenvolvimento desta tese.

Aos D.Sc Cláudio Márcio do Nascimento Abreu Pereira e D.Sc Marco Antonio Bayout Alvarenga pela honra de tê-los na banca examinadora e pelas sugestões para o aprimoramento desta tese.

Ao D.Sc. Jorge Luiz Cachoeira Chapot e ao Mário Cesar Torres Alves pela colaboração, incentivo, amizade e por terem me liberado na Eletronuclear para que eu pudesse fazer o doutorado.

À Eletronuclear por disponibilizar todo o seu acervo técnico para que este trabalho de pesquisa pudesse ser realizado com sucesso.

Aos funcionários da SN.T, GSN.T e GCN.T da Eletronuclear pela colaboração, incentivo e amizade dispensados que muito me sensibilizou. Em especial ao amigo M.Sc. Erivaldo Mário dos Passos, companheiro de longa data na área nuclear, pelas discussões técnicas e sugestões que foram fundamentais para a elaboração deste trabalho.

Ao M.Sc Gladson da Silva Fontes pela colaboração, amizade e discussões técnicas que muito auxiliaram no desenvolvimento desta tese.

Aos funcionários do Programa de Engenharia Nuclear da COPPE/UFRJ pela paciência, colaboração e amizade dispensadas.

A todos os amigos que me acompanharam durante esta jornada, me incentivando e me ajudando de alguma maneira.

A todas as pessoas que contribuíram de alguma forma para a realização desta tese.

Resumo da Tese apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências (D.Sc.)

ANÁLISE DE SEGURANÇA DETERMINÍSTICA E ESTOCÁSTICA EM UM CENÁRIO DE INFILTRAÇÃO DE ÁGUA NO INTERIOR DE UM REPOSITÓRIO PRÓXIMO À SUPERFÍCIE PARA A DEPOSIÇÃO DE REJEITOS RADIOATIVOS

Antônio Sérgio De Martin Alves

Novembro/2014

Orientador: Paulo Fernando Ferreira Frutuoso e Melo

Programa: Engenharia Nuclear

Esta tese tem como objetivo desenvolver uma análise de segurança determinística e estocástica para um repositório próximo à superfície, com cripta de concreto, destinado à deposição de rejeitos radioativos de baixo e médio níveis de radiação. A distância crítica do repositório é definida como a distância entre o ponto de descarga de radionuclídeos no aquífero e um poço capaz de provocar uma dose, em um indivíduo do público, igual ao limite de dose estipulado pela CNEN. Considerando-se o cenário de infiltração de água no interior do repositório, é determinada a distância crítica deste, utilizando-se modelos matemáticos determinísticos e estocásticos, desenvolvidos neste trabalho. Os modelos matemáticos são desenvolvidos com base na equação de Richards para o fluxo de líquidos em meios porosos e na equação de transporte de soluto neste meio. Os modelos determinísticos são resolvidos analiticamente no cálculo convencional (não-estocástico), e numericamente utilizando-se o método de Runge-Kutta de 4ª ordem. Já os modelos estocásticos são resolvidos analiticamente com base no cálculo estocástico de Ito, e numericamente pelo método de Euler-Maruyama. É avaliado o impacto no valor da distância crítica do repositório de Abadia de Goiás, quando a metodologia determinística é substituída pela estocástica.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D.Sc.)

DETERMINISTIC AND STOCHASTIC SAFETY ANALYSIS IN A WATER
INFILTRATION SCENARIO OF A NEAR SURFACE REPOSITORY FOR
RADIOACTIVE WASTE DISPOSAL

Antônio Sérgio De Martin Alves

November/2014

Advisor: Paulo Fernando Ferreira Frutuoso e Melo

Department: Nuclear Engineering

This thesis aims to develop deterministic and stochastic safety analysis for a near surface repository, with concrete crypt, for the disposal of radioactive waste of low and medium radiation levels. The critical distance of the repository is defined as the distance between the point of activity discharge in the aquifer and one well able to cause a radiological dose in a member of the public, equal to the dose limit set by the regulatory body. In an accident scenario of water infiltration into the repository, the critical distance of the repository is determined by utilizing deterministic and stochastic mathematical models, developed in this work. The mathematical models are developed based either on the Richards equation for the liquid flow in the porous media and on the solute transport equation in this medium. Deterministic models are solved analytically in the conventional calculus field (non-stochastic calculus) and numerically by using the Runge-Kutta 4th order method. The stochastic models are solved analytically based on the Ito stochastic calculus and numerically by using the Euler-Maruyama method. It is analyzed the impact on the value of the critical distance of the Abadia de Goiás repository, when the deterministic methodology is replaced by the stochastic one.

SUMÁRIO	PÁGINA
Lista de Figuras	xvii
Lista de Tabelas	xxi
Lista de Símbolos	xxii
Lista de Siglas	xxxii
1. EXÓRDIO	01
1.1 GERAL	01
1.2 JUSTIFICATIVA	06
1.3 OBJETIVO	07
1.4 MOTIVAÇÃO, ORIGINALIDADE E RELEVÂNCIA	13
1.5 METODOLOGIA E ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO	16
2. PROPOSIÇÃO DO PROBLEMA	20
2.1 GERAL	20
2.2 DESCRIÇÃO DO PROBLEMA	20
2.3 TIPOS DE VAZAMENTOS CONSIDERADOS NO PROBLEMA	22
2.4 SOLUÇÃO DO PROBLEMA PROPOSTO	23
3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	26
4. FUNDAMENTOS TEÓRICOS	32
4.1 GERAL	32
4.2 VARIÁVEL DETERMINÍSTICA E VARIÁVEL ALEATÓRIA	32
4.3 CAMINHO ALEATÓRIO	33
4.4 PROCESSOS ESTOCÁSTICOS	34
4.4.1 <u>Geral</u>	34
4.4.2 <u>Processo de Markov</u>	35
4.4.3 <u>Processo de Levy</u>	36
4.4.4 <u>Processo de Wiener</u>	36
4.4.5 <u>Processo de Ito</u>	37
4.5 RUÍDO BRANCO GAUSSIANO	40

SUMÁRIO (Cont.)	PÁGINA
4.6 EQUAÇÃO DIFERENCIAL DE ITO	40
<u>4.6.1 Geral</u>	40
<u>4.6.2 Equação diferencial linear de Ito</u>	41
<u>4.6.3 Solução geral da equação diferencial linear de Ito</u>	41
4.7 LEMA DE ITO	42
4.8 EQUAÇÃO DO MOVIMENTO BROWNIANO GEOMÉTRICO	43
4.9 EQUAÇÃO DE LANGEVIN	44
4.10 O CONJUNTO σ - ALGEBRA	45
4.11 DEFINIÇÃO DE ALGUNS TIPOS DE FUNÇÕES	46
<u>4.11.1 Geral</u>	46
<u>4.11.2 Função contínua</u>	46
<u>4.11.3 Função monótona</u>	46
<u>4.11.4 Função limitada</u>	47
<u>4.11.5 Martingal (<i>Martingale</i>)</u>	47
4.12 INTEGRAIS DETERMINÍSTICAS	47
<u>4.12.1 Geral</u>	47
<u>4.12.2 Integral de Riemann</u>	47
<u>4.12.3 Integral de Stieltjes ou de Riemann-Stieltjes</u>	48
<u>4.12.4 Integral de Riemann-Stieltjes do processo de Wiener</u>	50
4.13 INTEGRAIS ESTOCÁSTICAS	50
<u>4.13.1 Geral</u>	50
<u>4.13.2 Integral de Ito</u>	50
<u>4.13.3 Integral de Stratonovich</u>	53
4.14 CÁLCULO ESTOCÁSTICO	56
<u>4.14.1 Geral</u>	56
<u>4.14.2 Cálculo estocástico de Ito</u>	56
<u>4.14.3 Cálculo estocástico de Stratonovich</u>	58
<u>4.14.4 Utilização do cálculo estocástico de Ito e de Stratonovich em geral</u>	59
<u>4.14.5 Utilização do cálculo estocástico de Ito e de Stratonovich nesta tese</u>	60

4.15	MÉTODOS NUMÉRICOS PARA SOLUÇÃO DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS ORDINÁRIAS	62
4.15.1	<u>Geral</u>	62
4.15.2	<u>Método de Runge-Kutta de 4ª ordem</u>	63
4.15.3	<u>Método de Euler-Maruyama</u>	65
4.15.3.1	Geral	65
4.15.3.2	Consistência, convergência e estabilidade	66
4.15.3.2.1	<u>Geral</u>	66
4.15.3.2.2	<u>Consistência</u>	67
4.15.3.2.2.1	Consistência forte	67
4.15.3.2.2.2	Consistência fraca	68
4.15.3.2.3	<u>Convergência</u>	68
4.15.3.2.3.1	Convergência forte	68
4.15.3.2.3.2	Convergência fraca	69
4.15.3.2.4	<u>Estabilidade</u>	70
5.	MODELAGEM MATEMÁTICA	72
5.1	GERAL	72
5.2	INFILTRAÇÃO DE ÁGUA NO INTERIOR DO REPOSITÓRIO	74
5.2.1	<u>Geral</u>	74
5.2.2	<u>Modelo determinístico</u>	76
5.2.2.1	Determinação da vazão volumétrica de água que que entra no repositório	76
5.2.2.2	Altura de coluna de líquido no interior do repositório	79
5.2.2.2.1	<u>Geral</u>	79
5.2.2.2.2	<u>Situação em que não ocorre o transbordamento do repositório</u>	86
5.2.2.2.3	<u>Quando ocorre o transbordamento do repositório</u>	87
5.2.2.3	Massa de radionuclídeo na fase líquida no repositório	87
5.2.2.3.1	<u>Geral</u>	87
5.2.2.3.2	<u>Massa de radionuclídeo no instante da falha do repositório</u>	91
5.2.2.3.3	<u>Massa de radionuclídeo após a falha do Repositório</u>	92

5.2.2.3.3.1	Situação em que não ocorre o transbordamento do repositório	92
5.2.2.3.3.2	Quando ocorre o transbordamento do repositório	92
5.2.2.4	Concentração em atividade na fase líquida no repositório após a falha do mesmo	92
5.2.2.4.1	<u>Geral</u>	92
5.2.2.4.2	<u>Situação em que não ocorre o transbordamento do repositório</u>	93
5.2.2.4.3	<u>Quando ocorre o transbordamento do repositório</u>	93
5.2.2.5	Taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente	94
5.2.2.5.1	<u>Geral</u>	94
5.2.2.5.2	<u>Situação em que não ocorre o transbordamento do repositório</u>	94
5.2.2.5.3	<u>Quando ocorre o transbordamento do repositório</u>	94
5.2.2.6	Concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero	95
5.2.2.6.1	<u>Geral</u>	95
5.2.2.6.2	<u>Situação em que não ocorre o transbordamento do repositório</u>	96
5.2.2.6.3	<u>Quando ocorre o transbordamento do repositório</u>	96
5.2.2.7	Concentração em atividade ao longo do aquífero	96
5.2.3	<u>Modelo estocástico</u>	100
5.2.3.1	Geral	100
5.2.3.2	Taxa de precipitação pluviométrica	100
5.2.3.3	Vazão volumétrica de água que entra no repositório após a falha do mesmo	100
5.2.3.4	Altura de coluna de líquido no interior do repositório	101
5.2.3.4.1	<u>Situação em que não ocorre o transbordamento do repositório</u>	101
5.2.3.4.2	<u>Quando ocorre o transbordamento do repositório</u>	102
5.2.3.5	Massa de radionuclídeo na fase líquida no repositório	103
5.2.3.5.1	<u>Geral</u>	103

5.2.3.5.2 <u>Massa de radionuclídeo no instante da falha do repositório</u>	103
5.2.3.5.3 <u>Massa de radionuclídeo após a falha do repositório</u>	103
5.2.3.6 Concentração em atividade na fase líquida no repositório após a falha do mesmo	104
5.2.3.7 Taxa de liberação de atividade do repositório para o meio ambiente	104
5.2.3.8 Concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero	104
5.2.3.9 Concentração em atividade ao longo do aquífero	104
6. APRESENTAÇÃO E ANÁLISE DOS RESULTADOS	105
6.1 GERAL	105
6.2 DADOS UTILIZADOS	105
6.3 MODELOS MATEMÁTICOS DETERMINÍSTICOS	107
6.3.1 <u>Geral</u>	107
6.3.2 <u>Resultados obtidos com os modelos determinísticos 1 e 2</u>	108
6.3.2.1 Geral	108
6.3.2.2 Altura de coluna de líquido no interior do repositório	113
6.3.2.3 Concentração em atividade no interior do repositório	115
6.3.2.4 Taxa de liberação de atividade do repositório para o meio ambiente	120
6.3.2.5 Concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero	122
6.3.2.6 Concentração em atividade ao longo do aquífero	124
6.3.3 <u>Definição de um padrão determinístico para a realização de futuras comparações com os modelos estocásticos</u>	131
6.4 MODELOS MATEMÁTICOS ESTOCÁSTICOS	131
6.4.1 <u>Geral</u>	131
6.4.2 <u>Resultados obtidos com os modelos estocásticos 1 e 2</u>	133
6.4.2.1 Geral	133
6.4.2.2 Números escolhidos aleatoriamente de uma distribuição normal padrão	136
6.4.2.3 Processo de Wiener	137

6.4.2.4	Ruído branco gaussiano	138
6.4.2.5	Vazão volumétrica de água que entra no repositório	139
6.4.2.6	Altura de coluna de líquido no interior do repositório	139
6.4.2.7	Concentração em atividade no interior do repositório	145
6.4.2.8	Taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente	147
6.4.2.9	Concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero	150
6.4.2.10	Concentração em atividade ao longo do aquífero	152
6.5	COMPARAÇÃO ENTRE OS MODELOS DETERMINÍSTICOS E OS ESTOCÁSTICOS	154
6.5.1	<u>Geral</u>	154
6.5.2	<u>Altura de coluna de líquido no interior do repositório</u>	155
6.5.3	<u>Concentração em atividade no interior do repositório</u>	158
6.5.4	<u>Taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente</u>	160
6.5.5	<u>Concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero</u>	161
6.5.6	<u>Concentração em atividade ao longo do aquífero</u>	163
6.6	DETERMINAÇÃO DA DISTÂNCIA CRÍTICA DO REPOSITÓRIO UTILIZANDO-SE OS MODELOS DETERMINÍSTICOS E ESTOCÁSTICOS	164
6.6.1	<u>Geral</u>	164
6.6.2	<u>Modelos determinísticos</u>	165
6.6.3	<u>Modelos estocásticos</u>	165
6.6.4	<u>Comparação entre os modelos determinísticos e estocásticos</u>	167
7.	CONCLUSÕES E SUGESTÕES	173
	REFERÊNCIAS	181
	APÊNDICE A (Modelo determinístico 1)	196
	APÊNDICE B (Modelo determinístico 2)	211
	APÊNDICE C (Determinação das integrais do modelo determinístico 2)	229
	APÊNDICE D (Modelo estocástico 1)	235

APÊNDICE E (Modelo estocástico 2)	270
APÊNDICE F (Consistência, convergência e estabilidade do método de Euler-Maruyama)	287

LISTA DE FIGURAS

FIGURA	PÁGINA
Figura 1.1 – Representação esquemática do fluxo de rejeitos radioativos gerados nas usinas nucleares Angra 1 e 2.	02
Figura 1.2 – Ilustração de um repositório próximo à superfície com cripta de concreto.	04
Figura 1.3 – Justificativa específica para o desenvolvimento desta tese.	06
Figura 1.4 – Parâmetros que compõem o cenário de infiltração de água.	11
Figura 1.5 – Estratégia utilizada nesta tese para a confrontação dos modelos determinístico e estocástico.	12
Figura 2.1 – Exemplo de um caminho de dose.	21
Figura 2.2 – Tipos de vazamento em atividade considerados no problema.	23
Figura 2.3 – Diagrama esquemático dos modelos matemáticos e programas de computador desenvolvidos nesta tese.	24
Figura 5.1 – Ilustração de um repositório próximo à superfície, mostrando sua localização em relação ao aquífero, poço de captação de água e biosfera.	72
Figura 5.2 – Ilustração de um cenário de infiltração de água no interior de um repositório próximo à superfície.	77
Figura 5.3 – Vista superior da estrutura de concreto do repositório.	78
Figura 5.4 – Vista lateral da estrutura de concreto do repositório.	78
Figura 5.5 – Um corte da estrutura de concreto do repositório mostrando a infiltração de água, após a degradação do teto, do material de enchimento (<i>backfill</i>) e dos embalados de rejeitos radioativos.	80
Figura 5.6 – Equações de \dot{Q}_1 para o modelo determinístico e para o estocástico.	101
Figura 6.1 – Altura de coluna de líquido no interior do repositório, (a) modelo determinístico 1, (b) modelo determinístico 2.	113
Figura 6.2 – Altura de coluna de líquido no interior do repositório obtida com os modelos determinísticos 1 e 2.	115
Figura 6.3 – Concentração em atividade no interior do repositório, (a) modelo determinístico 1, (b) modelo determinístico 2.	116

FIGURA (cont.)	PÁGINA
Figura 6.4 – Atividade na fase líquida no interior do repositório.	118
Figura 6.5 – Taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente, (a) modelo determinístico 1, (b) modelo determinístico 2.	120
Figura 6.6 – Concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero, (a) modelo determinístico 1, (b) modelo determinístico 2.	123
Figura 6.7 – Concentração em atividade ao longo do aquífero (alguns pontos) para $x = 0,5$ m, (a) modelo determinístico 1, (b) modelo determinístico 2.	124
Figura 6.8 – Concentração em atividade ao longo do aquífero (muitos pontos), para $x = 0,5$ m, (a) modelo determinístico 1, (b) modelo determinístico 2.	127
Figura 6.9 – Concentração em atividade ao longo do aquífero (muitos pontos) para valores de x iguais a 0,1 m, 1 m e 2 m no modelo determinístico 2.	129
Figura 6.10 – Concentração em atividade ao longo do aquífero (muitos pontos) para valores de x iguais a 3 m, 4 m e 5 m no modelo determinístico 2.	130
Figura 6.11 – Valores dos números n_i escolhidos aleatoriamente de uma distribuição normal padrão $N(0,1)$ no Mathematica 9.0.	136
Figura 6.12 – Representação do processo de Wiener.	137
Figura 6.13 – Representação do ruído branco gaussiano.	138
Figura 6.14 – Vazão volumétrica de água que entra no interior do repositório.	139
Figura 6.15 – Altura de coluna de líquido no interior do repositório utilizando-se um filtro para altura máxima igual a 4,38 m, (a) modelo estocástico 1, (b) modelo estocástico 2.	140
Figura 6.16 – Altura de coluna de líquido no interior do repositório sem a utilização de filtros para controle de H no modelo estocástico 1.	142
Figura 6.17 – Altura de coluna de líquido no interior do repositório sem a utilização de filtros nos modelos estocásticos 1 e 2.	143
Figura 6.18 – Diferença entre os valores de H calculados com os modelos estocásticos 1 e 2.	144

FIGURA (cont.)	PÁGINA
Figura 6.19 – Concentração em atividade no interior do repositório, (a) modelo estocástico 1, (b) modelo estocástico 2.	146
Figura 6.20 – Taxa de liberação de atividade do repositório para o meio ambiente, (a) modelo estocástico 1, (b) modelo estocástico 2.	148
Figura 6.21 – Concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero, (a) modelo estocástico 1, (b) modelo estocástico 2.	151
Figura 6.22 – Concentração em atividade ao longo do aquífero, (a) modelo estocástico 1, (b) modelo estocástico 2.	153
Figura 6.23 – Altura de coluna de líquido no interior do repositório, (a) modelos determinístico e estocástico 1, (b) modelos determinístico e estocástico 2.	156
Figura 6.24 – Concentração em atividade no interior do repositório, (a) modelos determinístico e estocástico 1, (b) modelos determinístico e estocástico 2.	158
Figura 6.25 – Taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente, (a) modelos determinístico e estocástico 1, (b) modelos determinístico e estocástico 2.	160
Figura 6.26 – Concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero, (a) modelos determinístico e estocástico 1, (b) modelos determinístico e estocástico 2.	162
Figura 6.27 – Concentração em atividade ao longo do aquífero, (a) modelos determinístico e estocástico 1, (b) modelos determinístico e estocástico 2.	163
Figura 6.28 – Concentração em atividade máxima ao longo do aquífero.	167
Figura 6.29 – Concentração em atividade máxima ao longo do aquífero, (a) modelo determinístico (REPDA2), (b) modelo estocástico (REPEN2).	169
Figura D.1 – Representação de uma curva que obedece ao processo de Wiener.	250
Figura D.2 – Distribuição normal padrão.	251
Figura D.3 – A curva C e a sua curva simétrica C'.	252
Figura F.1 – Valores do erro absoluto forte em função do incremento de tempo.	299

FIGURA (cont.)	PÁGINA
Figura F.2 – Valores do erro absoluto fraco em função do incremento de tempo.	299
Figura F.3 – Valores dos erros absolutos forte e fraco em função do incremento de tempo.	301
Figura F.4 – Intervalo do incremento de tempo h determinado pela análise de estabilidade do Método de Euler-Maruyama.	305

LISTA DE TABELAS

TABELA	PÁGINA
Tabela 6.1 – Valores dos parâmetros utilizados nesta tese (NUCLEN, 1996).	105
Tabela 6.2 - Programas de computador desenvolvidos para os modelos determinísticos 1 e 2	108
Tabela 6.3 – Valores obtidos com o programa de computador REPDA1.	109
Tabela 6.4 – Valores obtidos com o programa de computador REPDN1.	110
Tabela 6.5 – Valores obtidos com o programa de computador REPDA2.	111
Tabela 6.6 – Valores obtidos com o programa de computador REPDN2.	112
Tabela 6.7 - Programas de computador desenvolvidos para os modelos estocásticos 1 e 2.	132
Tabela 6.8 – Valores obtidos com o programa de computador REPEA1.	133
Tabela 6.9 – Valores obtidos com o programa de computador REPEN1.	134
Tabela 6.10 – Valores obtidos com o programa de computador REPEN2.	135
Tabela 6.11 – Concentração em atividade máxima no aquífero obtida com a modelagem determinística.	165
Tabela 6.12 – Concentração em atividade máxima ao longo do aquífero.	166
Tabela 6.13 – Concentração em atividade máxima ao longo do aquífero obtida com a modelagem estocástica no intervalo $I_x [0, 1]$.	168
Tabela 6.14 – Parâmetros importantes para a análise de $C_{A_{\max}}$ no modelo determinístico.	171
Tabela B.1 - Equações para a altura de coluna de líquido H.	218
Tabela B.2 - Equações para I_i .	221
Tabela C.1 – Resumo das equações para I_i .	234
Tabela F.1 – Valores analíticos e numéricos do processo estocástico X(t).	293
Tabela F.2 – Valores do erro absoluto forte.	295
Tabela F.3 – Valores do erro absoluto fraco.	297

LISTA DE SÍMBOLOS

Nomenclatura:

- a = constante do método de Runge-Kutta de 4ª ordem; extremo de um intervalo;
- $a(t, X_t)$ = termo de arraste médio do processo estocástico de Ito;
- A = área interna da base ou do teto do repositório e área transversal do meio, [m^2],
ou um conjunto;
- A^c = complemento do conjunto A ;
- A = conjunto σ - álgebra;
- A_0 = atividade do radionuclídeo no interior do repositório no instante $t = 0$, [Bq];
- A_n = área dos poros, [m^2];
- \dot{A} = taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente, [Bq/a];
- \dot{A}_a = taxa de descarga em atividade no aquífero, [Bq/a];
- b = extremo de um intervalo;
- b_a = largura do aquífero, [m];
- b_1 = largura da base do repositório, [m];
- b_2 = comprimento da base do repositório, [m];
- $b(t, X_t)$ = termo difusivo do processo estocástico de Ito;
- c = constante ou função;
- $\cos(x)$ = função cosseno de x ;
- C = concentração em massa de radionuclídeo na fase líquida (água + radionuclídeo), [kg/m^3];
- C_{crit} = concentração crítica em atividade no aquífero, [Bq/ m^3];
- C_D = concentração em atividade no ponto de descarga de radionuclídeos no aquífero, [Bq/ m^3];
- C'_1 = concentração em massa de radionuclídeo na fase líquida, [mg/m^3];
- C_1, C_2 e C_3 = constantes de integração;
- C_R = concentração em massa ou em atividade no interior do repositório, [kg/m^3 ou Bq/ m^3];
- C_A = concentração em atividade ao longo do aquífero, [Bq/ m^3];
- dt = diferencial de tempo, [a];
- dS = diferencial da superfície de controle, [m];

- D = domínio de uma função;
- \tilde{D} = tensor coeficiente de difusão ou dispersão do radionuclídeo no meio, $[m^2/a]$;
- \tilde{D}_a = tensor coeficiente de difusão do radionuclídeo na água, $[m^2/a]$;
- \tilde{D}_p = tensor coeficiente de dispersão do radionuclídeo no poro, $[m^2/a]$;
- $\text{erf}(x)$ = função erro;
- $\text{erfc}(x)$ = função erro complementar = $1 - \text{erf}(x)$
- E = espessura da base do repositório, $[m]$, ou média;
- $E(X_t)$ = esperança matemática ou média do processo estocástico X_t ;
- $\text{Exp}(x)$ = função exponencial;
- \dot{e} = taxa de evapotranspiração, $[m/a]$;
- f = função;
- f_m = fator de mistura que corrige o valor da atividade transbordada pelo teto do repositório ($0 \leq f_m \leq 1$);
- $F_d(t)$ = função degradação do teto do repositório ($0 \leq F_d(t) \leq 1$);
- F_t = filtração de um processo estocástico X_t ;
- $f(x)$ = função real;
- $F(x)$ = força produzida pelas interações intramoleculares e intermoleculares na equação de Langevin, $[N]$;
- $f(t, x)$ = função determinística de t e x ;
- $f(t, X)$ = função estocástica de t e X ;
- g = polinômios utilizados na análise de convergência de processos estocásticos;
- h = pressão manométrica, $[m]$, ou incremento de tempo, $[a]$;
- h = função associada à H no Apêndice B, $[m]$;
- H = altura de coluna de líquido no repositório, $[m]$;
- H_a = profundidade do aquífero, $[m]$;
- H_r = altura de coluna de líquido máxima no repositório, $[m]$;
- H_t = processo estocástico;
- \bar{H} = altura de coluna de líquido média na modelagem estocástica, $[m]$;
- ΔH = flutuação de H na modelagem estocástica, $[m]$;
- $H(t_f)$ = altura de coluna de líquido no repositório no instante da falha do mesmo, $[m]$;
- i = número inteiro ou imaginário puro = $\sqrt{-1}$;

- \dot{i}_r = taxa de irrigação no repositório, [m/a];
- I_I = integral de Ito;
- I_R = integral de Riemann;
- I_{RS} = integral de Riemann-Stieltjes;
- I_S = integral de Stratonovich;
- I_x = intervalo para a distância entre o repositório e o poço x , [m];
- $I_{\Delta t}$ = intervalo para o incremento de tempo Δt , [a];
- \vec{i} = vetor unitário na direção x ;
- \vec{j} = vetor unitário na direção y ;
- k = número inteiro;
- k_d = coeficiente de distribuição do repositório, [m³/kg];
- k_{da} = coeficiente de distribuição do aquífero, [m³/kg];
- k_i = funções do método de Runge-Kutta;
- K = constante;
- K_c = condutividade hidráulica do concreto, [m/a];
- \tilde{K} = tensor condutividade hidráulica, [m/a];
- K_x, K_y e K_z = condutividade hidráulica nas direções x, y e z , [m/a];
- \vec{k} = vetor unitário na direção z ;
- l = variável aleatória discreta;
- \ln = logaritmo natural ou neperiano;
- L = espessura das paredes do repositório, [m];
- m = soma dos σ_i ou massa, [kg];
- M = constante para limitar uma função;
- M_0 = massa de radionuclídeo no interior do repositório no instante $t = 0$, [kg];
- M_{0w} = massa de radionuclídeo na fase líquida no repositório no instante $t = 0$, [kg];
- M_{rw} = massa de radionuclídeo na fase líquida no repositório, [kg];
- $M_{rw}(t_f)$ = massa de radionuclídeo na fase líquida no repositório no instante da falha do mesmo, [kg];
- n = porosidade interna do repositório;
- n_a = porosidade do aquífero;
- n_i, n_t = números escolhidos aleatoriamente de uma distribuição normal padrão, $N(0,1)$;
- N e N_t = número de intervalos de discretização;

- N_w = números adimensionais;
- $N(0, 1)$ = distribuição normal padrão;
- p = função densidade de probabilidade, [a^{-1}];
- p_l = função densidade de probabilidade de uma variável aleatória discreta, [a^{-1}];
- p_{wt} = densidade de probabilidade do processo de Wiener, [a^{-1}];
- \dot{p} = taxa de precipitação pluviométrica, [m/a];
- \dot{p}_m = taxa de precipitação pluviométrica média, [m/a];
- P = medida de probabilidade ou partição de um intervalo;
- $P(A)$ = probabilidade de ocorrer o evento A;
- q = probabilidade;
- $Q[W]$ = variação quadrática (*squared variation*) de W;
- \dot{Q}_a = vazão volumétrica média de água no aquífero, [m^3/a];
- \dot{Q}_1 = vazão volumétrica de água que entra no repositório, [m^3/a];
- \dot{Q}_2 = vazão volumétrica de mistura que sai pela base do repositório, [m^3/a];
- \dot{Q}_3 = vazão volumétrica de mistura que sai pelas paredes laterais do repositório, [m^3/a];
- \dot{Q}_4 = vazão volumétrica de mistura que sai pelo teto do repositório durante o transbordamento do mesmo, [m^3/a];
- \dot{Q}_{1m} = valor médio de \dot{Q}_1 na modelagem estocástica, [m^3/a];
- $\Delta\dot{Q}_1$ = valor da flutuação de \dot{Q}_{1m} na modelagem estocástica, [m^3/a];
- \dot{r} = escoamento de água tangente à superfície do terreno (*surface runoff*), [m/a];
- R = conjunto dos números reais; resultante das forças, [N];
- s = instante de tempo, [a];
- $\text{sen}(x)$ = função seno de x;
- S_1 = razão entre a massa de radionuclídeo e a massa da fase sólida, [mg/kg];
- \vec{s} = vetor unitário normal à superfície de controle dS;
- S_c = superfície de controle, [m^2];
- S_c^B = superfície da base do repositório, [m^2];
- S_c^P = superfície das paredes laterais do repositório, [m^2];

- S_c^* = superfície das fronteiras da estrutura de concreto do repositório com exceção do teto do mesmo, [m²];
- S_t = integral de Stratonovich;
- $S(f, P)$ = soma de Riemann;
- t = instante de tempo, [a];
- t_f = instante de tempo no qual ocorre a falha do repositório, [a];
- t_t = instante de tempo no qual se inicia o transbordamento do repositório, [a];
- T = instante de tempo, [a], ou temperatura, [°C];
- U = união de conjuntos;
- v = velocidade, [m/s];
- v_a = velocidade da água no aquífero, [m/a];
- $v_{rx} = \frac{v_{px}}{R_{da}}$ = velocidade do radionuclídeo no poro do aquífero, [m/a];
- Var, V = variância;
- V_c = volume de controle, [m³];
- V_n = volume total dos poros, [m³];
- V_p = volume de ar no poro, [m³];
- V_s = volume do sólido (*skeleton*), [m³];
- V_t = volume total no interior de um volume de controle, [m³];
- V_w = volume do líquido no poro ou da fase líquida no interior do repositório, [m³];
- $V(\alpha)[a, b]$ = variação da função $\alpha(x)$ no intervalo [a, b];
- \vec{v} = vetor velocidade superficial da fase líquida, [m/a];
- \vec{v}_a = vetor velocidade superficial da água no aquífero, [m/a];
- \vec{v}_{pa} = vetor velocidade da água no poro do aquífero, [m/a];
- \vec{V} = vetor vazão de Darcy, [m/a];
- $W(t)$ e W_t = processo de Wiener ou movimento browniano padrão (MBP); [m];
- W_{1t} = processo estocástico compatível com a definição de ε_1 , [a/m];
- W_{2t} = processo estocástico compatível com a definição de ε_2 , [m.a];
- W_{t_0} = processo de Wiener em $t = t_0$, [m];
- x = eixo coordenado, [m];
- x_{crit} = distância crítica do repositório, [m];
- \vec{x}^T = vetor transposto do vetor \vec{x} ;

X e X_t = processos estocásticos;
 X_T = solução exata de um processo estocástico de Ito;
 X_0, X_{t_0} = valor do processo estocástico X_t em $t = 0$;
 y = eixo coordenado, [m];
 $y(x)$ = função de x ;
 y^n = n-ésima derivada da função $y(x)$ em relação a x ;
 Y_n^δ = aproximação numérica de um processo estocástico de Ito;
 $Y_N(t)$ = solução numérica de um processo estocástico de Ito;
 Y_0 = condição de valor inicial para o processo estocástico Y ;
 z = eixo coordenado ou elevação, [m];
 Z_t = função estocástica.

Símbolos gregos:

λ = constante de decaimento radioativo do radionuclídeo, [a^{-1}];
 $\theta(t)$ = conteúdo volumétrico de líquido no poro;
 α' = coeficiente de compressibilidade modificado do meio, [m^{-1}];
 $\alpha_i(t)$ = parâmetros da equação diferencial linear de Ito;
 $\alpha(x)$ = função real;
 β = ordem de convergência fraca de uma aproximação numérica de um processo estocástico de Ito ou constante de proporcionalidade na equação de Langevin;
 β' = coeficiente de compressibilidade modificado do líquido, [m^{-1}];
 $\beta_i(t)$ = parâmetros da equação diferencial linear de Ito;
 δ = número real;
 ∇_\bullet = operador divergente, [m^{-1}];
 ∇ = operador gradiente, [m^{-1}];
 $*$ = produto interno ou escalar entre 2 vetores;
 $\Delta n, \Delta t$ e δ = incrementos de tempo, [a];
 ε = erro absoluto ou ruído branco;
 ε_{for} = erro absoluto forte;
 ε_{fa} = erro absoluto fraco;
 \in = pertence a um conjunto;

- ϕ_{t,t_0} = função estocástica representada pela Eq. (4.17);
- ϕ_{t,t_0}^{-1} = $(1/\phi_{t,t_0})$;
- γ = ordem de convergência forte de uma aproximação numérica de um processo estocástico de Ito;
- ξ = variável de integração;
- μ = esperança matemática ou média;
- η_t ou $\eta(t)$ = ruído estocástico;
- Ω = espaço amostral;
- (Ω, A, P) = espaço de probabilidade;
- ρ = massa específica interna do repositório (sólido + líquido), $[\text{kg}/\text{m}^3]$;
- ρ_a = massa específica do aquífero (sólido + líquido), $[\text{kg}/\text{m}^3]$;
- $\rho(x)$ = densidade de probabilidade de uma variável aleatória contínua, $[\text{a}^{-1}]$;
- σ = desvio padrão;
- σ_i = variáveis aleatórias independentes;
- σ - álgebra = conjunto definido na seção 4.10;
- τ = instante de tempo, $[\text{a}]$;
- $| |$ = módulo;
- $\| \|$ = norma de um vetor ou de uma função.

Parâmetros definidos por equações:

$$a = \frac{K_c \cdot (b_1 + b_2)}{n \cdot A \cdot L};$$

$$a_1 = - \left(\frac{a}{\beta} \right) + \frac{1}{H(t_f) - h_{p_1}};$$

$$a_2 = \left(\frac{a}{\beta} \right);$$

$$a_3 = h_{p_1} \cdot \left[- \left(\frac{a}{\beta} \right) + \frac{1}{H(t_f) - h_{p_1}} \right];$$

$$a_4 = \left[1 + h_{p_1} \cdot \left(\frac{a}{\beta} \right) \right];$$

$$A^* = \sqrt{(v_{rx})^2 + 4\lambda D_{rx}};$$

$$b = \frac{K_c}{nE};$$

$$B^* = \sqrt{\left(\frac{v_{rx}}{2D_{rx}}\right)^2 + \left(\frac{\lambda}{D_{rx}}\right)};$$

$$c = \frac{1}{n} \cdot [K_c - F_d \cdot (\dot{p} + \dot{i}_r - \dot{e} - \dot{r})];$$

$$c(t) = \frac{1}{n} \cdot [K_c - F_d(t) \cdot (\dot{p} + \dot{i}_r - \dot{e} - \dot{r})];$$

$$C_1^* = \left[\lambda + \left(\frac{(1-f_m) \cdot (\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3) + f_m \cdot \dot{Q}_1}{R_d \cdot n \cdot A \cdot H_r} \right) \right] \Bigg|_{TR};$$

$$C_2^* = \left(\frac{A_0}{n \cdot R_d \cdot H_r \cdot b_a \cdot H_a \cdot v_a} \right) \cdot [f_m \cdot F_d \cdot (\dot{q} + \dot{i}_r - \dot{e} - \dot{r}) + (1-f_m) \cdot K_c \cdot \left(\frac{H_r + E}{E} \right)];$$

$$D_{rx} = \frac{D_{px}}{R_{da}} = \text{coeficiente de dispersão do radionuclídeo no poro do aquífero, [m}^2/\text{a]};$$

$$h_p = \frac{-b \pm \sqrt{\Delta}}{2a};$$

$$h_{p1} (\Delta > 0) = \frac{-b - \sqrt{\Delta}}{2a};$$

$$I_1 = \int_{t_f}^t \left(\frac{K_c \cdot A}{E} \right) \cdot d\tau = \frac{K_c \cdot A \cdot (t - t_f)}{E};$$

$$I_2 = \int_{t_f}^t \left(\frac{K_c \cdot A}{H} \right) \cdot d\tau = \frac{K_c \cdot A}{\beta} \left[-\frac{a_1}{a_3} \cdot \ln\left(\frac{a_3 \cdot e^{-\beta \cdot (t-t_f)} + a_4}{a_3 + a_4} \right) + \frac{a_2}{a_4} \cdot \ln\left(\frac{a_3 + a_4 \cdot e^{\beta \cdot (t-t_f)}}{a_3 + a_4} \right) \right];$$

$$I_3 = \int_{t_f}^t \left(\frac{K_c \cdot (b_1 + b_2) \cdot H}{L} \right) \cdot d\tau = \frac{K_c \cdot (b_1 + b_2)}{\beta L} \left[-\frac{a_3}{a_1} \cdot \ln\left(\frac{a_1 \cdot e^{-\beta \cdot (t-t_f)} + a_2}{a_1 + a_2} \right) + \frac{a_4}{a_2} \cdot \ln\left(\frac{a_1 + a_2 \cdot e^{\beta \cdot (t-t_f)}}{a_1 + a_2} \right) \right];$$

$$R_d = \text{coeficiente de retardo do radionuclídeo no repositório} = \left(1 + \frac{\rho \cdot k_d}{n} \right);$$

$$R_{da} = \text{coeficiente de retardo do radionuclídeo no aquífero} = \left(1 + \frac{\rho_a \cdot k_{da}}{n_a} \right);$$

$$W_t = \sqrt{t} \cdot N(0,1);$$

$$\alpha_1 = H(t_f) + \left(\frac{c}{b} \right);$$

$$\alpha_2 = \left(\frac{c}{b}\right);$$

$$\alpha_3 = \frac{A_0 \cdot K_c}{n \cdot R_d \cdot A};$$

$$\alpha_4 = \frac{(1 - f_m) \cdot K_c}{n \cdot R_d \cdot A \cdot H_r};$$

$$\alpha_5 = \left(\frac{f_m \cdot F_d \cdot A_0}{n \cdot R_d \cdot H_r}\right) \cdot (\dot{q} + \dot{i}_r - \dot{e} - \dot{r});$$

$$\alpha_6 = \frac{\alpha_3}{b_a \cdot H_a \cdot v_a};$$

$$\alpha_7 = \left(\frac{1}{b_a \cdot H_a \cdot v_a}\right);$$

$$\beta = \sqrt{|\Delta|};$$

$$\beta_1 = \left(\lambda + \frac{K_c}{n \cdot R_d \cdot E}\right);$$

$$\beta_2 = \left(\frac{K_c}{n \cdot R_d \cdot c}\right);$$

$$\beta_3 = \left(\frac{c}{b \cdot H(t_f)}\right);$$

$$\Delta = b^2 - 4 \cdot a \cdot c;$$

$$\varepsilon = \frac{dW_t}{dt} = \text{ruído branco gaussiano (Gaussian white noise)}$$

$$\varepsilon_1 = \frac{dW_{1t}}{dt} = \frac{1}{H} - \frac{1}{\bar{H}} = \text{ruído colorido não-gaussiano 1, [m}^{-1}\text{]};$$

$$\varepsilon_2 = \Delta H = \text{ruído colorido não-gaussiano 2, [m}^{-1}\text{]};$$

$$\phi_1 = \left(\frac{A}{E}\right) \cdot [H + E] + \left(\frac{b_1 + b_2}{L}\right) \cdot [H^2], [\text{m}^2];$$

$$\phi_1(t_f) = \left(\frac{A}{E}\right) \cdot [H_r + E] + \left(\frac{b_1 + b_2}{L}\right) \cdot [H_r^2], [\text{m}^2];$$

$$\xi_1 = \left(\frac{H(t_f) - h_{pl}}{h_{pl}}\right) \cdot \cos(\beta \cdot t_f);$$

$$\xi_2 = -\left(\frac{H(t_f) - h_{pl}}{h_{pl}}\right) \cdot \text{sen}(\beta \cdot t_f);$$

$$\eta_1 = \cos(\beta.t) + \left(\frac{a}{\beta}\right).[H(t_f) - h_{p1}].[sen(\beta.t) - sen(\beta.t_f)];$$

$$\eta_2 = -sen(\beta.t) + \left(\frac{a}{\beta}\right).[H(t_f) - h_{p1}].[cos(\beta.t) - cos(\beta.t_f)];$$

$$\psi_1 = \left(\frac{\alpha_1.(e^{-b.(t-t_f)}) - \alpha_2 + E}{E}\right);$$

$$\psi_2 = \frac{(e^{-[\beta_1.(t-t_f) + \lambda.t_f]}.[1 + \beta_3.(1 - e^{b.(t-t_f)})])^{\beta_2}}{\alpha_1.(e^{-b.(t-t_f)}) - \alpha_2};$$

$$\Psi_1^c = \left|E\left(\frac{Y_{n+1}^\delta - Y_n^\delta}{\Delta n} \mid A_{\tau_n}\right) - a(\tau_n, Y_n^\delta)\right|^2;$$

$$\Psi_2^c = \frac{1}{\Delta n} \left|Y_{n+1}^\delta - Y_n^\delta - E(Y_{n+1}^\delta - Y_n^\delta \mid A_{\tau_n}) - b(\tau_n, Y_n^\delta).\Delta W_n\right|^2;$$

$$\Psi_3^c = \left|E\left[\frac{1}{\Delta n} (Y_{n+1}^\delta - Y_n^\delta).(Y_{n+1}^\delta - Y_n^\delta)^T \mid A_{\tau_n}\right] - b(\tau_n, Y_n^\delta).b(\tau_n, Y_n^\delta)^T\right|^2.$$

Subescritos:

a, A, c, crit, d, da, D, f, for, fra, i, l, m, n, p, pa, p1, px, p1, r, rw, rx, R, s, t, t0, w, wt, x, y, z, 0, 1, 2, 4, 5, 6, 7, 1m, 1t, 2t, Δt, τ_n

Superescritos:

B, c, n, P, T, 2, ‘, -1, *, δ

LISTA DE SIGLAS

CNAAA – Complexo Nuclear Almirante Álvaro Alberto

CNEN – Comissão Nacional de Energia Nuclear

ETN – Eletronuclear

FEP – Features, Events and Processes

IAEA – International Atomic Energy Agency

MBG – movimento browniano exponencial ou geométrico

MBP – movimento browniano padrão

1. EXÓRDIO

1.1 GERAL

A energia nuclear teve um desenvolvimento vertiginoso após o final da Segunda Guerra Mundial, em 1945. Embora tenha sido apresentada ao mundo como algo aterrorizante, encarnada na forma de artefatos nucleares que dizimaram as populações das cidades japonesas de Hiroshima e Nagasaki, mostrou outra face bem mais amistosa, quando utilizada com inteligência e sabedoria.

Os tratamentos de radioterapia no combate aos diversos tipos de câncer, a irradiação de alimentos, a utilização de radiofármacos na medicina diagnóstica, o uso de traçadores radioativos na agricultura e no estudo do comportamento de insetos, o emprego da gamagrafia na indústria e no controle de fadiga de aeronaves, o uso de reatores de potência nuclear na propulsão naval e a geração de eletricidade, nas centrais nucleares, são alguns exemplos do emprego da energia nuclear.

A utilização da energia nuclear produz rejeitos nas formas sólida, líquida e gasosa, que podem ser descartados diretamente na biosfera, ou que precisam ser gerenciados de forma segura, por décadas e até mesmo dezenas de milhares de anos.

Parte dos rejeitos radioativos de baixo nível de radiação (CNEN, 1985) pode ser eliminada diretamente no meio ambiente, quando em quantidades que assegurem que o risco à saúde humana seja inferior aos limites admitidos para o público em geral. Assim é que, em determinadas condições, gases são descartados na atmosfera, materiais sólidos no sistema de coleta de lixo urbano e líquido na rede de esgoto, ou diretamente em águas superficiais (HIROMOTO et al., 1999).

Este tipo de descarte se aplica aos rejeitos com nível de atividade inferior aos Limites Autorizados de Descarga, fixados pela autoridade competente. Estes limites são expressos em termos de atividade total ou concentração em atividade e são distintos para cada tipo de radionuclídeo e estado físico dos rejeitos. Eles são estabelecidos com base em estudos prévios que levam em consideração a solubilidade e a diluição dos

rejeitos no meio ambiente, as rotas que percorrem até chegar ao homem, e as doses de radiação resultantes na população circunvizinha (HIROMOTO et al., 1999).

Ainda de acordo com HIROMOTO et al. (1999), ocorrem também situações em que os rejeitos não podem ser eliminados de imediato no meio ambiente, por apresentarem atividades acima daqueles limites, mas que são compostos por radionuclídeos cujas meias vidas são suficientemente curtas, para permitir a aplicação prática de armazenamento para decaimento e posterior descarte. A quantidade de rejeito que pode ser descartada na biosfera, sem consulta prévia à CNEN, está definida na norma CNEN (2008).

Uma representação esquemática do fluxo de rejeitos radioativos gerados nas usinas nucleares Angra 1 e 2 é mostrada na Fig. 1.1.

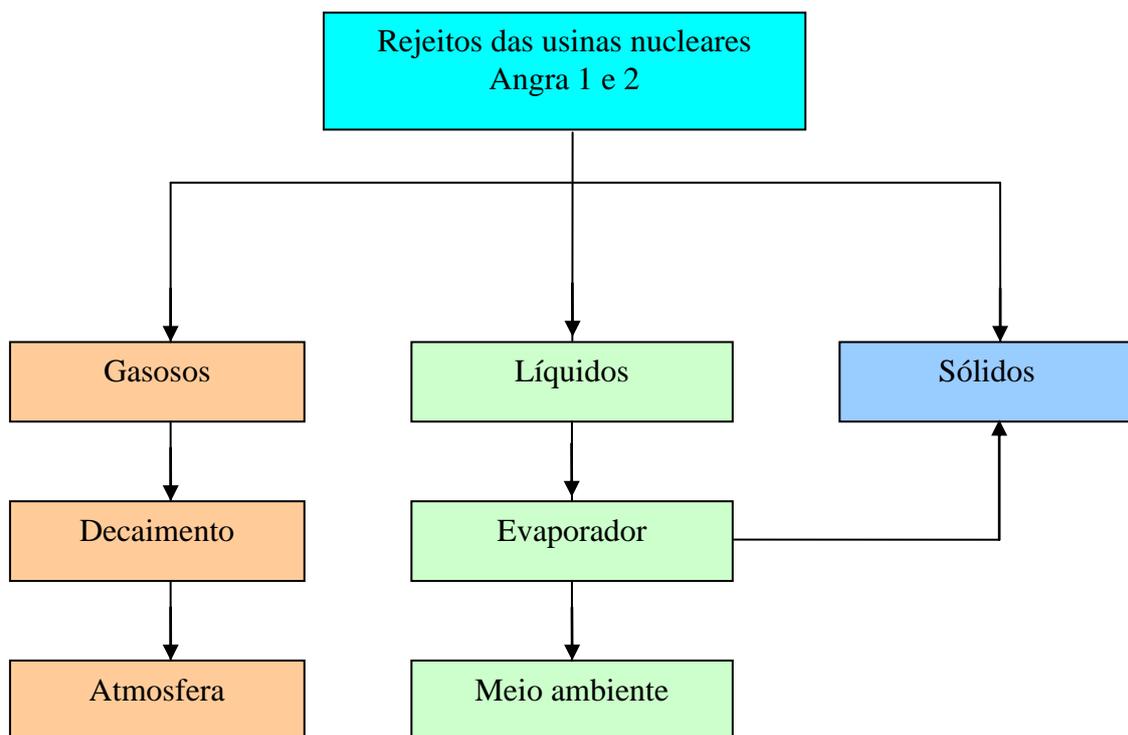


Figura 1.1 – Representação esquemática do fluxo de rejeitos radioativos gerados nas usinas nucleares Angra 1 e 2

Observa-se, com o auxílio da Fig. 1.1, que as usinas nucleares Angra 1 e 2 produzem rejeitos sólidos, líquidos e gasosos.

Os rejeitos gasosos, que são compostos basicamente de gases nobres e principalmente de ^{14}C , são conduzidos através de filtros de retardo (para a redução da atividade dos gases nobres, sendo indiferente para o ^{14}C , por possuir uma meia vida longa igual a aproximadamente 5730 anos), e são, posteriormente, lançados à atmosfera como efluentes gasosos. Embora o tempo de decaimento do ^{14}C seja muito longo, sua atividade nos efluentes gasosos de Angra 1 e 2 é muito baixa.

Os rejeitos líquidos, que são armazenados inicialmente em tanques de estocagem, são posteriormente processados em evaporadores, dando origem a um condensado de baixo nível de radiação, que, após monitoração, é lançado ao mar como efluente líquido. O outro produto resultante do processo de evaporação é o concentrado do evaporador, rejeito sólido que é armazenado em tanques de concentrado, localizados no interior da usina, para o posterior encapsulamento em tambores de aço de 200 litros, com matrizes de cimento (Angra 1) ou betume (Angra 2).

A dose radiológica em indivíduos do público, devido ao efeito conjunto da liberação de efluentes gasosos e líquidos provenientes de Angra 1 e 2 é da ordem de 10^{-8} Sv (DIAS, 2004), sendo 10^4 vezes inferior ao limite da CNEN (CNEN, 2011).

Os demais rejeitos sólidos produzidos nas usinas Angra 1 e 2 são os elementos combustíveis irradiados que ficam armazenados em piscinas com água, as resinas exauridas e filtros utilizados na purificação da água do sistema primário, as ferramentas, peças e vestuário contaminados, etc. Assim, observa-se que os rejeitos que não podem ser descartados na biosfera devem ser encaminhados inicialmente para armazenamento e posteriormente para a deposição.

O armazenamento compreende a estocagem provisória do rejeito radioativo em depósitos iniciais projetados e licenciados para esta finalidade (IAEA, 1998a). As atividades operacionais típicas para o armazenamento de rejeito são as rotinas operacionais de recebimento, processamento, enchimento, armazenamento, recuperação e preparação dos embalados de rejeito para a deposição. As atividades de suporte

compreendem: proteção radiológica, monitoração e vigilância, teste e exame dos embalados, inspeção de componentes da instalação de armazenagem, manutenção e reparo, colocação de rótulos e manutenção do registro dos embalados (IAEA, 2008).

É importante ressaltar que o rejeito radioativo, pronto para armazenamento e posterior deposição, está sempre na forma sólida (vide Fig. 1.1). Entretanto, o rejeito sólido pode conter pequenas quantidades de gases ou líquidos, de acordo com os critérios de aceitação definidas pelo órgão licenciador (CNEN, 2002).

A deposição ou estocagem final do rejeito radioativo é realizada em depósitos definitivos que recebem o nome de repositórios. Dentre os diversos tipos de projetos de repositórios existentes no mundo (IAEA, 2011), são de interesse para esta pesquisa apenas os denominados repositórios próximos à superfície, com cripta de concreto, que são apropriados para a deposição de rejeitos de baixo e médio níveis de radiação (CNEN, 1985).

Uma representação esquemática deste tipo de repositório é mostrada na Fig. 1.2.

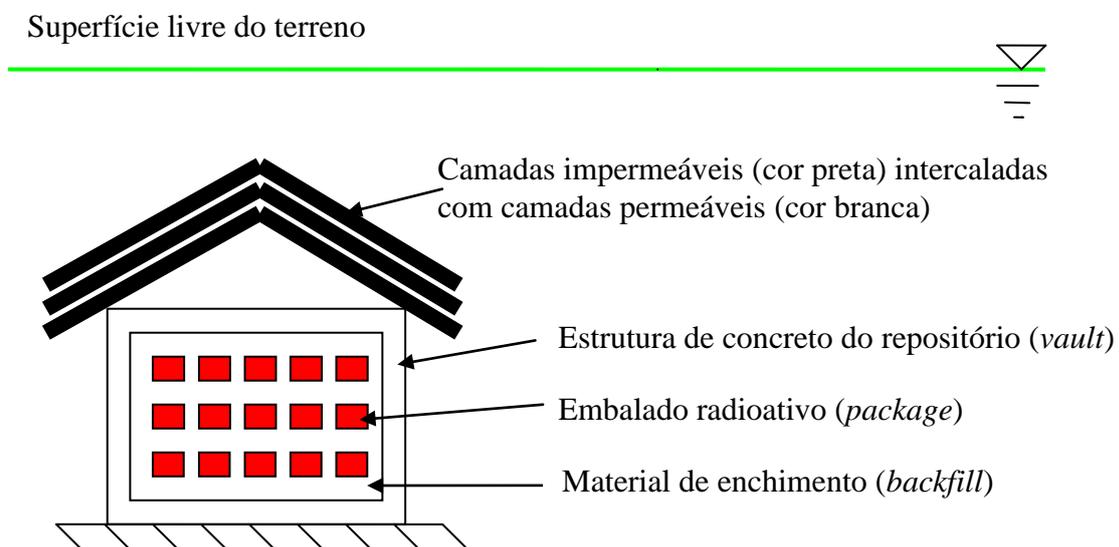


Figura 1.2 - Ilustração de um repositório próximo à superfície, com cripta de concreto

Observa-se, com o auxílio da Fig. 1.2, que o repositório contém uma estrutura subterrânea de concreto armado (*vault*), construída a uma profundidade que varia de alguns metros até algumas dezenas de metros abaixo do nível do solo. É no interior desta estrutura de concreto que são depositados os embalados com rejeito radioativo.

Os vazios entre os embalados radioativos são preenchidos com um material de enchimento (*backfill*) que possui dupla função, ou seja, aumentar a rigidez da região interna dessa estrutura e retardar a migração de radionuclídeos, no caso de infiltração de água em seu interior.

Acima do teto do repositório são instaladas barreiras de engenharia que consistem na colocação escalonada de camadas impermeáveis e permeáveis, para prevenir a infiltração de água proveniente da chuva ou da irrigação da camada de solo mais externa do repositório.

O único repositório de rejeitos radioativos construído no Brasil é o repositório de Abadia de Goiás (NUCLEN, 1996), localizado em Abadia de Goiás, a 22 km da cidade de Goiânia. É um repositório próximo à superfície que foi construído para a deposição dos rejeitos radioativos gerados no acidente radiológico de Goiânia, ocorrido em 1987 com uma cápsula de ^{137}Cs (IAEA, 1998b).

Tanto o projeto como o licenciamento de uma instalação radioativa desta natureza requerem análises de segurança, onde os diversos cenários de acidentes aplicáveis à instalação são levantados e analisados. Por ser uma instalação subterrânea e que fica a céu aberto, é imediata a consideração do cenário de acidente com infiltração de água em seu interior. Esta infiltração de água tem como consequência a liberação de material radioativo do repositório para a região externa ao mesmo, com a consequente migração dos radionuclídeos desde o repositório até o ponto de descarga no aquífero. Posteriormente, estes radionuclídeos podem migrar ao longo do aquífero até atingir poços de captação de água, podendo contaminar indivíduos do público pela utilização da água subterrânea. Este tipo de cenário de acidente é aqui analisado, para verificar qual é a influência na distância crítica do repositório (distância entre o ponto de descarga em atividade no aquífero e um poço que provoque um impacto radiológico em indivíduos do público igual ao limite da CNEN), quando a metodologia estocástica (apropriada para representar adequadamente a chuva como um processo estocástico) é utilizada em vez da determinística.

Uma evidência do emprego prático destas metodologias é obtida tomando-se como caso de estudo o repositório de Abadia de Goiás, mencionado anteriormente.

1.2 JUSTIFICATIVA

As justificativas gerais para a apresentação desta tese são:

- A lei federal nº 10.308 (BRASIL, 2001), em seu artigo 37, estabelece que a CNEN deverá iniciar estudos para a seleção de local, projeto, construção, licenciamento e entrada em operação, no prazo mais curto possível, de um depósito definitivo para rejeitos radioativos; e
- A Eletronuclear (ETN), como uma das empresas geradoras de rejeitos radioativos, tem interesse no desenvolvimento de soluções técnicas para a deposição do referido rejeito.

A justificativa específica para o estudo do cenário de infiltração de água no interior do repositório é apresentada por meio do esquema da Fig. 1.3.

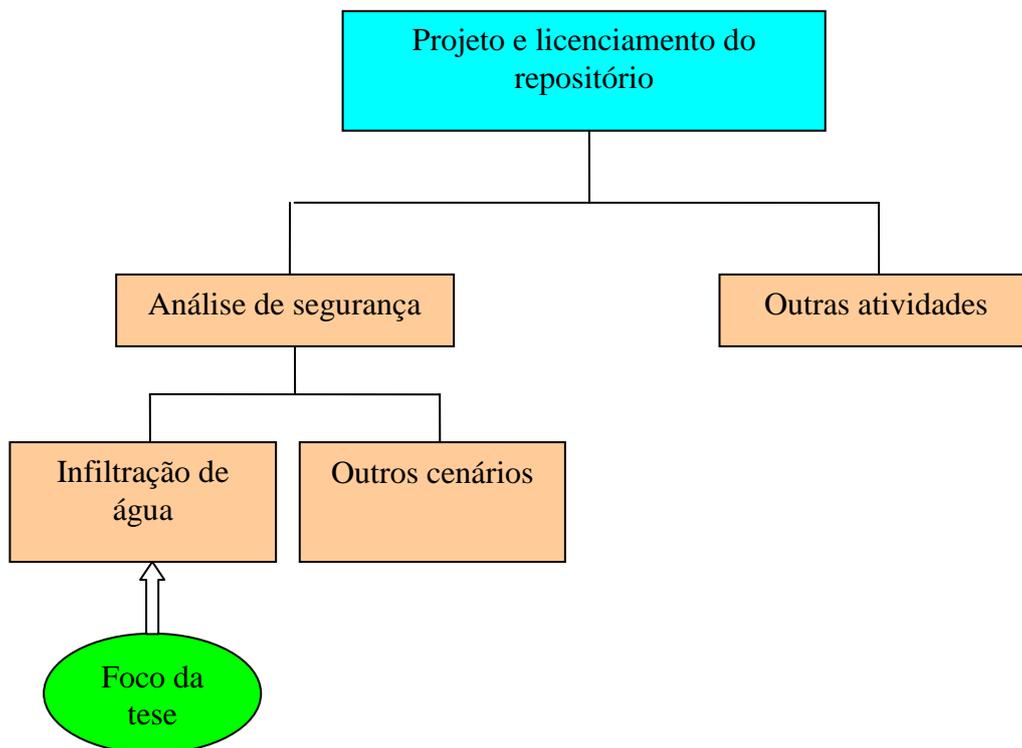


Figura 1.3 – Justificativa específica para o desenvolvimento da tese

Observa-se, com o auxílio da Fig. 1.3, que este cenário de infiltração de água, no interior do repositório, juntamente com os outros cenários de acidentes, são partes integrantes do projeto e licenciamento do mesmo.

1.3 OBJETIVO

O objetivo desta tese é apresentar a análise de segurança desenvolvida para um repositório próximo à superfície, para a deposição de rejeitos de baixo e médio níveis de radiação, sujeito a um cenário de acidente de infiltração de água em seu interior.

Esta análise de segurança é realizada utilizando-se modelos determinístico e estocástico, com o foco voltado para a determinação da distância crítica do repositório, x_{crit} , e na avaliação do impacto causado no valor desta distância crítica, quando a metodologia estocástica é utilizada em vez da determinística.

A distância crítica do repositório, x_{crit} , é definida nesta tese como a distância entre o ponto de descarga de radionuclídeos no aquífero (cuja localização coincide com uma das paredes laterais do repositório) e um poço de captação de água, com uma concentração em atividade de radionuclídeos capaz de provocar uma dose radiológica, em um indivíduo do público, igual ao limite de dose estipulado pelo órgão regulador (CNEN).

Normalmente, o estudo de um cenário de acidente, envolvendo radiação ionizante tem como produto final o valor da dose ou risco radiológico, determinado para um indivíduo do público.

Os valores encontrados de risco ou dose, no estudo do cenário, devem ser comparados com os valores limites adotados pela CNEN.

Se nas simulações realizadas, o impacto radiológico provocado pelo cenário de acidente em indivíduos do público for inferior ao limite do órgão regulador, o projeto poderá ser considerado adequado e seu licenciamento ocorrerá dentro dos trâmites

normais deste órgão. Caso contrário, as metodologias de cálculo e o projeto da instalação devem ser revisados.

Conforme mencionado na seção 1.1, uma evidência do emprego prático das metodologias determinística e estocástica é obtida neste trabalho, tomando-se como caso de estudo o repositório de Abadia de Goiás (NUCLEN, 1996).

O limite de impacto radiológico, provocado por este repositório em indivíduos do público, foi limitado pela CNEN em termos da dose radiológica anual, em 20 mSv (CNEN, 1991).

É importante observar que a dose radiológica recebida por um indivíduo do público, em um acidente de infiltração de água no interior do repositório, é diretamente proporcional à concentração em atividade de radionuclídeos no aquífero (ALVES & PASSOS, 2003). Sob um ponto de vista mais geral, observa-se que a dose radiológica é diretamente proporcional à atividade de radionuclídeos (JAEGER, 1960).

Por outro lado, deve-se chamar a atenção para o fato de que o valor desta concentração em atividade diminui com o aumento da distância entre o poço de captação de água e o repositório. Isto ocorre principalmente devido ao fenômeno da sorção (RANÇON, 1972; ALVES & PASSOS, 2003; IAEA, 2003) que retarda a migração do radionuclídeo no meio poroso. Como pode ser visto em ALVES & PASSOS (2003), a concentração em atividade ao longo do aquífero diminui exponencialmente com o aumento da distância entre o poço e o repositório.

Para os caminhos de dose considerados no RFAS do repositório de Abadia de Goiás (NUCLEN, 1996) e para uma dose anual igual a 20 mSv (CNEN, 1991), obtém-se um valor de concentração em atividade no aquífero igual a $7,42 \times 10^3$ Bq/m³. Esta concentração em atividade limite é chamada de concentração crítica, C_{crit} , e a distância entre o poço e o repositório, que produz esta concentração crítica, é a distância crítica, x_{crit} , já definida anteriormente.

Baseado na explanação anterior, observa-se que adotar um limite de dose anual igual a 20 mSv para o repositório de Abadia de Goiás, é o mesmo que adotar um limite de concentração em atividade no aquífero igual a $7,42 \times 10^3$ Bq/m³.

Sob este ponto de vista, adota-se como parâmetro de referência, para a análise de segurança desenvolvida nesta tese, a concentração crítica em atividade no aquífero, mencionada anteriormente.

No tocante ao limite de dose radiológica para repositórios de rejeitos radioativos, é importante ressaltar que atualmente não é mais recomendado um limite de dose anual igual a 20 mSv.

A CNEN estabelece que, como condição limitante do processo de otimização da proteção radiológica em uma instalação, deve ser adotado um valor máximo de 0,3 mSv para a restrição da dose efetiva anual média para indivíduos do grupo crítico, referente à liberação de efluentes (CNEN, 2011).

O documento IAEA (2011) recomenda, em seu capítulo 2 (sobre proteção ao público e ao meio ambiente), que, no período de encerramento do repositório (*post-closure period*), a dose limite para membros do público para doses oriundas de todas as situações de exposição planejadas seja uma dose efetiva anual igual a 1 mSv. Esta dose anual e seu risco equivalente são considerados critérios que não podem ser excedidos no futuro.

Para situações envolvendo processos naturais com menor probabilidade de ocorrência, onde se insere o acidente com infiltração de água no interior do repositório, o documento IAEA (2011) recomenda a utilização dos limites de dose efetiva anual e risco radiológico iguais a 0,3 mSv e 10^{-5} fatalidades/ano, respectivamente.

Assim, observa-se que, com base nos documentos CNEN (2011) e IAEA (2011), o limite de dose efetiva anual, para repositórios de rejeitos radioativos, deve ser atualmente igual a 0,3 mSv.

Esclarecida a questão sobre o limite atual de dose efetiva anual para um repositório de rejeitos radioativos, pode-se afirmar que nesta tese se pretende:

- determinar a concentração em atividade ao longo do aquífero, devido ao vazamento de material radioativo de um repositório próximo à superfície, sujeito a um acidente de infiltração de água em seu interior, utilizando-se modelos determinísticos e estocásticos;
- comparar os valores calculados, para a concentração em atividade ao longo do aquífero, com a concentração crítica, que, para o repositório de Abadia de Goiás, é igual a $7,42 \times 10^3$ Bq/m³;
- identificar o poço que possui valor de concentração em atividade igual à concentração crítica, e verificar a que distância ele está do repositório. Esta distância é a distância crítica, x_{crit} , mencionada anteriormente;
- verificar o impacto no valor de x_{crit} , quando a metodologia determinística é substituída pela metodologia estocástica.

Na Fig. 1.4 são mostrados os parâmetros que compõem o cenário original de infiltração de água no interior do repositório de Abadia de Goiás (NUCLEN, 1996).

Com base nesta figura, observa-se que o parâmetro de referência utilizado para o licenciamento deste repositório foi a dose radiológica em um indivíduo do público.

Ao se adotar nesta tese, a concentração crítica em atividade no aquífero, como parâmetro de referência para a análise de segurança, torna-se desnecessário o cálculo da dose radiológica em um indivíduo do público. Assim, os parâmetros da Fig. 1.4 que são de interesse para este trabalho estão dentro do retângulo vermelho desta figura.

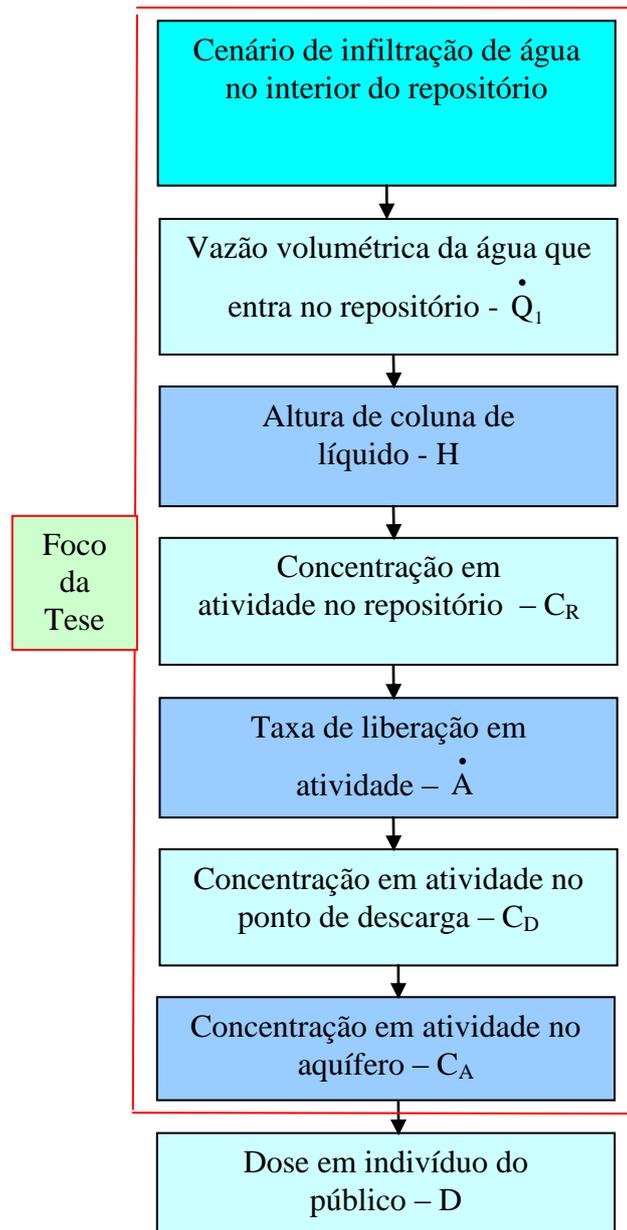


Figura 1.4 – Parâmetros que compõem o cenário original de infiltração de água no repositório de Abadia de Goiás

A concentração em atividade ao longo do aquífero pode ser determinada, seguindo-se o fluxograma apresentado na Fig. 1.4.

De acordo com esta figura, devem ser determinados sequencialmente os seguintes parâmetros por metodologia determinística e estocástica, antes do cálculo da concentração em atividade no aquífero:

- Vazão volumétrica de água que entra no repositório;

- Altura de coluna de líquido no interior do mesmo;
- Concentração em atividade dentro do repositório;
- Taxa de liberação em atividade do repositório para o aquífero; e
- Concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero.

Após a determinação da concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero, pode-se determinar a concentração em atividade, C_A , ao longo deste, conforme mostrado na Fig. 1.5.

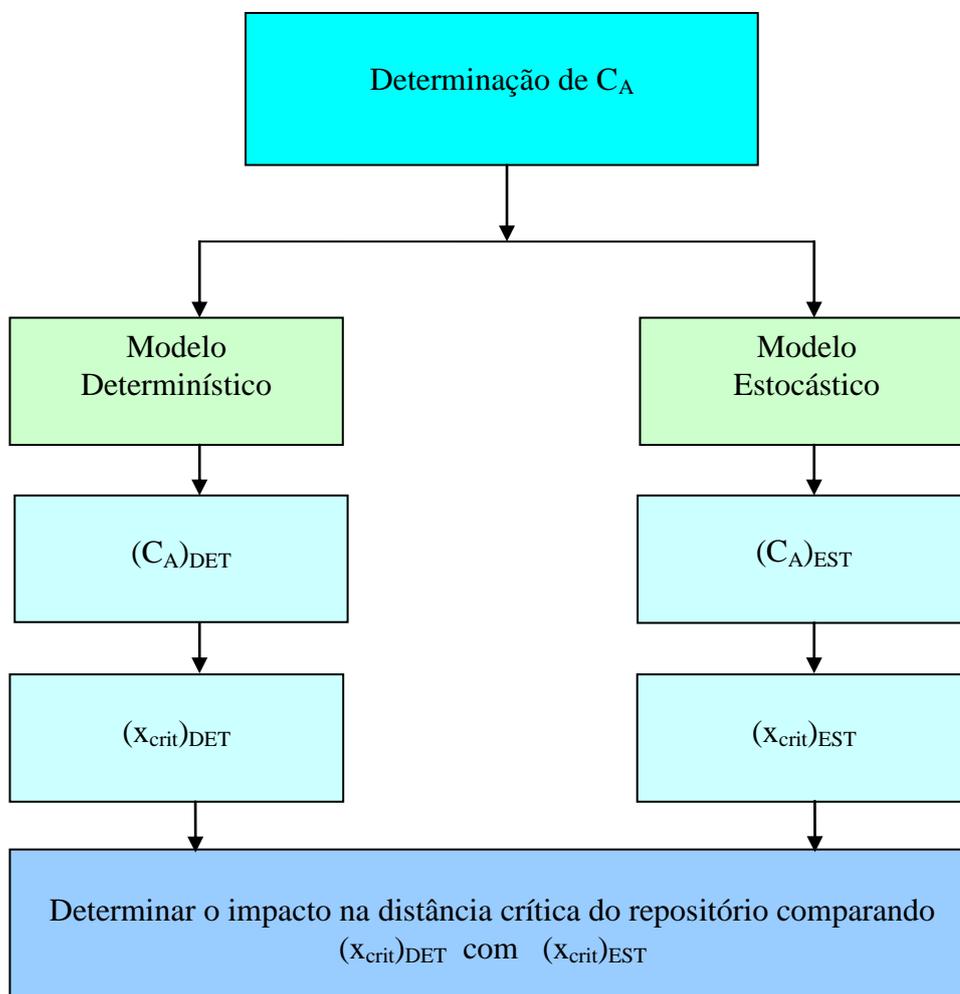


Figura 1.5 – Estratégia utilizada nesta tese para a confrontação entre os modelos determinístico e estocástico

Na Fig. 1.5 é mostrada a determinação da concentração em atividade ao longo do aquífero, C_A , utilizando-se um modelo determinístico, $(C_A)_{DET}$, e um estocástico, $(C_A)_{EST}$.

Após a determinação desses parâmetros, pode-se determinar a distância crítica do repositório, x_{crit} , referente ao modelo determinístico, $(x_{crit})_{DET}$, e referente ao modelo estocástico, $(x_{crit})_{EST}$, uma vez que existe uma relação biunívoca entre a concentração em atividade no aquífero e a distância compreendida entre o poço e o repositório.

Com a obtenção dos valores de $(x_{crit})_{DET}$ e $(x_{crit})_{EST}$, pode-se avaliar qual é o impacto no valor da distância crítica do repositório de Abadia de Goiás, quando a metodologia estocástica é utilizada em vez da determinística.

A distância crítica de um repositório é muito importante para o seu licenciamento, pois é o parâmetro que indica qual deve ser a área mínima em seu entorno, definindo os limites mínimos para o sítio da instalação.

Assim, se várias metodologias são utilizadas para a determinação da distância crítica de um repositório, então, sob um ponto de vista conservador, deve-se adotar para o seu licenciamento o maior valor encontrado para este parâmetro, evitando com isso, a perfuração de poços em locais do aquífero, onde a concentração em atividade possa ser maior que a concentração crítica.

1.4 MOTIVAÇÃO, ORIGINALIDADE E RELEVÂNCIA

As motivações para a apresentação desta tese são:

- Agregar à experiência adquirida no desenvolvimento de modelos determinísticos o desenvolvimento de modelos estocásticos, para a análise de segurança da infiltração de água no interior de um repositório próximo à superfície; e

- Auxiliar a Eletronuclear nas tomadas de decisões futuras, no tocante à deposição dos rejeitos de baixo e médio nível de radiação, gerados pela empresa.

A originalidade desta tese se encontra:

- Na aplicação de modelagem estocástica, com obtenção e solução de equações diferenciais estocásticas, no estudo de um cenário de infiltração de água no interior de um repositório próximo à superfície;
- Na modelagem da altura de coluna de líquido, no interior de um repositório, H , determinística e estocasticamente;
- No desenvolvimento de dois modelos determinísticos analíticos para a determinação da concentração em atividade ao longo do aquífero, C_A , apresentados nos Apêndices A e B;
- No desenvolvimento de dois modelos estocásticos, um analítico e outro numérico, para a determinação da concentração em atividade ao longo do aquífero, C_A , apresentados nos Apêndices D e E, respectivamente;
- Na consideração de vazamento de mistura (água + radionuclídeos) pelas paredes laterais do repositório;
- Na obtenção de uma equação para a vazão volumétrica de mistura, que sai pelas paredes laterais do repositório, utilizando-se as equações de Navier-Stokes;
- Na consideração da pressão manométrica na equação de Richards (SIMUNEK & VAN GENUCHTEN, 2008), para a obtenção da equação diferencial da altura de coluna de líquido, no interior do repositório;

- Em mostrar que, na modelagem estocástica da infiltração de água no interior do repositório, os balanços de líquido em seu interior, são governados por equação diferencial estocástica de Ito;
- Em mostrar que, para o caso específico do repositório de Abadia de Goiás, os modelos determinístico e estocástico, para o balanço de massa no interior do repositório, são equivalentes; e
- Em mostrar que a importância dos termos estocásticos, nas equações diferenciais estocásticas pode ser avaliada pela definição de números adimensionais.

A relevância deste trabalho é considerada como:

- Relevância científica ao se modelar adequadamente a chuva, parâmetro fundamental no estudo de infiltração de água em um repositório, como um processo estocástico e ao se obter equações diferenciais estocásticas que são resolvidas utilizando-se o cálculo estocástico de Ito;
- Ainda como relevância científica pode-se mencionar o fato de que o mesmo problema é resolvido determinística e estocasticamente, permitindo uma comparação coerente entre estas metodologias; e
- Relevância técnica ao deixar como legado aplicativos de cálculo, que permitem a realização de simulações, envolvendo a infiltração de água em repositório próximo à superfície. Estes aplicativos podem ser úteis em futuras discussões entre a ETN e a CNEN, no tocante à deposição dos rejeitos radioativos gerados pela empresa.

1.5 METODOLOGIA E ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO

Em AGUIAR (2006) é mencionado que de acordo com a IAEA (2004a), a avaliação de segurança de deposição de rejeitos radioativos pode ser realizada por análises determinística e/ou probabilística.

Na análise determinística, é realizada uma simulação do comportamento do sistema utilizando grupos de parâmetros, eventos e aspectos, metodologia da IAEA (2004a, 2004b) que utiliza como base as FEP – *Features, Events and Processes*. Exemplos deste tipo de análise são encontrados em NUCLIN (1996), HUNG(2000), ROOD (2003) e PONTEDEIRO (2006).

Já na análise probabilística (AGUIAR, 2006; AGUIAR et al., 2007), os valores dos parâmetros, eventos e aspectos estão associados a distribuições de probabilidade. Nesta análise, alguns problemas físicos podem ser melhor modelados com a consideração de alguns efeitos aleatórios, recaindo na obtenção de dois tipos diferentes de equações diferenciais, ou seja, as aleatórias e as estocásticas (ABUKHALED, 1995). De acordo com este autor, as soluções das equações diferenciais aleatórias são processos estocásticos regulares, cujas trajetórias são funções diferenciáveis. Já no caso das equações diferenciais estocásticas, isso não ocorre, pois as soluções são processos estocásticos irregulares que não possuem derivadas, por conterem normalmente o ruído branco gaussiano (ROSS, 2007). As probabilidades associadas aos processos estocásticos, que são soluções dessas equações diferenciais aleatórias e estocásticas, podem ser determinadas utilizando-se as equações de Fokker-Planck (HOTTOVY, 2011) associadas.

Assim, se, por exemplo, o nível de água de um lago for função do tempo e representado por uma equação diferencial estocástica, então a solução desta equação fornecerá os valores de nível de água do lago para cada valor de tempo, enquanto a solução da equação de Fokker-Planck (associada à equação diferencial estocástica) fornecerá os valores de probabilidade para cada valor de nível.

Se a finalidade do estudo for verificar as consequências desfavoráveis do transbordamento do lago, então é conservador considerar que a probabilidade seja igual a 1 para todos os valores de nível de água do lago, simplificando a modelagem matemática.

Desta forma, observa-se que na análise probabilística os parâmetros, eventos e aspectos podem ser determinados utilizando-se ou não as distribuições de probabilidades. Obviamente, que, quando as distribuições de probabilidades não são incluídas nas análises, estas devem ser realizadas com base em valores conservadores dos processos estocásticos considerados.

Nesta tese, são utilizadas as metodologias determinística e estocástica para a análise de segurança de um cenário de infiltração de água no interior de um repositório próximo à superfície, sem a utilização de distribuições de probabilidades, pois a sua inclusão iria aumentar consideravelmente o escopo desta tese.

O parâmetro fundamental que indica se a metodologia empregada é determinística ou estocástica é a taxa de precipitação pluviométrica, \dot{p} , do local do repositório. Se este parâmetro for tratado como uma variável determinística, então a metodologia será determinística; caso contrário, a metodologia será estocástica, conforme mostrado na Fig. 5.6.

Na metodologia determinística considera-se que a taxa de precipitação pluviométrica, \dot{p} , do local do repositório, é representada por um valor médio, \dot{p}_m , para cada instante de tempo t .

Já na metodologia estocástica a referida taxa de precipitação pluviométrica, \dot{p} , é representada pela soma de uma parte determinística, \dot{p}_m , com um ruído estocástico, ε .

Aplicações das metodologias determinística e estocástica são mostradas em detalhes nos Apêndices A, B, C, D e E.

Um parâmetro importante que serve para classificar os modelos matemáticos desenvolvidos é o tipo de vazamento adotado para o repositório. Aqui são considerados os vazamentos dos tipos 1 e 2, descritos no item 2.3 desta tese.

A organização deste trabalho é feita da maneira descrita a seguir:

No Capítulo 2 é proposto o problema que será tratado nesta tese, onde são apresentados os comentários gerais, a descrição do problema, os tipos de vazamentos e a solução do problema proposto.

O Capítulo 3 contém uma revisão bibliográfica do estado da arte para o problema tratado nesta tese.

Os fundamentos teóricos são apresentados no Capítulo 4. Neste capítulo são apresentados os comentários gerais juntamente com as definições de variável determinística, variável aleatória, caminho aleatório, processos estocásticos (Markov, Levy, Wiener e Ito), ruído branco gaussiano, equação diferencial de Ito (geral, equação diferencial linear de Ito, solução geral da equação diferencial linear de Ito), Lema de Ito, equação do movimento browniano geométrico (MBG), equação de Langevin, o conjunto σ -álgebra, definição de alguns tipos de funções, integrais determinísticas, integrais estocásticas, cálculo estocástico e métodos numéricos para a solução de equações diferenciais ordinárias (geral, método de Runge-Kutta de 4ª ordem e método de Euler-Maruyama). São abordadas ainda, neste capítulo, as definições de consistência, convergência e estabilidade para o referido método de Euler-Maruyama.

No Capítulo 5, é apresentada a modelagem matemática desenvolvida neste trabalho. Ela permite ter uma visão geral do estudo da infiltração de água no interior do repositório (geral, modelo determinístico e modelo estocástico).

A apresentação e análise dos resultados estão contidas no Capítulo 6.

No Capítulo 7 são mostradas as conclusões e sugestões desta tese e, posteriormente, são apresentadas as referências bibliográficas mencionadas neste trabalho.

Ao todo são utilizados 6 apêndices:

- Apêndices A e B contendo os desenvolvimentos matemáticos dos modelos determinísticos 1 (com vazamento do tipo 1) e 2 (com vazamento do tipo 2), respectivamente;
- Apêndice C mostrando as soluções de algumas integrais de Riemann-Stieltjes do modelo determinístico 2 (Apêndice B);
- Apêndices D e E apresentando os desenvolvimentos dos modelos estocásticos 1 (com vazamento do tipo 1) e 2 (com vazamento do tipo 2), respectivamente, e;
- Apêndice F contendo um estudo de consistência, convergência e estabilidade para a utilização do método de Euler-Maruyama, na solução de um processo estocástico de Ito.

2. PROPOSIÇÃO DO PROBLEMA

2.1 GERAL

O problema tratado nesta tese pode ser classificado como um problema de análise de segurança nuclear, inserido na área de gerenciamento de rejeitos radioativos, se restringindo aos rejeitos sólidos com baixo e médio níveis de radiação, no tocante à sua deposição (estocagem final).

2.2 DESCRIÇÃO DO PROBLEMA

O problema tratado nesta tese se refere à análise de segurança de um repositório próximo à superfície, destinado à deposição (estocagem final) de rejeitos radioativos de baixo e médio níveis de radiação (CNEN, 1985).

Considera-se como parâmetro de referência, para esta análise de segurança, a concentração em atividade de radionuclídeos ao longo do aquífero, que pode ser utilizada como um indicador da dose radiológica recebida por indivíduos do público (NUCLEN, 1996), em um cenário de acidente de infiltração de água no interior do repositório.

Num cenário de acidente desta natureza, considera-se que a água proveniente da chuva e da própria irrigação da cobertura do repositório, pode infiltrar-se no interior do mesmo, através de trincas existentes no teto, entrar em contato com o rejeito radioativo, provocar a sua liberação para a região externa ao repositório, cair no aquífero, atingir poços de captação de água e chegar até o homem via diversos caminhos (*pathways*) de dose.

Como exemplo, se um fazendeiro retira água de um poço contaminado para irrigar uma plantação de vegetais, para depois vendê-los em um mercado para consumo humano, estará utilizando o caminho de dose ilustrado na Fig. 2.1.



Figura 2.1 – Exemplo de um caminho de dose

Nos diversos caminhos de dose considerados no acidente, observa-se que existe uma relação biunívoca entre a concentração em atividade na água do poço e a dose recebida por um indivíduo do público.

Assim, conhecendo-se o limite de dose para indivíduos do público, estipulado pelo órgão licenciador, para o local do repositório, e definindo-se os caminhos de dose aplicáveis ao cenário de acidente em estudo, pode-se determinar o correspondente limite para a concentração em atividade na água do poço, que é denominada concentração crítica, C_{crit} .

Conforme mencionado anteriormente, a distância compreendida entre o repositório e um poço que tenha concentração crítica, é chamada distância crítica do repositório, x_{crit} .

A definição de uma distância crítica para o repositório tem como consequência a delimitação de uma área para o sítio do repositório, onde não é permitida a abertura de poços, nos quais a concentração em atividade na água seria maior que a concentração crítica.

Desta forma, um bom projeto de repositório, no tocante ao cenário de acidente de infiltração de água em seu interior, é aquele em que a abertura de poços fora de seu sítio, não provocaria impactos radiológicos em indivíduos do público, acima dos permitidos pelo órgão licenciador. Em outras palavras, é o mesmo que afirmar que todos os poços fora do sítio do repositório teriam concentração em atividade inferior à concentração crítica, C_{crit} .

Como a concentração em atividade na água do poço e sua distância em relação ao repositório podem ser determinadas por metodologias determinística e estocástica, observa-se que a área delimitada para o sítio do repositório pode ser fortemente influenciada pela metodologia escolhida.

Sob este ponto de vista, pretende-se, nesta tese, determinar a concentração em atividade ao longo do aquífero, utilizando-se as metodologias determinística e estocástica, e verificar qual seria o impacto na distância crítica do repositório, quando a metodologia determinística é substituída pela estocástica (supostamente mais adequada por a chuva ser um processo estocástico).

Resumidamente, a resolução do problema tratado nesta tese considera:

- Utilizar o repositório de Abadia de Goiás como referência para aplicação prática das metodologias determinística e estocástica, desenvolvidas nesta tese;
- Determinar a concentração em atividade ao longo do aquífero, C_A , para liberações radioativas oriundas de um repositório próximo à superfície, destinado à deposição de rejeitos de médio e baixo níveis de radiação, em um cenário de acidente com infiltração de água em seu interior. O problema deve ser resolvido utilizando-se metodologias determinística e estocástica, para os dois tipos de vazamentos mostrados na Fig. 2.2;
- Com base nos valores de C_A , determinar os valores da distância crítica do repositório, x_{crit} , relativos às metodologias; e
- Comparar entre si os valores de x_{crit} para verificar qual é o impacto neste parâmetro, quando a metodologia determinística é substituída pela estocástica, considerada apropriada para modelar corretamente a chuva como um processo estocástico (LEE et al., 2001).

2.3 TIPOS DE VAZAMENTOS CONSIDERADOS NO PROBLEMA

Os tipos de vazamentos considerados no cenário de infiltração de água no interior do repositório são apresentados na Fig. 2.2.

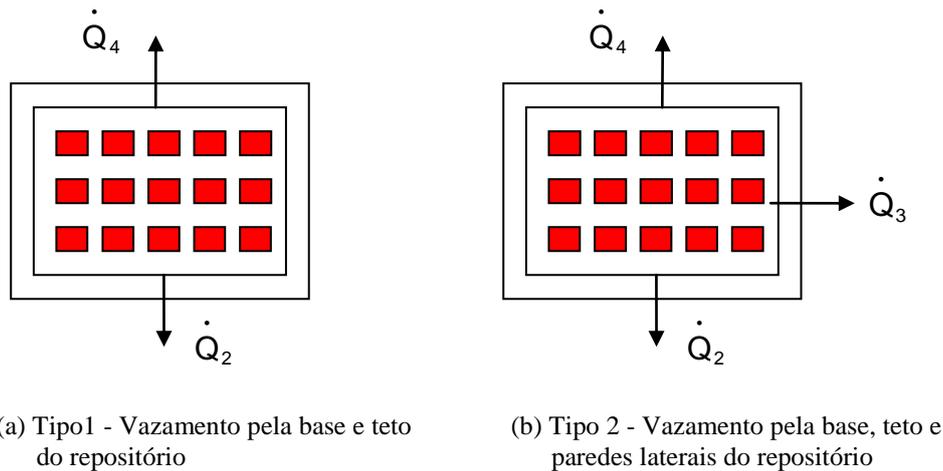


Figura 2.2 – Tipos de vazamento em atividade considerados no problema

Na Fig. 2.2-(a) são mostrados os vazamentos de material radioativo pela base e pelo teto (no caso de transbordamento) do repositório, com vazões volumétricas iguais a \dot{Q}_2 e \dot{Q}_4 , respectivamente. Além destes vazamentos, é considerado ainda, na Fig. 2.2-(b), o vazamento de material radioativo pelas paredes laterais do repositório, com vazão volumétrica igual a \dot{Q}_3 .

Considera-se, nesta tese, que a água proveniente da chuva e irrigação penetra no interior do repositório devido a trincas existentes no teto, formadas durante um período de degradação e envelhecimento do concreto. Admite-se, também, que por estas trincas passará a mistura formada por água e radionuclídeos, no caso de transbordamento (*overflow*) do repositório. Finalmente, considera-se que o vazamento de material radioativo do repositório para o meio ambiente ocorrerá através dos poros existentes na base e paredes laterais de concreto do repositório.

2.4 SOLUÇÃO DO PROBLEMA PROPOSTO

O problema descrito na seção 2.2 é resolvido, neste trabalho, com o desenvolvimento de modelos matemáticos (vide Capítulo 5), que são inseridos em programas de computador, conforme o diagrama esquemático da Fig. 2.3.

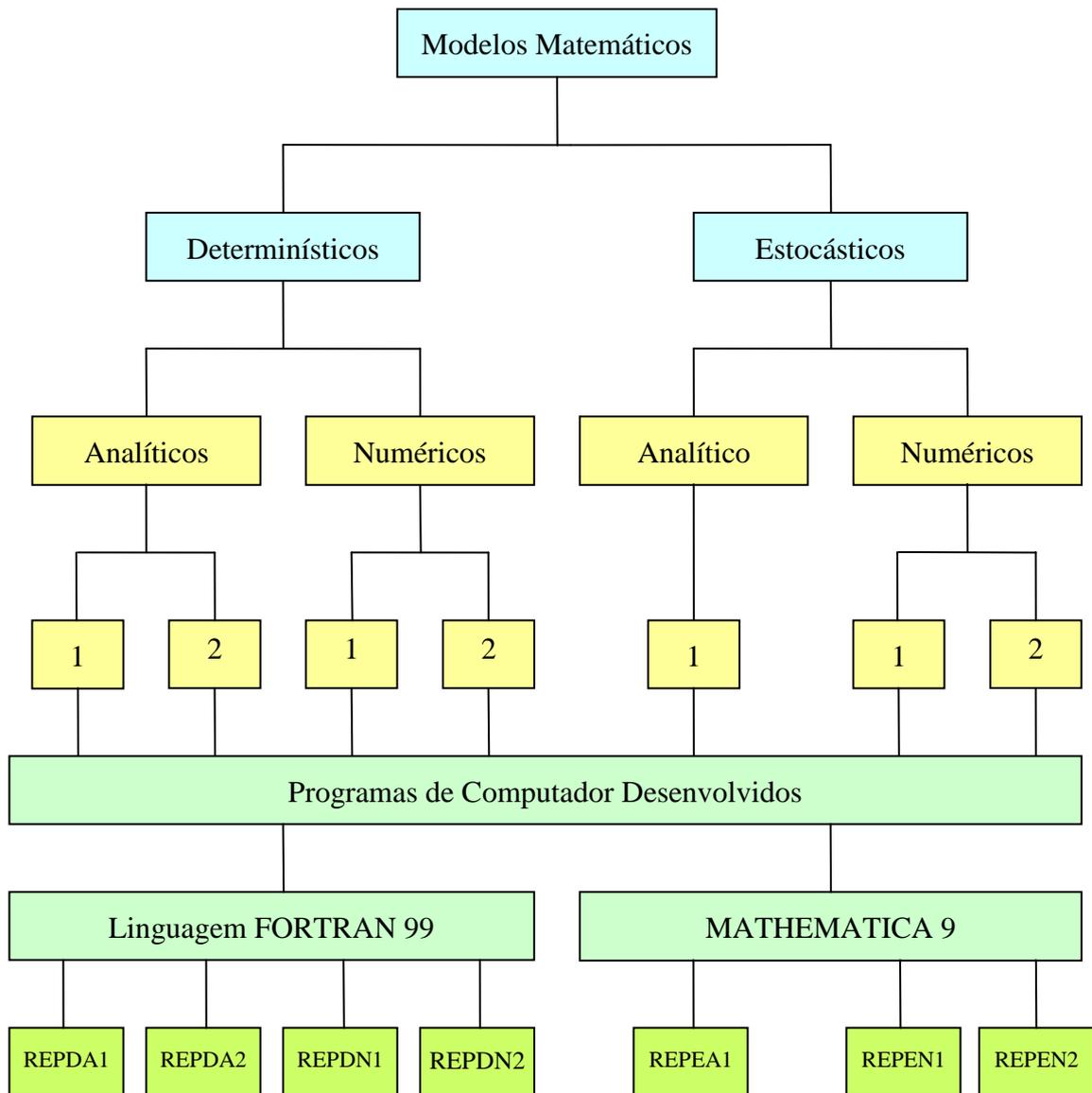


Figura 2.3 – Diagrama esquemático dos modelos matemáticos e programas de computador desenvolvidos nesta tese

De acordo com o diagrama na Fig. 2.3, os modelos matemáticos desenvolvidos nesta tese se dividem em: determinísticos e estocásticos. Os modelos determinísticos são de dois tipos: analíticos, que são apresentados nos Apêndices A (modelo determinístico 1) e B (modelo determinístico 2) desta tese, e numéricos, onde as equações diferenciais destes apêndices são resolvidas numericamente pelo método de Runge-Kutta de 4ª ordem (BUTCHER, 1996 e VALLE, 2012).

Os modelos estocásticos são apresentados nos Apêndices D e E.

O modelo estocástico 1, apresentado no Apêndice D, é resolvido analiticamente com a utilização das Eqs. (4.16), (4.17) e (4.18), apresentadas em ARCHAMBEAU (2014) e CYGANOWSKI (1993), e numericamente pelo método de Euler-Maruyama (KLOEDEN & PLATEN, 1999; SAUER, 2012).

Já o modelo estocástico 2 (Apêndice E) é resolvido apenas numericamente com a utilização do referido método de Euler-Maruyama.

Dependendo das condições de vazamento consideradas no problema (vide Fig. 2.2), todos os modelos desenvolvidos são classificados como do tipo 1 ou do tipo 2.

Nos modelos do tipo 1, considera-se que o vazamento de material radioativo do repositório para o meio ambiente ocorre pela base e pelo teto do repositório. É evidente que o vazamento de material radioativo pelo teto do repositório ocorrerá somente em caso de transbordamento do mesmo. Já nos do tipo 2, considera-se, além dos vazamentos citados anteriormente, o vazamento de material radioativo pelas paredes laterais do repositório.

A utilização de soluções numéricas para os casos em que a solução analítica é disponibilizada tem como objetivo verificar se as soluções analíticas estão corretas.

3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Registros arqueológicos indicam que estudos hidrológicos já eram realizados no Egito, Mesopotâmia, Índia e China há mais de 3000 anos a.C. (JONES et al., 1963).

Entretanto, o primeiro estudo de relevância sobre o escoamento de líquidos em meios porosos pode ser atribuído ao francês Henry Darcy, cujo trabalho experimental sobre o escoamento de água em leitos de areia foi publicado em 1856. Este trabalho deu origem à chamada lei de Darcy para meios porosos ao estabelecer que a velocidade de descarga da água em um regime de escoamento laminar é diretamente proporcional ao gradiente hidráulico do sistema. O estudo de DARCY (1856) também representa a base científica para o estudo da permeabilidade de meios porosos utilizados em ciências da terra.

Darcy empregou uma fórmula matemática para descrever o escoamento de água no meio poroso, muito semelhante à desenvolvida por Jean Baptiste Fourier para a condução de calor em um meio (FOURIER, 1822). Esta semelhança reside no fato de que, segundo a lei de Fourier, o fluxo de calor em uma determinada direção é proporcional ao gradiente de temperatura nesta mesma direção e em sentido oposto.

Aproximadamente meio século depois, em 1907, o americano Edgar Buckingham publicou, no Boletim 38 do Departamento de Agricultura do Solo dos Estados Unidos da América, estudos para o movimento de mistura em solos. Em BUCKINGHAM (1907), pela primeira vez, o movimento da água em solos não-saturados foi discutido no âmbito de rigorosos princípios físicos, ajudando a melhorar a agricultura com estudos quantitativos de umidade do solo. De acordo com ISRAELSEN (1927), a equação para escoamento não-saturado apresentada por BUCKINGHAM (1907) pode ser considerada como uma extensão da lei de Darcy, onde a única diferença estaria no fato de que o americano considerou a condutividade hidráulica (VAN GENUCHTEN, 1978) como uma função do conteúdo de água do solo.

Quatro anos mais tarde, GREEN & AMPT (1911) obtiveram a primeira equação, baseada em fundamentos físicos, para descrever a infiltração de água no solo. O modelo apresentado por esses autores tem sido objeto de considerável desenvolvimento na física

de solo aplicada e na hidrologia, devido a sua simplicidade e desempenho satisfatório para uma grande variedade de problemas hidrológicos.

No ano de 1931, o cientista americano Lorenzo Adolph Richards publicou a sua tese de doutoramento sobre a condução capilar de líquido através de meios porosos. A equação apresentada por RICHARDS (1931), para meios porosos não-saturados, é atualmente conhecida como equação de Richards, sendo a equação mais completa para o estudo de escoamento de fluido em meios porosos não-saturados, quando são desprezados, no escoamento, os efeitos da compressibilidade do líquido e do solo.

Soluções da equação de Richards são encontradas em KUMAR (1988), SRIVASTAVA & JIM YEH (1991), KELLEY et al. (1995), PARLANGE et al. (1999), HUNG (2000) e ROOD (2003).

Em KUMAR (1988) a equação de Richards é resolvida numericamente pelo método de diferenças finitas, para um meio poroso não-saturado, considerando-se um escoamento unidimensional de fluido, dependente do tempo. São apresentadas soluções para 5 (cinco) diferentes tipos de esquemas de discretização das malhas.

SRIVASTAVA & JIM YEH (1991) apresentam soluções analíticas para a equação de Richards considerando o escoamento de fluido em meio homogêneo e formado por várias camadas. Também neste caso, o estudo é desenvolvido para escoamento de fluido unidimensional e transiente, em meios porosos não-saturados.

A equação de Richards é resolvida numericamente em KELLEY et al. (1995), também para escoamento transiente e unidimensional do fluido, porém, utilizando-se o método de linhas, um método geral para a solução de equações diferenciais parciais (HAMDI et al., 2007).

Em PARLANGE et al. (1997, 1999), são propostas soluções analíticas para a equação de Richards, utilizando-se métodos de expansão em série de polinômios. Com esta técnica, são realizados estudos de infiltração de líquido em meios porosos não-saturados. Como nos casos anteriores, considera-se que o escoamento do fluido seja transiente e unidimensional.

Soluções numéricas da equação de Richards, para escoamentos unidimensional e transientes, em meios porosos não-saturados, constam de HUNG (2000) e ROOD (2003). Estes autores consideram a equação de Richards na forma de balanços de fluido na direção vertical, na entrada e na saída de um volume de controle representativo de um repositório de rejeitos radioativos. Assim, a quantidade de água no poro é representada por uma equação diferencial ordinária no tempo, que é resolvida pelo método de Runge-Kutta de quarta ordem, cujas características são relatadas em BUTCHER (1996). Com os valores da quantidade de água no poro, estes autores determinam a condutividade hidráulica e, conseqüentemente, as vazões de fluido que saem pela base do repositório.

Quando os efeitos da compressibilidade do solo e do líquido são levados em consideração no escoamento de fluidos em meios porosos não-saturados, a equação de transporte para esse tipo de escoamento assume uma forma mais geral do que aquela apresentada originalmente por RICHARDS (1931). Neste caso, a equação de transporte deve conter os coeficientes de compressibilidade do fluido e do solo, como mostrado em REEVES & DUGUID (1975), ANSI/ANS-2.17 (1980), COGHO & BOTHA (1984) e ZARADNY (1993).

REEVES & DUGUID (1975) apresentam o relato de estudo desenvolvido pelo Laboratório Nacional de Oak Ridge para a Comissão de Energia Atômica dos Estados Unidos da América, com o objetivo de desenvolver um modelo numérico para o escoamento bidimensional e transiente de fluido em meios porosos saturados e não-saturados. Neste trabalho, os autores mostram todo o desenvolvimento matemático para a obtenção da equação de transporte de fluido em meios porosos e, posteriormente, resolvem esta equação a 2 dimensões, utilizando-se a geometria de elementos finitos, com integração espacial pelo método de Galerkin e eliminação gaussiana para a solução das matrizes das equações.

Em ANSI/ANS-2.17 (1980) é reproduzida a equação de transporte de fluido em meios porosos obtida por REEVES & DUGUID (1975). Nessa norma, são mostradas algumas possibilidades de simplificação da referida equação de transporte.

ZARADNY (1993) apresenta os fundamentos teóricos e práticos do escoamento de fluido em meios porosos saturados e não-saturados. O autor faz uma retrospectiva envolvendo desde a definição de parâmetros básicos relacionados com o assunto em questão, até chegar, em um estágio mais avançado, à obtenção da equação de transporte de fluido para tais meios.

Uma abordagem estocástica para o transporte de contaminantes em meios porosos, em geral, é mostrada em SALAMON (2006) e SALAMON et al. (2006). SALAMON (2006) apresenta a modelagem do transporte de contaminante em meios porosos complexos, utilizando-se o conceito de caminho aleatório, para o rastreamento de partículas. Neste trabalho, são analisados os conceitos matemáticos básicos da metodologia do caminho aleatório, bem como suas vantagens e limitações. Diferentes métodos numéricos são utilizados para a determinação da massa do soluto no meio. A principal vantagem da abordagem metodológica apresentada é a não-utilização de hipóteses restritivas para a variação espacial da advecção, dispersão e transferência de massa do soluto. Outra vantagem é o baixo custo computacional para modelos altamente discretizados e a capacidade para descrever uma multiplicidade de diferentes processos de transferência de massa.

Outra abordagem estocástica, também de caráter geral, para o transporte de contaminantes em meios porosos é a apresentada em CORTIS & BERKOWITZ (2005). Neste trabalho, esses autores descrevem as ferramentas do Matlab, como por exemplo a ferramenta para a determinação do caminho aleatório em tempo contínuo (*Continuous Time Random Walk – CTRW*) de uma partícula, aplicável ao estudo da dispersão de traçadores radioativos. O modelo de transporte utilizado se baseia na teoria CTRW. Com esta teoria, pode-se estudar tanto os casos clássicos de dispersão de contaminantes que obedecem à lei de Fick, como casos especiais onde esta lei não se aplica.

Quando as escalas de comprimento e tempo, em que ocorre o processo de transporte, não são muito maiores que as escalas das variações do campo de velocidade das partículas do traçador, então a lei de Fick não se aplica (KOCH & BRADY, 1987).

A equação de transporte de fluidos em meios porosos, apresentada por COGHO & BOTHA (1984) foi obtida por BEAR (1979). Esta equação possui uma forma diferente

daquela apresentada por REEVES & DUGUID (1975). Enquanto estes autores utilizam a pressão do fluido na unidade de altura de coluna, ou seja, em metros, COGHO & BOTHA (1984) utilizam a pressão em unidades convencionais, como a razão da força exercida no fluido pela área considerada.

O trabalho de COGHO & BOTHA (1984) consistiu em realizar simulações transientes de infiltração de água em um repositório de rejeitos radioativos de baixa atividade. Foi considerado um escoamento bidimensional no plano vertical e a equação de transporte de fluido, em meios porosos, foi resolvida utilizando a geometria de elementos finitos. Estes autores relataram problemas de convergência numérica quando algumas condições de escoamento foram consideradas.

Estudos de infiltração de água em depósitos de rejeitos radioativos são encontrados também em AGUIAR (2006) e PONTEDEIRO (2006).

O estudo de AGUIAR (2006) tem como objetivos demonstrar que, para o período de controle institucional, a probabilidade de ocorrência do cenário de liberação líquida de um repositório próximo à superfície é diferente de um, e avaliar o risco de fatalidade por câncer associado a este cenário. Considera-se um projeto de repositório contendo 8 módulos de estocagem, com cada módulo sendo constituído de 6 barreiras, ou seja, cobertura, camada superior, conjunto de embalados, base, paredes e geosfera. Considera-se que o repositório é um sistema, onde os módulos atuam em série e as barreiras dos módulos em paralelo passivo. A probabilidade de falha do módulo para os radionuclídeos é obtida a partir do diagrama de estados de Markov. A taxa de liberação de radionuclídeo do repositório para a biosfera é calculada com base na função densidade de probabilidade de falha do módulo. O risco de fatalidade por câncer, em um indivíduo do público, advém da liberação líquida de radionuclídeos do repositório para a biosfera.

Em PONTEDEIRO (2006), é analisado o comportamento dos contaminantes radioativos contidos nos resíduos com U e Th associados, provenientes da indústria mineral, e a sua deposição final. Nesse estudo, é apresentada uma metodologia integrada, com o objetivo de prever o desempenho de um aterro para rejeitos com radionuclídeos naturais e derivar valores aceitáveis para a sua deposição, pela estimativa

do impacto ambiental a longo prazo. Os modelos são resolvidos analiticamente, utilizando-se a técnica da transformada integral generalizada. Os resultados obtidos, em cada compartimento, são validados com resultados experimentais, ou por comparação com outras classes de soluções. A fim de se definir as características do depósito e as consequências para o meio ambiente, os impactos potenciais são analisados, levando-se em consideração não somente as características do aterro, mas, também, as vias de exposição e os cenários mais prováveis que o contaminante pode percorrer até atingir o ser humano.

Observa-se que nos trabalhos de COGHO & BOTHA (1984), HUNG (2000), ROOD (2003), ALVES & PASSOS (2003), AGUIAR (2006) e PONTEDEIRO (2006), a chuva, parâmetro fundamental para o estudo do cenário de infiltração de água em um repositório de rejeitos radioativos, é tratada como um processo determinístico, embora seja, na realidade, um processo estocástico.

Em LEE et al. (2001), a chuva é modelada adequadamente como um processo estocástico, entretanto, este estudo não foi desenvolvido para um repositório de rejeitos radioativos e sim para determinar a quantidade de água existente nas bacias hidrográficas de Taiwan.

Na pesquisa bibliográfica realizada nesta tese não foi encontrado nenhum estudo de infiltração de água em repositórios próximo à superfície, para rejeitos de baixo e médio níveis de radiação, que considerasse a chuva como um processo estocástico.

Desta maneira, ressalta-se como um dos pontos de originalidade desta tese, a consideração da chuva como um processo estocástico, no estudo do cenário de acidente de infiltração de água no interior de um repositório próximo à superfície.

4. FUNDAMENTOS TEÓRICOS

4.1 GERAL

Neste capítulo serão apresentados alguns conceitos e definições importantes para esta tese, tais como: variável determinística e variável aleatória; caminho aleatório; processos estocásticos; ruído branco gaussiano; equação diferencial de Ito; Lema de Ito; equação do movimento browniano geométrico (MBG); equação de Langevin, o conjunto σ -álgebra; definição de alguns tipos de funções, integrais determinísticas, integrais estocásticas, cálculo estocástico, métodos numéricos para a solução de equações diferenciais ordinárias;

4.2 VARIÁVEL DETERMINÍSTICA E VARIÁVEL ALEATÓRIA

Uma variável é dita determinística quando após ser obtido um valor para a mesma, com a utilização de um determinado método, espera-se encontrar o mesmo valor para a variável, toda vez que o mesmo método for utilizado. Exemplos de variáveis determinísticas são: a massa de um corpo, a aceleração da gravidade em um determinado local da terra, as dimensões de uma peça de um veículo, o ponto de ebulição da água, etc. Observa-se que a imprecisão inerente à determinação do valor da variável não está associada ao imponderável, e sim às imperfeições do processo de medição, dos instrumentos de medida, do avaliador, da metodologia de cálculo, etc. Desta forma, pode-se afirmar que para uma variável determinística, seu valor será tão mais exato quanto mais perfeitas forem as condições utilizadas em sua determinação.

Uma variável é considerada aleatória quando o seu valor não pode ser determinado com precisão, independente das condições utilizadas na sua avaliação. Isto significa que o avaliador não possui controle sobre a variável, pois o valor da mesma está associado ao imponderável, podendo assumir qualquer resultado dentro de um universo de resultados possíveis. Exemplos de variáveis aleatórias são: o resultado do lançamento de um dado, a taxa de precipitação pluviométrica, em um determinado local, durante o ano, o tempo de vida de uma lâmpada elétrica, as distâncias do lançamento de peso nas

Olimpíadas, etc. Elas podem ser discretas como no exemplo dado ou contínuas como nos demais exemplos.

Como exemplo de uma variável aleatória discreta, consideremos uma variável numérica l que assume os valores inteiros e suponhamos que a cada valor de l esteja associado um número real p_l , não negativo, $p_l \geq 0$ e $\sum_l p_l = 1$. Caso isso ocorra, l será uma variável aleatória discreta e p_l será a sua distribuição de probabilidade.

Uma variável aleatória contínua x pode assumir qualquer valor sobre a reta real. Neste caso, deve-se associar uma probabilidade a cada intervalo da reta. A probabilidade de que a variável aleatória x esteja no intervalo $[a, b]$ é $\int_a^b \rho(x).dx$, onde $\rho(x)$ é a densidade de probabilidade, que deve ter as propriedades: $\rho(x) \geq 0$ e $\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x).dx = 1$ (TOMÉ & DE OLIVEIRA, 2001).

Assim, observa-se que a variável determinística representa um número real, ou na forma mais geral um número complexo, enquanto a variável aleatória representa uma distribuição de números reais.

4.3 CAMINHO ALEATÓRIO

A descrição do caminho aleatório (*random walk*) pode ser encontrada em SALAMON et al. (2006).

O caminho aleatório (*random walk*) é a formalização da tomada intuitiva de vários passos consecutivos, em diferentes direções aleatórias, que pode ser simbolizado pela trajetória de um bêbado que parte de um ponto qualquer e tenta voltar para casa. Este conceito é muito importante na idealização dos ruídos que aparecem no cálculo estocástico.

Uma breve descrição de caminho aleatório unidimensional é encontrada em TOMÉ & DE OLIVEIRA (2001).

Consideremos uma partícula se movendo ao longo de uma reta, partindo da origem. A cada intervalo de tempo τ , ela salta uma distância h para a direita com probabilidade p e uma distância h para a esquerda com probabilidade $q = 1 - p$. Para descrever o movimento da partícula, introduzem-se variáveis aleatórias independentes $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \dots$ que tomam os valores $+1$ e -1 , conforme o salto seja para a direita ou para a esquerda, respectivamente. A variável σ_j indica se no j -ésimo instante a partícula deve saltar para a direita ou para a esquerda e, portanto, ela toma o valor $+1$ com probabilidade p e o valor -1 com probabilidade q . A posição da partícula no instante $t = n.\tau$ será $x = h.m$, onde $m = \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \dots + \sigma_n$.

De acordo com TOMÉ & DE OLIVEIRA (2001), se $n \gg 1$, e utilizando-se o teorema central do limite, então a distribuição de probabilidade para o movimento da partícula obedece a uma distribuição normal. Este resultado está de acordo com a definição de ruído branco gaussiano, que é utilizado na maioria dos casos envolvendo equações diferenciais estocásticas.

4.4 PROCESSOS ESTOCÁSTICOS

4.4.1 Geral

Processos estocásticos são estudados em SOONG (1973), SCHUSS (2014) e LUO et al. (2007).

Para o propósito desta tese, um processo estocástico é representado pelo comportamento de uma variável aleatória no tempo. Utilizando-se a simbologia matemática, pode-se afirmar que um processo estocástico é um conjunto de variáveis aleatórias $\{X(t), t \in T\}$, definido em um espaço de probabilidades, indexado por um parâmetro t , onde t pertence ao conjunto T (ZITKOVIC, 2010).

4.4.2 Processo de Markov

O processo de Markov é descrito em STROOCK (2005). É um processo estocástico muito utilizado na teoria das probabilidades e em estatística. Ele recebeu este nome em homenagem ao matemático russo Andrey Markov. É considerado um processo estocástico sem memória, ou seja, é um processo estocástico no qual as previsões futuras para o processo só dependem de seu estado atual e de sua distribuição de probabilidade.

Um exemplo de processo de Markov é a quantidade de dinheiro que um indivíduo tem em sua conta corrente. Conhecendo-se o montante atual e as futuras receitas e despesas relacionadas com a referida conta, com suas distribuições de probabilidades, pode-se prever qual será o montante daqui a alguns anos. Observa-se que não é necessário saber o histórico do montante atual, se ele foi obtido devido à venda de um carro, ou de um terreno, se é fruto de herança ou fruto de um balanço envolvendo salários e despesas. A única coisa que importa é o valor do montante atual e as condições futuras.

Outro exemplo de processo de Markov é a quantidade de água presente em um determinado lago. Conhecendo-se o volume atual de água no lago e os ganhos e perdas de água no futuro, com suas respectivas distribuições de probabilidades, pode-se prever qual será o volume de água daqui há alguns anos.

Já a expectativa de vida de um indivíduo não pode ser considerada como um processo de Markov, porque o histórico do indivíduo influencia na sua expectativa de vida. Considere dois indivíduos que possuam genética semelhante, como por exemplo, dois irmãos gêmeos. Imagine que eles tenham 30 anos de idade e que um deles levou uma vida saudável até então, com boa alimentação, praticando exercícios físicos, trabalhando em uma profissão que não agrida a sua saúde, etc. Agora imagine que o outro irmão seja fumante, alcoólatra, que não tenha uma boa alimentação, não pratique exercícios físicos e ainda trabalhe numa área exposta a radiação. Assim, observa-se que sob condições normais espera-se que o primeiro irmão tenha uma expectativa de vida maior do que a do segundo irmão, já que levou uma vida mais saudável no passado, evidenciando que a expectativa de vida não é um processo de Markov.

4.4.3 Processo de Levy

O processo de Levy (TANKOV, 2014) é um processo estocástico de Markov com incrementos independentes e estacionários $X = \{X_t\}_{t \geq 0}$, tal que:

- a) X tem caminhos contínuos à direita com limites à esquerda (*càdlàg*);
- b) $X_0 = 0$;
- c) Para $0 < t_1 < t_2 < t_3 \dots < t_n$, então X_{t_1} , $X_{t_2} - X_{t_1}$, $X_{t_3} - X_{t_2}$, ..., $X_{t_n} - X_{t_{n-1}}$ são independentes;
- d) Para $t > s$ a distribuição do incremento $X_t - X_s$ é homogênea no tempo, ou seja, depende unicamente da diferença $t - s$.

O termo *càdlàg* (*continue à droite, limite à gauche*) é originário da língua francesa e serve para classificar um conjunto de funções (no qual o processo de Levy está incluído) muito utilizado no cálculo estocástico (KURTZ, 2007).

4.4.4 Processo de Wiener

O processo estocástico de Wiener, representado pelo símbolo W_t ou $W(t)$, é um caso particular do processo estocástico de Levy, e conseqüentemente do de Markov, cujo caminho ou trajetória (*path*) obedece a uma distribuição normal de probabilidade com média igual a 0 e variância igual a “ $t - s$ ”, condições estas representadas por:

$$E[W(t)] = 0; \quad \text{Var}[W(t) - W(s)] = t - s; \quad \forall 0 \leq s \leq t \quad (4.1)$$

De acordo com McCAVITT (2009) este processo foi proposto por Norbert Wiener em 1920, para descrever o comportamento de partículas sujeitas a um grande número de choques moleculares em um meio fluido, como, por exemplo, o que ocorre com os grãos de pólen na água, fenômeno físico conhecido como movimento browniano. Por este motivo, este processo estocástico é também conhecido como movimento browniano padrão (MBP). Descrições sobre este processo são apresentadas em UHLENBECK & ORNSTEIN (1930), OKSENDAL (2000) e EVANS (2013).

De acordo com SAUER (2012), para $i = 1, 2, 3, \dots$, o processo de Wiener pode ser representado pela expressão $W_{t_i} = W_{t_{i-1}} + \sqrt{\Delta t} \cdot n_i$, onde os n_i são números escolhidos aleatoriamente de uma distribuição normal padrão, $N(0, 1)$, e por definição $W(0) = 0$.

4.4.5 Processo de Ito

O processo estocástico de Ito, também chamado de processo difusivo de Ito, é todo processo estocástico que obedece à seguinte equação diferencial estocástica (KLOEDEN & PLATEN, 1999):

$$dX_t = a(t, X_t).dt + b(t, X_t).dW_t; \quad X_0 = X_{t_0} \quad (4.2)$$

onde $a(t, X_t)$ é o termo de arraste médio (*averaged drift term*), $b(t, X_t)$ é o termo difusivo (*diffusive term*), t é o tempo e W_t é o processo estocástico de Wiener. Quando o termo difusivo é função de X_t , o ruído é chamado de multiplicativo. Caso contrário, ele é aditivo.

A Eq. (4.2) representa a forma escalar da equação de Ito, que é de interesse para esta tese. A forma vetorial desta equação é encontrada em OKSENDAL (2000).

A solução da Eq. (4.2) fornecerá os valores de X_t para cada valor do tempo t . Estes valores de X_t são chamados, no cálculo estocástico, de caminhos ou trajetórias (*paths*), porém, eles podem representar qualquer processo estocástico de Ito, tais como a evolução da espessura de corrosão em uma peça metálica, o nível ou massa de água em um lago, etc.

A probabilidade associada ao processo estocástico X_t pode ser determinada utilizando-se a equação de Fokker-Planck (HOTTOVY, 2011), também conhecida como equação progressiva de Kolmogorov (KLOEDEN & PLATEN, 1999), que é uma equação diferencial parcial determinística da seguinte forma:

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \{a(t, x).p\} - \frac{1}{2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} \{b^2(t, x).p\} = 0 \quad (4.3)$$

onde p é a função densidade de probabilidade e $X(t) = x$.

Quando $a(t, x) = 0$, então a Eq. (4.3) se reduz a:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left\{ \left(\frac{b^2(t, x)}{2} \right) . p \right\} \quad (4.4)$$

que é similar à equação da difusão do calor (HOLMAN & WHITE, 1992):

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 (\alpha.T)}{\partial x^2} \quad (4.5)$$

onde T é a temperatura, α é a difusividade térmica e x representa a coordenada cartesiana nesta direção.

Devido a esta peculiaridade, o processo de Ito é também chamado de processo difusivo de Ito.

Substituindo-se $a(t, x) = 0$ e $b(t, x) = 1$ na Eq. (4.2), esta se reduz a:

$$dX_t = dW_t \quad (4.6)$$

evidenciando, que o processo estocástico X_t , neste caso, representa o próprio processo de Wiener, W_t .

Substituindo-se $a(t, x) = 0$ e $b(t, x) = 1$ na Eq. (4.3), obtém-se a seguinte equação de Fokker-Planck, para a função densidade de probabilidade do processo de Wiener:

$$\frac{\partial p_{W_t}}{\partial t} = \left(\frac{1}{2} \right) \cdot \frac{\partial^2 p_{W_t}}{\partial x^2} \quad (4.7)$$

A Eq. (4.7) possui a seguinte solução:

$$p_{W_t}(t, x) = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi t}}\right) e^{-\left(\frac{x^2}{2t}\right)} \quad (4.8)$$

que pode ser confirmada substituindo-se a Eq. (4.8) na Eq. (4.7).

Uma distribuição normal com média μ e desvio padrão σ^2 , possui a seguinte função densidade de probabilidade (MONTGOMERY & RUNGER, 1999):

$$p(t, x) = \left[\frac{1}{(\sqrt{2\pi})\sigma}\right] e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} \quad (4.9)$$

Comparando-se as Eqs. (4.8) e (4.9), observa-se que a função densidade de probabilidade do processo de Wiener segue uma distribuição normal com média $\mu = 0$ e desvio padrão $\sigma = \sqrt{t}$.

Assim, o processo de Wiener no intervalo de tempo $\Delta t = t - s$, com $0 \leq s < t \leq T$, é representado por números extraídos aleatoriamente de uma distribuição normal com média $\mu = 0$ e variância $V = \Delta t$, ou seja (BRAUMANN, 2005):

$$\Delta W_t = N(0, \Delta t) \quad (4.10)$$

A Eq. (4.10) pode ser colocada na forma equivalente:

$$\Delta W_t = \sqrt{\Delta t} \cdot n_t \quad (4.11)$$

onde n_t representa os números extraídos aleatoriamente de uma distribuição normal padrão, $N(0,1)$, ou seja, uma distribuição normal com média $\mu = 0$ e desvio padrão $\sigma = 1$.

A Eq. (4.11) é muito importante no estudo de equações diferenciais estocásticas, contendo o ruído branco gaussiano.

4.5 RUÍDO BRANCO GAUSSIANO

Estudos sobre ruídos estocásticos e seus efeitos são encontrados em WIO & TORAL (2004), NARAYANAN et al. (2009) e LONGTIN (2014).

Dentre os vários tipos de ruídos estocásticos, destaca-se pela sua aplicação o ruído branco gaussiano, ε , que é o ruído mais utilizado no estudo de equações diferenciais estocásticas. Ele é definido pela expressão (KLOEDEN & PLATEN, 1999):

$$\varepsilon = \frac{dW_t}{dt} \quad (4.12)$$

onde, conforme mencionado anteriormente, W_t é o processo de Wiener ou movimento browniano padrão (MBP) e t é o tempo. É importante frisar que sob o ponto de vista matemático, a derivada da Eq. (4.12) não existe para nenhum ponto da trajetória de W_t (MISTURINI, 2010), pois as tangentes à esquerda e à direita, destes pontos, são diferentes entre si. Entretanto, é importante ressaltar que esta inconsistência não tem nenhum impacto na solução das equações diferenciais estocásticas, pois esta se baseia no conceito de integrais estocásticas que são muito bem elaboradas matematicamente.

4.6 EQUAÇÃO DIFERENCIAL DE ITO

4.6.1 Geral

A equação diferencial de Ito, na forma escalar, já foi apresentada na definição do processo difusivo de Ito, ou seja, é a Eq. (4.2).

Estudos sobre esta equação são encontrados em ALLEN (2011), APPLEBY & WU (2008), BRAUMANN (2004), LYONS (2013) e RICHARDSON (2009). Estudos específicos para a solução da equação de Ito, utilizando-se simulações de Monte Carlo, constam de HAUGH (2004).

4.6.2 Equação diferencial linear de Ito

Quando $a(t, X_t) = \alpha_1(t).X_t + \alpha_2(t)$ e $b(t, X_t) = \beta_1(t).X_t + \beta_2(t)$, então a Eq. (4.2) se transforma na seguinte equação diferencial linear de Ito:

$$dX_t = [\alpha_1(t).X_t + \alpha_2(t)].dt + [\beta_1(t).X_t + \beta_2(t)].dW_t \quad (4.13)$$

Para o estudo de equações não-lineares de Ito o leitor pode recorrer aos documentos GONTIS et al. (2009), SHOJI & OZAKI (1998), RAMAN (2011) e DE LA CRUZ & ZUBELLI (2012).

4.6.3 Solução geral da equação diferencial linear de Ito

A forma linear da equação diferencial estocástica de Ito possui a seguinte solução geral (CYGANOWSKI, 1993; HIGHAM & KLOEDEN, 2001; ARCHAMBEAU, 2014):

$$X_t = \Phi_{t,t_0} \cdot (X_{t_0} + \int_{t_0}^t [\alpha_2(s) - \beta_1(s).\beta_2(s)].\Phi_{s,t_0}^{-1}.ds + \int_{t_0}^t \beta_2(s).\Phi_{s,t_0}^{-1}.dW_s) \quad (4.14)$$

onde W_s é o processo estocástico de Wiener ou movimento browniano padrão (MBP) e

$$\Phi_{t,t_0} = \text{Exp}\left\{ \int_{t_0}^t \left[\alpha_1(s) - \frac{1}{2}(\beta_1(s))^2 \right].ds + \int_{t_0}^t \beta_1(s).dW_s \right\} \quad (4.15)$$

e a função Φ_{s,t_0}^{-1} pode ser representada pela seguinte equação:

$$\Phi_{s,t_0}^{-1} = \frac{1}{\Phi_{s,t_0}} \quad (4.16)$$

Observa-se que a primeira integral do membro direito das Eqs (4.14) e (4.15) são integrais de Riemann-Stieltjes (ANEVSKI, 2012), e as demais são integrais estocásticas de Ito (MISTURINI, 2010; SAUER, 2012).

4.7 LEMA DE ITO

A grande importância do Lema de Ito reside no fato de que ele estabelece a regra da cadeia para o cálculo estocástico de Ito, que é diferente da regra da cadeia para funções determinísticas (cálculo corriqueiro não-estocástico)

No cálculo não-estocástico, se a variável $x(t)$ obedece à seguinte equação diferencial:

$$\frac{dx}{dt} = a(t, x) \quad (4.17)$$

e se a função determinística $f[t, x(t)]$ possui derivada primeira com relação a x e t , então a regra da cadeia é representada pela seguinte equação (RILEY et al., 1997):

$$\frac{df}{dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right) \cdot \left(\frac{dx}{dt}\right) + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right) \quad (4.18)$$

Substituindo-se a Eq. (4.17) na Eq. (4.18) e multiplicando-se ambos os membros da equação resultante por dt , obtém-se a seguinte expressão:

$$df = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right) \cdot dt + a(t, x) \cdot \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right) \cdot dt \quad (4.19)$$

Agora seja o processo de Ito representado pela Eq. (4.2) e seja a função estocástica $Z_t = f(t, X_t)$, possuindo derivada primeira em relação a t e derivada segunda em

relação a $x = X(t)$, então a regra da cadeia da função estocástica Z_t estabelece que (OKSENDAL, 2000):

$$dZ_t = \left[\frac{\partial f(t, X_t)}{\partial t} + a(t, X_t) \cdot \frac{\partial f(t, X_t)}{\partial x} + \frac{1}{2} \cdot b^2(t, X_t) \cdot \frac{\partial^2 f(t, X_t)}{\partial x^2} \right] \cdot dt + b(t, X_t) \cdot dW_t \quad (4.20)$$

Observa-se que a Eq. (4.20) assume a forma da Eq. (4.19) quando o termo estocástico, na Eq. (4.2), pode ser desprezado, ou seja, quando $b(x, t) \approx 0$. Assim, observa-se, que neste caso, o cálculo estocástico de Ito é equivalente ao cálculo ordinário não-estocástico.

4.8 EQUAÇÃO DO MOVIMENTO BROWNIANO GEOMÉTRICO

A equação do movimento browniano geométrico (MBG) é um caso particular da equação diferencial estocástica de Ito, na forma linear. Ela é obtida substituindo-se $\alpha_2(t) = \beta_2(t) = 0$ na Eq. (4.13):

$$dX_t = \alpha_1(t) \cdot X_t \cdot dt + \beta_1(t) \cdot X_t \cdot dW_t \quad (4.21)$$

A Eq. (4.21) é a equação diferencial que representa o processo estocástico contínuo no tempo, que de acordo com SIGMAN (2006), é denominado movimento browniano geométrico (MBG) ou movimento browniano exponencial (MBE).

O processo estocástico MBG, juntamente com o lema de Ito, são os principais sustentáculos matemáticos para o desenvolvimento do modelo de Black-Scholes, muito utilizado na determinação do preço de ações no mercado de opções. Este modelo (BLACK & SCHOLES, 1973) foi colocado em bases matemáticas mais sólidas posteriormente (MERTON, 1976).

O modelo de Black-Scholes revolucionou o mercado de ações e se tornou uma das principais ferramentas econômicas utilizadas pelos bancos europeus na segunda metade

do século XX. Devido à grande repercussão deste modelo nos meios econômicos e devido ao falecimento de Fisher Black em 1995, Myron Scholes e Robert Merton receberam o Prêmio de Ciências Econômicas em Memória de Alfred Nobel (Prêmio Nobel de Economia) no ano de 1997. Embora inelegível para o prêmio, devido ao seu falecimento, a academia sueca fez constar em seus autos a grande contribuição de Fisher Black para o desenvolvimento do referido modelo.

4.9 EQUAÇÃO DE LANGEVIN

A equação de Langevin foi derivada em 1908 por Paul Langevin para estudar o movimento browniano e a difusão molecular como um método alternativo ao proposto por Einstein em 1905 (CARVALHO et al., 2003). Esta equação foi o primeiro exemplo de uma equação diferencial estocástica. Porém, bases matemáticas adequadas para a sua solução só estiveram disponíveis aproximadamente 40 e 52 anos mais tarde, quando Ito e Stratonovich estabeleceram seus respectivos cálculos estocásticos.

Para uma partícula em um meio fluido, a equação de Langevin estabelece que a resultante das forças que agem sobre ela, R , é igual ao somatório da força viscosa (proporcional a velocidade da mesma), $\beta.v$, com a força produzida pelas interações intramoleculares e intermoleculares, $F(x)$, e com um ruído estocástico, $\eta(t)$, de tal maneira que na forma escalar (ARNOLD, 1999; RIECKE, 2010):

$$R(x, t) = m \cdot \frac{dv}{dt} = F(x) - \beta.v + \eta(t) \quad (4.22)$$

sendo m a massa da partícula e t o tempo.

4.10 O CONJUNTO σ - ALGEBRA

O tratamento axiomático da teoria da probabilidade foi iniciado por Kolmogorov no ano de 1930 (KOLMOGOROV, 1956), com o desenvolvimento da teoria das medidas, cujos métodos e características foram desenvolvidos pelo próprio autor.

O conceito fundamental no estudo da teoria da probabilidade é o conceito de espaço de probabilidade.

O espaço de probabilidade é definido como o terno ordenado (Ω, A, P) , onde Ω é chamado de espaço amostral, A é o conjunto σ -álgebra dos subconjuntos de Ω chamados eventos e P é a medida de probabilidade em A , associando a cada evento $A \in A$, um número $P(A) \in [0, 1]$, chamado de sua probabilidade.

Uma coleção A de subconjuntos de Ω é uma σ -álgebra se:

$$\Omega \in A \tag{4.23}$$

$$A^c \in A \quad \text{se} \quad A \in A \tag{4.24}$$

$$\bigcup_{n=1}^{\infty} A_n \in A \quad \text{se} \quad A_1, A_2, \dots, A_n, \dots \in A \tag{4.25}$$

onde A^c é o complemento do conjunto A e o símbolo $\bigcup_{n=1}^{\infty}$ representa a união dos conjuntos A_i de 1 a ∞ .

Observa-se, com o auxílio das Eqs. (4.23), (4.24) e (4.25), que uma σ -álgebra é uma coleção de subconjuntos de Ω que contém Ω e que é fechado em relação às operações de complementação e uniões contáveis de conjuntos.

Como ilustração, observa-se que o número 5 pertence ao conjunto dos números reais, assim como o número 10. A soma desses dois números é 15 que também pertence

ao conjunto dos números reais. Como esta regra vale para todos os números reais, pode-se afirmar que o conjunto dos números reais é fechado com relação à operação de adição.

4.11 DEFINIÇÃO DE ALGUNS TIPOS DE FUNÇÕES

4.11.1 Geral

Para o entendimento desta tese é importante apresentar as definições de funções contínua, monótona, limitada e martingal (*martingale*).

4.11.2 Função contínua

De acordo com (SIMMONS, 1987), uma função real $f : D \rightarrow \mathbb{R}$ (onde \mathbb{R} é o conjunto dos números reais) é contínua em um ponto $a \in D$ se:

- a) $\exists f(a)$;
- b) Além de existirem os limites, estes devem atender a seguinte expressão:
$$\lim_{x \rightarrow a^-} f(x) = \lim_{x \rightarrow a^+} f(x) = \lim_{x \rightarrow a} f(x) ;$$
- c) $\lim_{x \rightarrow a} f(x) = f(a)$

4.11.3 Função monótona

Uma função real $f : D \rightarrow \mathbb{R}$ é monótona quando ela preserva ou inverte a relação de ordem, ou seja (BEAME & MACHMOUCHI, 2008):

- a) f é monótona não-decrescente se $\forall x, y \in D (x > y \Rightarrow f(x) \geq f(y))$;
- b) f é monótona não-crescente se $\forall x, y \in D (x > y \Rightarrow f(x) \leq f(y))$.

4.11.4 Função limitada

De acordo com ABUKHALED (1995), uma função real $f : D \rightarrow \mathbb{R}$ (onde \mathbb{R} é o conjunto dos números reais) é limitada se existe uma constante $M > 0$ tal que $|f(x)| < M, \forall x \in D$.

4.11.5 Martingal (Martingale)

Um processo estocástico, $\{X_t : 0 \leq t \leq \infty\}$, é um martingal (*martingale*) com respeito a uma filtração (uma curva da família de curvas de X_t) $F_t = \{X_1, X_2, \dots, X_t\}$ e uma medida de probabilidade, P , se (HAUGH, 2004):

- a) $E[|X_t|] < \infty \quad \forall t \geq 0$;
- b) $E[X_{t+s} | F_t] = X_t \quad \forall t, s \geq 0$.

4.12 INTEGRAIS DETERMINÍSTICAS

4.12.1 Geral

Nesta seção serão apresentadas as definições das integrais determinísticas de Riemann e de Riemann-Stieltjes, e a forma da integral de Riemann-Stieltjes para o processo de Wiener.

4.12.2 Integral de Riemann

Seja $[a, b]$ um intervalo fechado limitado e $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ uma função limitada. Seja $P = \{x_0, x_1, \dots, x_n\}$ uma partição de $[a, b]$, com $a = x_0 < x_1 < x_2 \dots < x_n = b$, e t_1, t_2, \dots, t_n uma sequência de números reais tais que $t_j \in [x_{j-1}, x_j]$ para $1 \leq j \leq n$.

Denomina-se soma de Riemann de f relativo à partição P , e representa-se pelo símbolo $S(f, P)$, ao número representado pela seguinte equação:

$$S(f, P) = \sum_{j=1}^n f(t_j) \cdot (x_j - x_{j-1}) \quad (4.26)$$

A norma da partição P , $\|P\|$, é representada pela seguinte equação:

$$\|P\| = \max_{1 \leq j \leq n} (x_j - x_{j-1}) \quad (4.27)$$

Diz-se que a soma de Riemann de f converge para o número I_R , quando $\|P\| \rightarrow 0$ (a norma de P tende a 0), se para todo $\delta > 0$ existir uma partição P_δ de $[a, b]$ tal que:

$$P_\delta \subseteq P \Rightarrow \left| \sum_{j=0}^n f(t_j) \cdot (x_j - x_{j-1}) - I_R \right| < \delta \quad (4.28)$$

para todas as escolhas de $t_j \in [x_{j-1}, x_j]$, $1 \leq j \leq n$, então:

$$I_R = \lim_{\|P\| \rightarrow 0} S(f, P) = \int f(x) \cdot dx \quad (4.29)$$

4.12.3 Integral de Stieltjes ou de Riemann-Stieltjes

A integral de Stieltjes ou de Riemann-Stieltjes é a generalização da integral de Riemann.

Sejam $f(x)$ e $\alpha(x)$ funções reais e limitadas no intervalo $[a, b]$. Seja $P = \{x_0, x_1, \dots, x_n\}$, com $a = x_0 < x_1 < x_2 \dots < x_n = b$, uma partição de $[a, b]$ e seja a soma de Riemann, $S(f, P)$, representada pela seguinte equação:

$$S(f, P) = \sum_{j=1}^n f(t_j) \cdot (\alpha(x_j) - \alpha(x_{j-1})) \quad (4.30)$$

onde $t_j \in [x_{j-1}, x_j]$.

Se $S(f, P)$ tende a um número fixo I_S , a medida que $\|P\| \rightarrow 0$, então I_{RS} é denominada integral de Stieltjes ou de Riemann-Stieltjes, e pode ser representada pela seguinte equação:

$$I_{RS} = \int_a^b f(x) \cdot d\alpha(x) \quad (4.31)$$

onde para a definição da integral da Eq. (4.31) a função $\alpha(x)$ não precisa ser monótona (SIGMAN, 2007).

É importante observar que para a partição P descrita anteriormente, a integral de Riemann-Stieltjes só existirá se a variação da função $\alpha(x)$, $V(\alpha)[a, b]$, for limitada, ou seja, se ela atender a seguinte condição (SIGMAN, 2007):

$$V(\alpha)[a, b] = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^n |\alpha(x_j) - \alpha(x_{j-1})| < \infty \quad (4.32)$$

Conforme mencionado anteriormente, o processo de Wiener ou movimento browniano padrão (MBP), W_t , é fundamental para o cálculo estocástico por ser utilizado na definição do ruído branco gaussiano (vide seção 4.5). Por outro lado, como este processo estocástico não atende a condição da Eq. (4.32) (ABUKHALED, 1995; SIGMAN, 2007), ele não pode substituir a função $\alpha(x)$ na integral da Eq. (4.31). Assim, fica evidente que não pode ser calculada a seguinte integral de Riemann-Stieltjes:

$$I_{RS} = \int_0^T f(t) \cdot dW_t \quad (4.33)$$

4.12.4 Integral de Riemann-Stieltjes do processo de Wiener

Com base nas Seções 4.4.3 e 4.4.4, observa-se que o processo de Wiener é uma função contínua. Devido a esta característica, ele pode ser utilizado como integrando em uma integral de Riemann-Stieltjes (vide Fig. 6.10) (SIGMAN, 2007), tal como:

$$I_{RS} = \int_0^T W(t).dt \quad (4.34)$$

4.13 INTEGRAIS ESTOCÁSTICAS

4.13.1 Geral

Devido à impossibilidade de se calcular a integral da Eq. (4.33), os matemáticos que trabalhavam com o cálculo estocástico tiveram que repensar os conceitos de integrais. Com isso, foram criados alguns tipos de integrais estocásticas, dentre os quais se destacam por suas aplicações as integrais de Ito e de Stratonovich (ABUKHALED, 1995; KLOEDEN & PLATEN, 1999; OKSENDAL, 2000).

A integral estocástica pode ser vista como uma generalização da integral de Riemann-Stieltjes com relação a dois aspectos. Primeiro porque ela é utilizada para processos estocásticos e segundo porque a integração pode ser realizada com relação a funções não-diferenciáveis.

Nas Seções 4.13.2 e 4.13.3 serão descritas as integrais de Ito e de Stratonovich.

4.13.2 Integral de Ito

Construções matematicamente rigorosas da integral de Ito são encontradas em OKSENDAL (2000), KLOEDEN & PLATEN (1999), etc. Uma construção mais simples será apresentada nesta seção (SIGMAN, 2007), onde o principal objetivo é

determinar a integral $\int_0^T W_t \cdot dW_t$ sabendo-se que o processo de Wiener é uma função não limitada, ou seja, que não obedece a Eq. (4.32).

Sejam X_t e H_t dois processos estocásticos compatíveis com a definição da integral de Ito (OKSENDAL, 2000). Assim, representa-se a integral de Ito, I_I , pela seguinte equação:

$$I_I = \int_0^T X_s \cdot dH_s = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^n X(t_{k-1}) \cdot [H(t_k) - H(t_{k-1})] \quad (4.35)$$

onde $0 = t_0 = t_1 < \dots < t_n = T$ representa a partição de $[0, T]$, em subintervalos que vão se tornando cada vez menores a medida que n tende a ∞ e $t_k \in [t_{k-1}, t_k]$.

É importante observar, com o auxílio da Eq. (4.35), que na integral de Ito são sempre utilizados os valores do integrando, X_t , nos extremos esquerdos dos subintervalos, ou seja, $X(t_{k-1})$.

Considerando-se que os processos estocásticos X_t e H_t sejam iguais ao processo de Wiener, W_t , então:

$$I_I = \int_0^T W_t \cdot dW_t = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^n W(t_{k-1}) \cdot [W(t_k) - W(t_{k-1})] \quad (4.36)$$

Verifica-se, com facilidade, que é válida a seguinte expressão:

$$W(t_{k-1}) \cdot [W(t_k) - W(t_{k-1})] = \left(\frac{1}{2}\right) \cdot [W^2(t_k) - W^2(t_{k-1})] - \left(\frac{1}{2}\right) \cdot [W(t_k) - W(t_{k-1})]^2 \quad (4.37)$$

Fazendo-se o somatório em ambos os membros da Eq. (4.37), obtém-se:

$$\sum_{k=1}^n W(t_{k-1}) \cdot [W(t_k) - W(t_{k-1})] = \frac{W^2(T)}{2} - \left(\frac{1}{2}\right) \cdot \sum_{k=1}^n [W(t_k) - W(t_{k-1})]^2 \quad (4.38)$$

A medida que os subintervalos se tornam cada vez menores, observa-se que a variação quadrática (*squared variation*) de $W(t)$, $Q[W]$, existe e pode ser representada pela equação (SIGMAN, 2007):

$$Q[W] = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^n [W(t_k) - W(t_{k-1})]^2 = T \quad (4.39)$$

Substituindo-se as Eqs. (4.37), (4.38) e (4.39) na Eq. (4.36), obtém-se:

$$I_I = \int_0^T W_t \cdot dW_t = \frac{W^2(T)}{2} - \frac{T}{2} \quad (4.40)$$

pois, por definição $W(0) = 0$.

É importante observar que o resultado de uma integral de Ito é diferente de uma integral de Riemann-Stieltjes. Enquanto a primeira produziu o resultado apresentado na Eq. (4.40), a segunda teria fornecido como resultado apenas o termo $\frac{W^2(T)}{2}$.

Quando o integrando na Eq. (4.40) é diferente do processo de Wiener, W_t , pode-se determinar a integral de Ito de maneira similar a apresentada em MISTURINI (2010) e SAUER (2012).

Assim, para um intervalo de tempo $[0, T]$, com partição $P = \{t_0, t_1, \dots, t_n\}$ e com $0 = t_0 < t_1 < t_2 \dots < t_n = T$, observa-se que a integral de Ito para um processo estocástico, $X(t)$, em relação ao processo de Wiener, W_t , pode ser representada pela seguinte equação (MISTURINI, 2010; SAUER, 2012):

$$\int_0^T X(s).dW_s = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \sum_{i=1}^N X(t_{i-1}).\Delta W_i \right\} \quad (4.41)$$

onde $N = \frac{T}{\Delta t}$, $\Delta t = t_i - t_{i-1}$ e $\Delta W_i = n_i \cdot \sqrt{\Delta t}$.

Para subintervalos de tempo $\Delta t = \frac{T}{N}$, com comprimentos iguais entre si e com um valor de N suficientemente grande, observa-se que a Eq. (4.41) pode ser colocada na seguinte forma simplificada:

$$\int_0^T X(s).dW_s = \sum_{i=1}^N X(t_{i-1}).n_i \cdot \sqrt{\Delta t} \quad (4.42)$$

4.13.3 Integral de Stratonovich

Se X_t e H_t são dois processos estocásticos compatíveis com a definição da integral de Stratonovich (OKSENDAL, 2000), I_S , então, representa-se esta integral pela seguinte equação:

$$I_S = \int_0^T X_s .dH_s = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^n \left(\frac{1}{2} \right) . [X(t_{k-1}) + X(t_k)] . [H(t_k) - H(t_{k-1})] \quad (4.43)$$

onde $P = \{t_0, t_1, \dots, t_n\}$ representa a partição do intervalo $[0, T]$, com $0 = t_0 < t_1 < t_2 \dots < t_n = T$.

Observa-se, com o auxílio da Eq. (4.43), que na integral de Stratonovich o integrando é determinado como a média entre os valores dos extremos de cada subintervalo, ou seja, $\left(\frac{1}{2} \right) . [X(t_{k-1}) + X(t_k)]$.

Substituindo-se os processos estocásticos X_t e H_t pelo processo de Wiener, W_t , então a Eq. (4.43) pode ser substituída pela seguinte equação (REIß, 2007):

$$I_S = \int_0^T W_t \circ dW_t = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^n \left(\frac{1}{2}\right) [W(t_{k-1}) + W(t_k)] \cdot [W(t_k) - W(t_{k-1})] \quad (4.44)$$

onde o símbolo “ \circ ” denota que a integral da Eq. (4.44) é resolvida utilizando-se o cálculo de Stratonovich.

O termo que está no interior do somatório da Eq. (4.44) pode ser desmembrado da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{2}\right) [W(t_{k-1}) + W(t_k)] \cdot [W(t_k) - W(t_{k-1})] &= \left(\frac{1}{2}\right) \cdot W(t_{k-1}) \cdot [W(t_k) - W(t_{k-1})] + \\ &\left(\frac{1}{2}\right) \cdot [W(t_k)] \cdot [W(t_k) - W(t_{k-1})] \end{aligned} \quad (4.45)$$

Adicionando-se e subtraindo-se o termo $\left(\frac{1}{2}\right) \cdot W(t_{k-1}) \cdot [W(t_k) - W(t_{k-1})]$ ao membro direito da Eq. (4.45), obtém-se a seguinte equação:

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{2}\right) [W(t_{k-1}) + W(t_k)] \cdot [W(t_k) - W(t_{k-1})] &= W(t_{k-1}) \cdot [W(t_k) - W(t_{k-1})] + \\ &\left(\frac{1}{2}\right) \cdot [W(t_k)] \cdot [W(t_k) - W(t_{k-1})] - \\ &\left(\frac{1}{2}\right) \cdot [W(t_{k-1})] \cdot [W(t_k) - W(t_{k-1})] \end{aligned} \quad (4.46)$$

ou

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{2}\right) [W(t_{k-1}) + W(t_k)] \cdot [W(t_k) - W(t_{k-1})] &= W(t_{k-1}) \cdot [W(t_k) - W(t_{k-1})] + \\ &\left(\frac{1}{2}\right) \cdot [W(t_k) - W(t_{k-1})] \cdot [W(t_k) - W(t_{k-1})] \end{aligned} \quad (4.47)$$

Aplicando-se o limite quando n tende a ∞ aos somatórios dos termos do membro direito da Eq. (4.47), obtém-se (vide Eq. 4.36):

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^n W(t_{k-1}) \cdot [W(t_k) - W(t_{k-1})] = \int_0^T W_t \cdot dW_t = I_I \quad (4.48)$$

e

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^n \left(\frac{1}{2}\right) \cdot [W(t_k) - W(t_{k-1})] \cdot [W(t_k) - W(t_{k-1})] = \frac{T}{2} \quad (4.49)$$

Substituindo-se as Eqs. (4.47), (4.48) e (4.49) na Eq. (4.44), obtém-se a seguinte equação:

$$\int_0^T W_t \circ dW_t = \int_0^T W_t \cdot dW_t + \frac{T}{2} \quad (4.50)$$

Substituindo-se a Eq. (4.40) na Eq. (4.50), obtém-se a seguinte integral de Stratonovich:

$$\int_0^T W_t \circ dW_t = \frac{W^2(T)}{2} \quad (4.51)$$

A Eq. (4.51) mostra que, embora a integral de Stratonovich seja uma integral estocástica, ela segue as regras de integração da integral de Riemann-Stieltjes.

Uma outra maneira de se obter a Eq. (4.51), sem utilizar a integral de Ito [Eq. (4.40)], é apresentada em GALLA (2006).

4.14 CÁLCULO ESTOCÁSTICO

4.14.1 Geral

Conforme mostrado nos Apêndices D e F, a utilização do cálculo estocástico, nesta tese, tem como principal objetivo obter soluções para as equações diferenciais estocásticas ordinárias, obtidas nesses apêndices.

A solução de equações diferenciais estocásticas ordinárias é obtida com base na integração destas equações, evidenciando que a definição de integral estocástica é de fundamental importância para o estabelecimento de um cálculo estocástico.

Após a concepção da integral estocástica, o caminho natural no desenvolvimento do cálculo estocástico é a definição das regras de derivação para os processos estocásticos. Com isso, obtém-se a formulação para a regra da cadeia do cálculo estocástico em questão, permitindo que os processos estocásticos possam ser expressos em sua forma diferencial.

Atualmente são muito utilizados os cálculos estocásticos de Ito e de Stratonovich que serão descritos a seguir.

4.14.2 Cálculo estocástico de Ito

A pedra fundamental para o desenvolvimento do cálculo estocástico de Ito foi a publicação em 1942 (ITO, 1942) de um artigo sobre parte de sua tese de doutorado que seria concluída em 1945. Neste trabalho, Kiyoshi Ito começa a construir o conceito de integrais estocásticas e sua teoria associada à análise matemática. É também criada a teoria das equações diferenciais estocásticas, que descrevem o comportamento de sistemas relacionados com eventos aleatórios.

Inicialmente os trabalhos de Ito não tiveram boa aceitação por parte da comunidade científica e ele teve que esperar vários anos para que a importância de suas idéias fosse

completamente aceita, e que outros matemáticos começassem a contribuir de forma definitiva para o desenvolvimento de sua teoria.

Com a definição de sua integral estocástica [vide Eq. (4.35)] era natural que as regras de derivação dos processos estocásticos fossem estabelecidas. Com esse propósito Ito formulou o Lema que tem o seu nome (vide seção 4.7). Conforme mencionado anteriormente, este Lema estabelece como deve ser a regra da cadeia no cálculo estocástico de Ito, que pode ser formulada da seguinte maneira.

Se $f(x, t): [0, \infty) \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função escalar, duas vezes continuamente diferenciável em \mathbb{R} (conjunto dos números reais), então a sua expansão em série de Taylor pode ser representada pela seguinte equação (RILEY et al., 1997):

$$df = \left(\frac{\partial f}{\partial t} .dt + \frac{\partial f}{\partial x} .dx \right) + \left(\frac{1}{2} \right) . \left[\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} .dt^2 + 2 . \frac{\partial^2 f}{\partial t . \partial x} .dt .dx + \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} .dx^2 \right] + \dots \quad (4.52)$$

Desprezando-se na Eq. (4.52) os termos de ordens superiores e os multiplicados por $dt . dx$ e dt^2 , obtém-se:

$$df = \frac{\partial f}{\partial t} .dt + \frac{\partial f}{\partial x} .dx + \left(\frac{1}{2} \right) . \left[\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} .dx^2 \right] \quad (4.53)$$

Se $Z_t = f(t, X_t)$, então, utilizando-se a Eq. (4.53), obtém-se:

$$dZ_t = \frac{\partial f(t, X_t)}{\partial t} .dt + \frac{\partial f(t, X_t)}{\partial x} .dX_t + \left(\frac{1}{2} \right) . \left[\frac{\partial^2 f(t, X_t)}{\partial x^2} .(dX_t)^2 \right] \quad (4.54)$$

O termo dX_t na Eq. (4.54) pode ser representado pela própria equação estocástica de Ito [vide Eq. (4.2)], enquanto o termo $(dX_t)^2$ é representado como:

$$(dX_t)^2 = a(t, X_t)^2 .(dt)^2 + 2.a(t, X_t) .b(t, X_t) .dt .dW_t + b(t, X_t)^2 .(dW_t)^2 \quad (4.55)$$

De acordo com HAUGH (2010) e OKSENDAL (2000), no cálculo estocástico de Ito são válidas as expressões $dt \times dt = dt \times dW_t = 0$ e $dW_t \times dW_t = dt$. Assim, substituindo-se estas expressões na Eq. (4.55), obtém-se:

$$(dX_t)^2 = b(t, X_t)^2 \cdot dt \quad (4.56)$$

Substituindo-se as Eqs. (4.2) e (4.56) na Eq. (4.54), obtém-se a equação que representa a regra da cadeia no cálculo estocástico de Ito:

$$dZ_t = \left[\frac{\partial f(t, X_t)}{\partial t} + a(t, X_t) \frac{\partial f(t, X_t)}{\partial x} + \left(\frac{1}{2}\right) \cdot b^2(t, X_t) \cdot \frac{\partial^2 f(t, X_t)}{\partial x^2} \right] \cdot dt + b(X_t, t) \cdot dW_t \quad (4.57)$$

A Eq. (4.57) é idêntica a Eq. (4.20) da seção 4.7.

4.14.3 Cálculo estocástico de Stratonovich

Ruslan Leontievich Stratonovich foi um pesquisador russo que nasceu em Moscou em 1930 e faleceu em 1997. Seus principais trabalhos científicos foram KUZNETSOV & STRATONOVICH (1958), STRATONOVICH (1959 e 1960).

É o criador de um cálculo estocástico que serve como uma alternativa ao cálculo estocástico de Ito e que tem o objetivo de ser mais simples do que o cálculo estocástico de seu antecessor.

O cálculo estocástico de Stratonovich é especialmente importante para a solução de diversos problemas em física estatística, como por exemplo, a solução da equação de Langevin, descrita na seção 4.9.

A integral estocástica de Stratonovich é representada pela Eq. (4.43) e segue as mesmas regras de integração do cálculo ordinário (não-estocástico). Consequentemente,

a regra da cadeia para os processos estocásticos, no cálculo de Stratonovich, é feita de maneira similar ao cálculo não-estocástico [vide Eq. (4.19)].

4.14.4 Utilização do cálculo estocástico de Ito e de Stratonovich em geral

Embora, YUAN & AO (2012) afirmem que o cálculo estocástico não se restringe apenas a disputa isolada entre Ito e Stratonovich, inegavelmente eles são os personagens mais importantes desse ramo da matemática.

Atualmente, são muito utilizados os cálculos estocásticos de Ito e de Stratonovich (KLOEDEN & PLATEN, 1999; EVANS, 2013; BRAUMMAN, 2005). Sob o ponto de vista matemático, ambos estão corretos, porém, em aplicações práticas a abordagem de Ito é mais utilizada do que a de Stratonovich (ABUKHALED, 1995).

Uma importante razão para a utilização frequente do cálculo de Ito é que ele utiliza as leis de probabilidade do processo de Wiener de uma maneira mais natural do que o cálculo de Stratonovich (ABUKHALED, 1995). Por exemplo, o processo de Wiener obedece às expressões $E[W(b) - W(a)] = 0$ e $E|W(b) - W(a)|^2 = b - a$, enquanto que a

integral estocástica de Ito, $\int_a^b g(t).dW(t)$, satisfaz as expressões $E\left[\int_a^b g(t).dW(t)\right] = 0$ e

$$E\left|\int_a^b g(t).dW(t)\right|^2 = \int_a^b E|g(t)|^2 .dt \quad (\text{ABUKHALED, 1995}).$$

A escolha do tipo de cálculo estocástico que deve ser utilizado na solução de um determinado problema depende de vários fatores, tais como: se os processos estocásticos são funções diferenciáveis ou não, se as equações diferenciais estocásticas, utilizadas na modelagem do problema, serão resolvidas analítica ou numericamente, etc.

Se os processos estocásticos puderem ser aproximados por funções diferenciáveis é melhor usar o cálculo de Stratonovich porque tanto as integrais como as derivadas desses processos seguem as regras do cálculo convencional (não-estocástico).

Por outro lado, se as equações diferenciais que governam o problema tiverem que ser resolvidas pela via numérica, então é melhor utilizar o cálculo de Ito, pois a integral de Ito é um martingal (*martingale*) e a integral de Stratonovich não é (OKSENDAL, 2000). Isto significa que a integral de Ito é um processo estocástico convergente, enquanto que a integral de Stratonovich pode não ser (KLOEDEN & PLATEN, 1999).

Como regra geral, pode-se afirmar que normalmente o cálculo de Stratonovich é mais utilizado em engenharia e física, enquanto que o de Ito é mais utilizado em análise matemática e matemática financeira (GLEESON, 2014).

Como exemplo da aplicação do cálculo de Stratonovich em física, pode-se mencionar o estudo da equação de Langevin, utilizada para modelar o movimento browniano de uma partícula em um fluido [vide Eq. (4.22) da seção 4.9].

Já o cálculo de Ito é amplamente utilizado em matemática financeira, como por exemplo, no desenvolvimento do modelo de Black-Scholes (vide seção 4.9), que é muito utilizado na determinação do preço de ações no mercado de opções. É importante observar que o cálculo de Stratonovich não pode ser utilizado neste caso, pois em sua integral estocástica [vide Eq. (4.43)], o integrando é determinado como a média entre os valores dos extremos de cada subintervalo, ou seja, $(\frac{1}{2}).[X(t_{k-1}) + X(t_k)]$. Isto exigiria que os preços das ações no mercado financeiro fossem conhecidos no tempo t_k , o que não ocorre na prática.

4.14.5 Utilização do cálculo estocástico de Ito e de Stratonovich nesta tese

De acordo com OKSENDAL (2000), existe uma equivalência matemática entre as soluções obtidas para uma equação diferencial estocástica, utilizando-se os cálculos estocásticos de Ito e de Stratonovich.

Assim, sejam as equações diferenciais estocásticas representadas respectivamente nos cálculos estocásticos de Stratonovich e de Ito como:

$$dX_t = a(t, X_t).dt + b(t, X_t) \circ dW_t \quad (4.58)$$

$$dX_t = a(t, X_t).dt + b(t, X_t).dW_t \quad (4.59)$$

A Eq. (4.59) pode ser modificada para que ela, no cálculo de Ito, seja equivalente a Eq. (4.58) no cálculo de Stratonovich. Esta modificação consiste em se adicionar a Eq. (4.59), o termo $(\frac{1}{2}).b(t, X_t).b'(t, X_t).dt$, dando origem a seguinte equação (OKSENDAL, 2000):

$$dX_t = a(t, X_t).dt + (\frac{1}{2}).b(t, X_t).b'(t, X_t).dt + b(t, X_t).dW_t \quad (4.60)$$

onde $b'(t, X_t) = \frac{\partial b(t, X_t)}{\partial x}$.

No cálculo de Stratonovich, a solução da Eq. (4.58) pode ser representada pela seguinte equação (OKSENDAL, 2000):

$$X_t = X_0 + \int_0^T a(t, X_t).dt + \int_0^T b(t, X_t) \circ dW_t \quad (4.61)$$

onde X_0 é a condição de valor inicial do processo estocástico X_t , ou seja, o seu valor em $t = 0$.

No cálculo de Ito, a solução equivalente a Eq. (4.61) pode ser representada como:

$$X_t = X_0 + \int_0^T a(t, X_t).dt + (\frac{1}{2}).\int_0^T b(t, X_t).b'(t, X_t).dt + \int_0^T b(t, X_t).dW_t \quad (4.62)$$

Na seção 5.2.3.4 é mostrado que a Eq. (5.72) representa a altura de coluna de líquido no interior do repositório. Adicionalmente, observa-se que esta é a única equação estocástica que é resolvida nesta tese, já que nas demais equações estocásticas (balanço

de massa) o termo estocástico é insignificante para as condições do repositório de Abadia de Goiás e foi desprezado (vide Apêndices D e E).

Na Eq. (5.72), observa-se que $b(t, X_t) = \frac{F_d(t)}{n}$ e conseqüentemente $b'(t, X_t) = 0$.

Substituindo-se esta última expressão na Eq. (4.62), obtém-se:

$$X_t = X_0 + \int_0^T a(t, X_t).dt + \int_0^T b(t, X_t).dW_t \quad (4.63)$$

Comparando-se as Eqs. (4.61) e (4.63) observa-se que em princípio se poderia utilizar nesta tese tanto o cálculo estocástico de Ito como o de Stratonovich. Entretanto, a opção de se trabalhar também com métodos numéricos conduz naturalmente a utilização do cálculo estocástico de Ito.

4.15 MÉTODOS NUMÉRICOS PARA SOLUÇÃO DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS ORDINÁRIAS

4.15.1 Geral

Existem muitos métodos numéricos desenvolvidos para a solução de equações diferenciais ordinárias determinísticas (ALVIM, 2007; ÖZISIK, 1994; VASCONCELLOS & AMORIM, 2001) e estocásticas (ABUKHALED, 1995; MAHONY, 2013; BURRAGE et al., 2007; BURRAGE et al., 2014; KLOEDEN & PLATEN, 1999; SAYTO, 2013; AMINI et al., 2011; SAUER, 2012), dentre os quais se destacam o método de Runge-Kutta de 4ª ordem para a solução de equações determinísticas e os métodos de Euler-Maruyama, Milstein e de Runge-Kutta para a solução das equações estocásticas (KLOEDEN & PLATEN, 1999; SAUER, 2012).

Aqui será dada ênfase aos métodos de Runge-Kutta de 4ª ordem e de Euler-Maruyama, por serem os métodos mais conhecidos para a solução de equações

diferenciais ordinárias, e por serem adequados para a solução das equações tratadas nesta tese.

4.15.2 Método de Runge-Kutta de 4ª ordem

De acordo com VALLE (2012) uma função $y(x)$ que contenha $k+1$ derivadas contínuas em um intervalo aberto, contendo a e x , pode ser expandida na seguinte série de Taylor:

$$y(x) = y(a) + y'(a) \cdot \frac{(x-a)}{1!} + \dots + y^{(k)}(a) \cdot \frac{(x-a)^k}{k!} + y^{(k+1)}(c) \cdot \frac{(x-a)^{k+1}}{(k+1)!} \quad (4.64)$$

onde c é algum número entre a e x . Substituindo-se na Eq. (4.64) a por x_n e x por $x_{n+1} = x_n + h$, obtém-se:

$$y(x_{n+1}) = y(x_n + h) = y(x_n) + h \cdot y'(x_n) \cdot \frac{(x-a)}{1!} + \frac{h^2}{2!} \cdot y''(x_n) + \dots + \frac{h^{(k+1)}}{(k+1)!} \cdot y^{(k+1)}(c) \quad (4.65)$$

O método de Runge-Kutta de primeira ordem é obtido fazendo-se $k = 1$ na Eq. (4.65). Assim, obtém-se:

$$y_{n+1} = y_n + h \cdot y'_n \quad (4.66)$$

Este método numérico é desenvolvido para equações diferenciais ordinárias (EDO) que satisfazem a equação:

$$y^{(n)} = f(x, y, y', y'', \dots, y^{(n-1)}) \quad (4.67)$$

Substituindo-se a Eq. (4.67) na Eq. (4.66) obtém-se a equação discretizada para o método de Runge-Kutta de primeira ordem:

$$y_{n+1} = y_n + h.f(x_n, y_n) \quad (4.68)$$

que é igual ao método de Euler básico.

Para se obter o método de Runge-Kutta de quarta ordem primeiro deve-se substituir $k = 4$ na Eq. (4.64), de maneira que:

$$y(x_n + 1) = y(x_n + h) = y(x_n) + h.y'(x_n) + \frac{h^2}{2!}.y''(x_n) + \frac{h^3}{3!}.y^{(3)}(x_n) + \frac{h^4}{4!}.y^{(4)}(x_n) + \frac{h^5}{5!}.y^{(5)}(c) \quad (4.69)$$

O procedimento de Runge-Kutta de quarta ordem consiste em encontrar constantes apropriadas de tal forma que a fórmula:

$$y_{n+1} = y_n + a.k_1 + b.k_2 + c.k_3 + d.k_4 \quad (4.70)$$

considerando:

$$y(x_{n+1}) = y_n + h.\varphi(x_n, y_n; h) \quad (4.71)$$

onde:

$$k_1 = h.f(x_n, y_n) \quad (4.72)$$

$$k_2 = h.f(x_n + \alpha_1.h, y_n + \beta_1.k_1) \quad (4.73)$$

$$k_3 = h.f(x_n + \alpha_2.h, y_n + \beta_2.k_1 + \beta_3.k_2) \quad (4.74)$$

$$k_4 = h.f(x_n + \alpha_3.h, y_n + \beta_4.k_1 + \beta_5.k_2 + \beta_6.k_3) \quad (4.75)$$

coincida com um polinômio de Taylor de grau quatro,

$$p_4(x) = y(a) + y'(a).(x-a) + \frac{y''(a)}{2!}.(x-a)^2 + \frac{y^{(3)}(a)}{3!}.(x-a)^3 + \frac{y^{(4)}(a)}{4!}.(x-a)^4 \quad (4.76)$$

Isso resulta em 11 equações para 13 incógnitas, ou seja, possui infinitas soluções. O mais popular é o seguinte método:

$$y_{n+1} = y_n + \left(\frac{1}{6}\right).(k_1 + 2.k_2 + 2.k_3 + k_4) \quad (4.77)$$

com:

$$k_1 = h.f(x_n, y_n) \quad (4.78)$$

$$k_2 = h.f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2}\right) \quad (4.79)$$

$$k_3 = h.f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_2}{2}\right) \quad (4.80)$$

$$k_4 = h.f(x_n + h, y_n + k_3) \quad (4.81)$$

4.15.3 Método de Euler-Maruyama

4.15.3.1 Geral

A discretização mais simples no tempo de um processo estocástico de Ito é a aproximação de Euler-Maruyama (KLOEDEN & PLATEN, 1999; SAUER, 2012).

Seja o processo estocástico de Ito, $X = \{X_t, t_0 \leq t \leq T\}$, satisfazendo a Eq. (4.2) em $t_0 \leq t \leq T$, com valor inicial $X_{t_0} = X_0$.

Para uma dada discretização $t_0 = \tau_0 < \tau_1 < \tau_2 \dots < \tau_n \dots < \tau_N = T$ do intervalo de tempo $[t_0, T]$, uma aproximação de Euler-Maruyama resulta em um processo estocástico em tempo contínuo $Y = \{Y(t), t_0 \leq t \leq T\}$ satisfazendo ao seguinte esquema iterativo:

$$Y_{i+1} = Y_i + a(\tau_i, Y_i) \Delta\tau_i + b(\tau_i, Y_i) \Delta W_i \quad (4.82)$$

para $i = 0, 1, 2, \dots, N-1$ com valor inicial $Y_0 = X_0$, $Y_n = Y(\tau_n)$, $\Delta\tau_{i+1} = \tau_{i+1} - \tau_i$ e $\Delta W_{i+1} = W_{\tau_{i+1}} - W_{\tau_i} = \sqrt{(\tau_{i+1} - \tau_i)} \cdot n_{i+1}$, onde os n_{i+1} são números extraídos aleatoriamente de uma distribuição normal padrão (distribuição normal com média 0 e variância igual a 1), $N(0, 1)$.

Quando for conveniente se utilizar $i = 1, 2, \dots, N$, então $\Delta\tau_i = \tau_i - \tau_{i-1}$ e $\Delta W_i = W_{\tau_i} - W_{\tau_{i-1}} = \sqrt{(\tau_i - \tau_{i-1})} \cdot n_i = n_i \cdot \sqrt{\Delta\tau_i}$.

4.15.3.2 Consistência, convergência e estabilidade

4.15.3.2.1 Geral

O estudo da consistência, convergência e estabilidade de métodos numéricos determinísticos é encontrado em ALVIM (2007) e FORTUNA (2000).

Nesta seção será dada ênfase ao estudo da consistência, convergência e estabilidade do método de Euler-Maruyama, enfocando algumas definições importantes. O estudo propriamente dito é mostrado no Apêndice F deste trabalho.

4.15.3.2.2 Consistência

O estudo da consistência para uma aproximação numérica de um processo estocástico de Ito é dividido em 2 grupos, ou seja, a consistência forte e a consistência fraca.

4.15.3.2.2.1 Consistência forte

Uma aproximação discreta Y^δ , correspondendo a uma discretização de tempo $(\tau)_\delta = \{\tau_n : n = 0, 1, 2, \dots\}$, com um incremento máximo de tempo, δ , para um processo estocástico de Ito, é uma consistência forte se existe uma função não negativa $c = c(\delta)$ com (KLOEDEN & PLATEN, 1999):

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} c(\delta) = 0 \quad (4.83)$$

tal que:

$$E \left[\left| E \left(\frac{Y_{n+1}^\delta - Y_n^\delta}{\Delta n} \mid A_{\tau_n} \right) - a(\tau_n, Y_n^\delta) \right|^2 \right] \leq c(\delta) \quad (4.84)$$

e

$$E \left(\frac{1}{\Delta n} \left| Y_{n+1}^\delta - Y_n^\delta - E(Y_{n+1}^\delta - Y_n^\delta \mid A_{\tau_n}) - b(\tau_n, Y_n^\delta) \cdot \Delta W_n \right|^2 \right) \leq c(\delta) \quad (4.85)$$

onde $a(\tau_n, Y_n^\delta)$ e $b(\tau_n, Y_n^\delta)$ representam os termos de arraste médio e difusivo do processo estocástico de Ito, respectivamente. Os símbolos W_n , E , A_{τ_n} e Δn representam respectivamente o processo de Wiener ou movimento browniano padrão (MBP), a esperança matemática ou média, a família de conjuntos σ -álgebras e o incremento de tempo.

4.15.3.2.2 Consistência fraca

Uma aproximação discreta Y^δ , correspondendo a uma discretização de tempo $(\tau)_\delta = \{\tau_n : n = 0, 1, 2, \dots\}$, com um incremento máximo de tempo, δ , para um processo de Ito, é uma consistência fraca se existe uma função não-negativa $c = c(\delta)$ que atenda às Eqs. (4.83) e (4.84), e (KLOEDEN & PLATEN, 1999):

$$E\left[\left|E\left[\frac{1}{\Delta n}(Y_{n+1}^\delta - Y_n^\delta).(Y_{n+1}^\delta - Y_n^\delta)^T \mid A_{\tau_n}\right] - b(\tau_n, Y_n^\delta).b(\tau_n, Y_n^\delta)^T\right|^2\right] \leq c(\delta) \quad (4.86)$$

onde $(Y_{n+1}^\delta - Y_n^\delta)^T$ é o transposto do vetor $(Y_{n+1}^\delta - Y_n^\delta)$. Os demais termos já foram definidos anteriormente.

4.15.3.2.3 Convergência

De maneira similar ao apresentado para a consistência, a convergência de uma aproximação numérica de um processo estocástico de Ito também se divide em convergência forte e fraca.

4.15.3.2.3.1 Convergência forte

Um processo estocástico aproximado de Ito, Y , converge fortemente para um processo estocástico exato, X , com ordem $\gamma \in [0, \infty)$, se existe uma constante finita K e uma constante positiva δ_0 tal que (KLOEDEN & PLATEN, 1999):

$$E[|X_T - Y_N(T)|] \leq K.\delta^\gamma \quad \forall \delta \in (0, \delta_0) \quad (4.87)$$

onde δ é o incremento de tempo.

Observa-se, com o auxílio da Eq. (4.87), que a convergência forte se baseia na média do módulo das diferenças entre os caminhos ou trajetórias (*paths*) da solução exata e da aproximada, no instante de tempo $t = T$, do intervalo $[0, T]$. Em outras palavras, o que se almeja neste caso é verificar se existe a convergência entre os caminhos ou trajetórias (*paths*) da solução exata e da aproximada, no instante de tempo T , ou seja, no final do intervalo de tempo.

De acordo com KLOEDEN & PLATEN (1999), o método de Euler-Maruyama utilizado nesta tese tem ordem de convergência forte igual a 0,5, ou seja, $\gamma = 0,5$.

4.15.3.2.3.2 Convergência fraca

Um processo estocástico aproximado, Y , converge fracamente para um processo estocástico exato, X , com ordem $\beta \in [0, \infty)$, se para qualquer polinômio g existe uma constante finita K e uma constante positiva δ_0 tal que (KLOEDEN & PLATEN, 1999):

$$|E[g(X_T)] - E[g(Y_N(T))]| \leq K \cdot \delta^\beta \quad \forall \delta \in (0, \delta_0) \quad (4.88)$$

onde δ é o incremento de tempo e a classe das funções g utilizadas é mostrada em KLOEDEN & PLATEN (1999).

É importante frisar que a utilização dos polinômios g é particularmente importante nos casos em que não se conhece a solução exata, X_T , do problema, mas sim uma aproximação da distribuição de probabilidade de X_T .

Observa-se, com o auxílio da Eq. (4.88), que a convergência fraca se baseia no módulo da diferença das médias entre os caminhos ou trajetórias (*paths*) da solução exata e da solução aproximada, no instante de tempo $t = T$, do intervalo $[0, T]$. O interesse neste caso é verificar se existe a convergência entre as médias dos caminhos das soluções exata e aproximada, no instante de tempo T .

O método de Euler-Maruyama possui ordem de convergência fraca igual a 1, ou seja, $\beta = 1$ (KLOEDEN & PLATEN, 1999).

4.15.3.2.4 Estabilidade

A estabilidade de uma aproximação numérica de um processo estocástico de Ito pode ser analisada, utilizando-se os métodos dos momentos (assintoticamente p -estável e exponencialmente p -estável) e o segundo método de Lyapunov (KLOEDEN & PLATEN, 1999; MAHONY, 2013; HIGHAM, 2010; SAYTO, 2013; SAYTO & MITSUI, 2002; HERZOG, 2010).

Por ser um dos métodos mais utilizados no estudo de equações diferenciais estocásticas (SAYTO, 2013; HIGHAM, 2010; KLOEDEN & PLATEN, 1999), aqui será apresentada uma breve descrição do método *assintoticamente p -estável*.

Para a definição deste método, deve-se considerar inicialmente a equação diferencial estocástica de Ito, representada pela Eq. (4.2), e reproduzida aqui como:

$$dX_t = a(t, X_t).dt + b(t, X_t).dW_t \quad (4.89)$$

Considerando-se $a(t,0) \equiv 0$ e $b(t,0) \equiv 0$, então a solução trivial $X_t \equiv 0$ (solução de equilíbrio para a Eq. (4.89)) é válida para $x_0 \equiv 0$, onde $x_0 = X_{t_0}$.

Assim, o processo estocástico X_t é chamado de *p -estável* se $\forall \varepsilon > 0, \exists \delta > 0$ tal que:

$$\sup_{t_0 \leq t < \infty} E|X_t|^p \leq \varepsilon, \quad \forall X_{t_0} = x_0 \quad \text{e} \quad |x_0| < \delta \quad (4.90)$$

O processo estocástico X_t é chamado de *assintoticamente p -estável* se ele é *p -estável* e se $\exists \varepsilon > 0$ tal que:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} E|X_t|^p = 0 \quad \text{para} \quad X_{t_0} = x_0 \quad (4.91)$$

Quando os valores de p são iguais a 1 (primeiro momento) e 2 (segundo momento) este método é chamado de M-estável (*mean stability*) e MS-estável (*mean square stability*), respectivamente.

Uma aplicação prática do método M-estável é mostrada no Apêndice F desta tese.

5. MODELAGEM MATEMÁTICA

5.1 GERAL

A Fig. 5.1 mostra uma ilustração de um repositório próximo à superfície, para a deposição de rejeitos radioativos de baixo e médio níveis de radiação (CNEN, 1985).

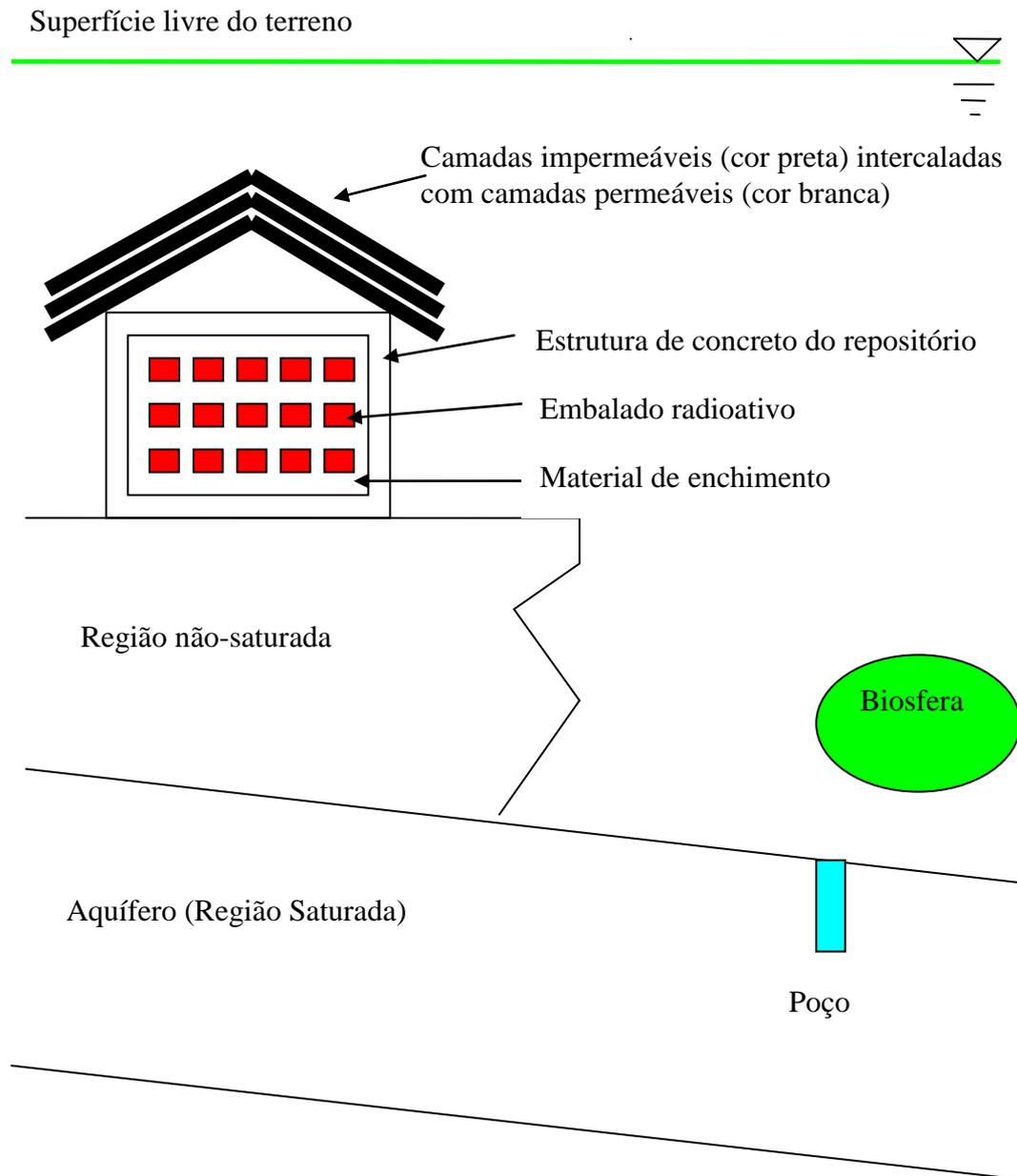


Figura 5.1 - Ilustração de um repositório próximo à superfície, mostrando sua localização em relação ao aquífero, poço de captação de água e biosfera

Observa-se, com o auxílio da Fig. 5.1, que o repositório contém uma cripta de concreto armado, projetada para resistir a terremotos, e construída abaixo da superfície livre do terreno.

Os embalados radioativos são depositados no interior dessa cripta e os espaços vazios são preenchidos com um material de enchimento.

Na região acima do teto do repositório, é prevista a colocação de uma capa protetora, para prevenir que a água proveniente de chuva ou de irrigação da vegetação, existente na camada mais externa do repositório, se infiltre no interior do mesmo. Esta capa é formada pela colocação justaposta e escalonada de camadas impermeáveis e permeáveis, nesta ordem, de cima para baixo. Assim, se a água conseguir se infiltrar através da primeira camada impermeável, devido a alguma degradação da mesma, ela é drenada passivamente pela ação da gravidade na segunda camada, que é permeável. Desta maneira, consegue-se uma boa estratégia de engenharia, para prevenir a infiltração de água no interior do repositório.

Normalmente, logo abaixo do repositório, existe uma região onde os poros do meio não estão completamente cheios de água, e que por isso é chamada de região não-saturada. À medida que se escolhem pontos situados cada vez mais abaixo da superfície livre do terreno, e conseqüentemente abaixo do repositório, observa-se que o teor de umidade do poro vai aumentando até chegar num local onde o poro se encontra completamente cheio de líquido, que recebe o nome de região saturada. É na região saturada que fica o aquífero.

A região próxima ao repositório (*near field*) é a área escavada de um repositório, próxima ou em contato com os embalados radioativos, incluindo os materiais de enchimento (*backfill*) ou selagem (*sealing*), e as partes do meio/rocha hospedeiros (*hosts*) cujas características são ou podem ser alteradas pelo repositório ou por seu conteúdo (IAEA, 2003).

A região distante do repositório (*far field*) é a geosfera localizada além da instalação (IAEA, 2003). Observa-se que o poço de captação de água, mostrado na Fig. 5.1, está situado na região distante do repositório, pois todo repositório, durante o

período de controle institucional, possui uma área delimitada que impede a abertura de poços por indivíduos do público.

A biosfera representa todas as formas de vida que podem ser afetadas no caso de um acidente com liberação de material radioativo para o meio ambiente.

5.2 INFILTRAÇÃO DE ÁGUA NO INTERIOR DO REPOSITÓRIO

5.2.1 Geral

A Agência Internacional de Energia Atômica (IAEA, 1999, 2002) associa 3 (três) fases ao tempo de vida de um repositório próximo à superfície, a saber: fase pré-operacional (período de estudo de localização, projeto e construção), fase operacional (período de operação e fechamento) e fase de pós-fechamento (qualquer atividade após o fechamento).

A avaliação do cenário de acidente de infiltração de água no repositório é realizada para a última fase do repositório, quando o mesmo se encontra no período de controle institucional, que é de responsabilidade do órgão licenciador. Este período de controle institucional pode ser de até 300 anos, o que equivale a 10 meias vidas do Cs-137, considerado como radionuclídeo de referência.

A postulação deste acidente parte do princípio de que, após o fechamento do repositório, suas barreiras de engenharia, sua estrutura de concreto e os próprios embalados radioativos começam a se degradar pelo envelhecimento e pelas agressões provocadas pelo meio ambiente, na região próxima ao repositório.

No caso aqui analisado, consideram-se que após um instante de tempo, t_f , na fase de pós-fechamento do repositório, estarão degradados suas camadas protetoras superiores, seu teto, seu material de enchimento e os embalados radioativos, permanecendo não-degradados apenas a sua base e suas paredes laterais. Vários graus de degradação das camadas protetoras superiores e do teto do repositório podem ser simulados por uma função degradação, F_d , que é considerada no modelo.

Com a degradação das camadas protetoras da cobertura e do teto do repositório, a água proveniente da chuva e da própria irrigação da camada de solo mais externa do repositório poderá se infiltrar no interior do mesmo.

Adicionalmente, considera-se que a presença de fraturas, tanto no teto como no material de enchimento (*backfill*) do repositório, permitirá que o líquido infiltrado possa escoar livremente no interior da estrutura de concreto com perda de carga desprezível.

Simultaneamente, considera-se que quando ocorrer essa infiltração de água, os embalados radioativos já estarão degradados o suficiente para permitir que ocorra a formação de uma mistura líquida radioativa (água + radionuclídeos) no interior do repositório (fase líquida), e que seja estabelecido um equilíbrio químico entre as concentrações de radionuclídeos nas fases sólida (radionuclídeo + sólidos) e líquida, num processo conhecido como sorção (RANÇON, 1972).

À medida que a água se infiltra no repositório, aumenta o volume de sua fase líquida e conseqüentemente a pressão em seu interior. Com este aumento de pressão, parte da mistura líquida irá inicialmente migrar, para o meio ambiente, pela base do repositório, através dos poros do concreto.

Se a infiltração de água for grande o suficiente para provocar um aumento no nível de líquido no interior da estrutura de concreto, ocorrerá a fuga de mistura (água + radionuclídeos) não só pela base do repositório, mas também por suas paredes laterais, através dos poros do concreto. A vazão volumétrica de mistura através dos poros do concreto é determinada utilizando a lei de Darcy (DARCY, 1856).

Quando o nível de líquido no interior do repositório atingir seu valor máximo, H_r , ocorrerá o transbordamento do mesmo. Durante o transbordamento, o líquido que sai pelo teto do repositório possui uma concentração em atividade inferior ao que sai pela base e pelas paredes laterais do mesmo. Isso ocorre porque o líquido que é liberado pelo teto do repositório fica pouco tempo no interior do mesmo, não atingindo a concentração de equilíbrio entre as fases sólida e líquida do repositório. Esta diferença de concentração entre as vazões volumétricas de mistura que saem pelo teto, e que saem

pela base e paredes laterais do repositório é levada em consideração na modelagem matemática, com a utilização de um fator de mistura, f_m .

5.2.2 Modelo determinístico

5.2.2.1 Determinação da vazão volumétrica de água que entra no repositório

Uma representação esquemática da infiltração de água na estrutura de concreto do repositório é mostrada na Fig. 5.2.

São mostradas nessa figura as taxas de precipitação pluviométrica, \dot{p} , de irrigação do repositório, \dot{i}_r , de evapotranspiração, \dot{e} , e da vazão de água tangente à camada de solo mais externa do repositório (*surface runoff*), \dot{r} .

São mostradas ainda, a vazão volumétrica de água que entra pelo teto do repositório, \dot{Q}_1 , e as vazões volumétricas de mistura que saem pela base, \dot{Q}_2 , pelas paredes laterais, \dot{Q}_3 , e pelo teto do repositório, \dot{Q}_4 .

Um balanço de massa nas camadas protetoras do repositório, envolvendo as taxas \dot{p} , \dot{i}_r , \dot{e} , e \dot{r} fornece a vazão volumétrica de água por unidade de área de escoamento, \dot{q}_1 , que consegue ultrapassar as barreiras de engenharia e atingir o teto do repositório. Assim, de acordo com ALVES & PASSOS (1995), o parâmetro \dot{q}_1 pode ser determinado pela equação:

$$\dot{q}_1 = \dot{p} + \dot{i}_r - \dot{e} - \dot{r} \quad (5.1)$$

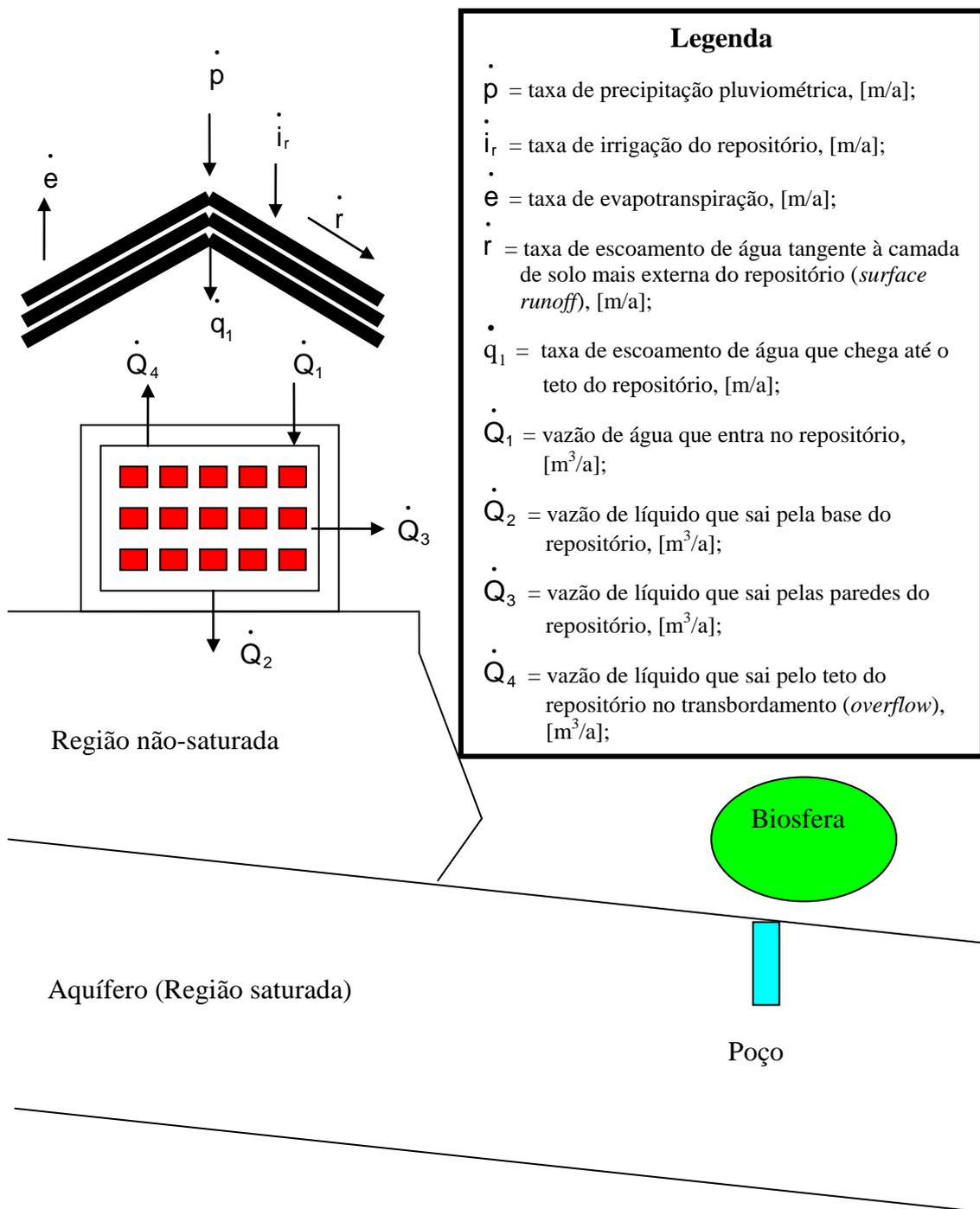


Figura 5.2 - Ilustração de um cenário de infiltração de água no interior de um repositório próximo à superfície

Nas Figs. 5.3 e 5.4 são mostradas a vista superior e a vista lateral da estrutura de concreto do repositório. Estas figuras são importantes para o perfeito entendimento dos parâmetros que aparecem nas equações que serão desenvolvidas neste trabalho.

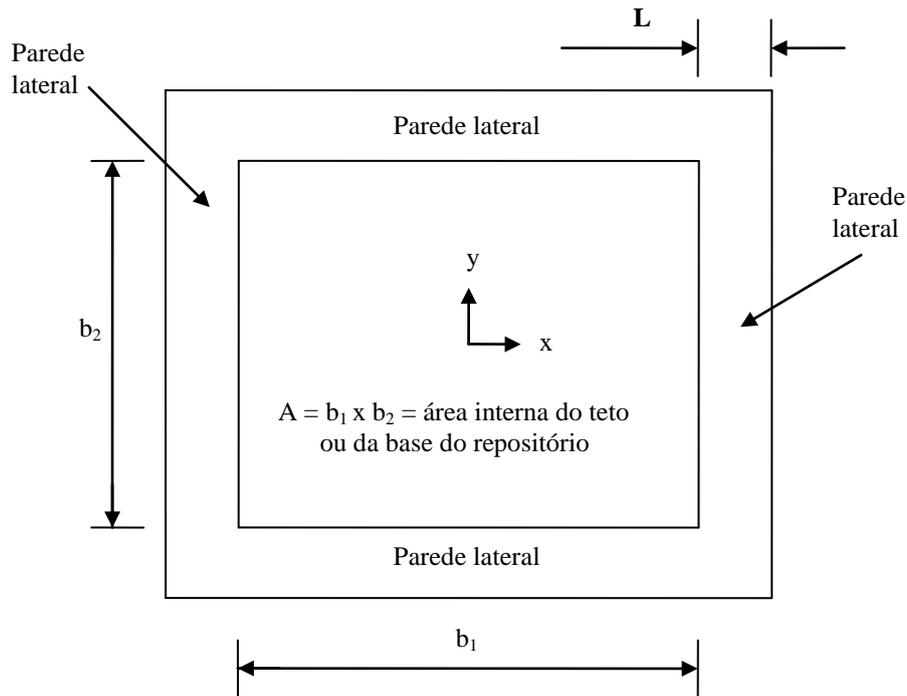


Figura 5.3 - Vista superior da estrutura de concreto do repositório

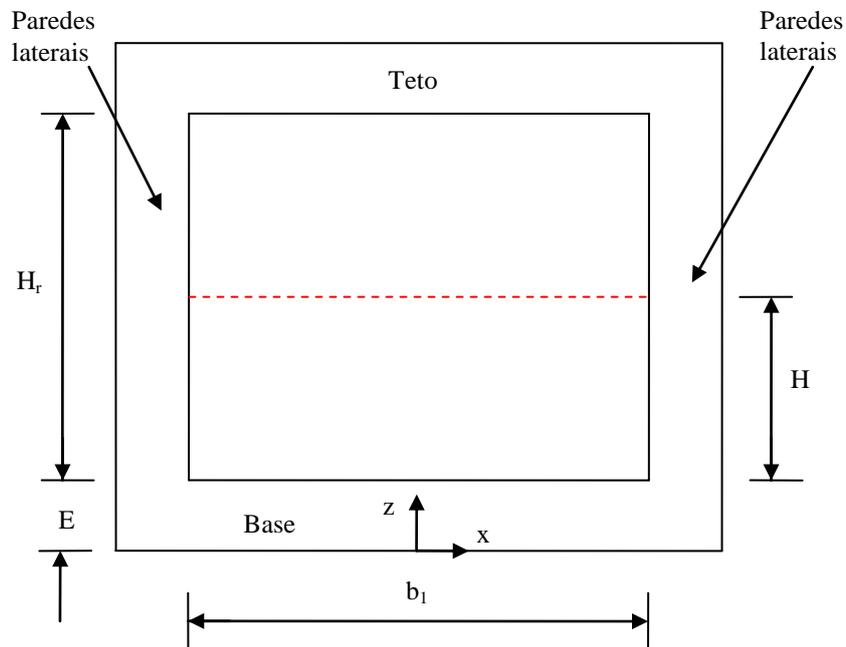


Figura 5.4 - Vista lateral da estrutura de concreto do repositório

A vazão volumétrica de água que entra no repositório através do teto do mesmo, \dot{Q}_1 , foi determinada por ALVES & PASSOS (1995) como:

$$\dot{Q}_1 = \dot{q}_1 \cdot A \cdot F_d(t) \quad (5.2)$$

onde:

A = área interna do teto do repositório, [m²];

F_d(t) = função de degradação do teto do repositório (0 ≤ F_d(t) ≤ 1). É atribuído a esta função um valor igual a 0,10 (vide Tabela 6.1).

Substituindo-se a Eq. (5.1) na Eq. (5.2), obtém-se:

$$\dot{Q}_1 = F_d(t) \cdot A \cdot (\dot{p} + \dot{i}_r - \dot{e} - \dot{r}) \quad (5.3)$$

5.2.2.2 Altura de coluna de líquido no interior do repositório

5.2.2.2.1 Geral

Na Fig. 5.5 é mostrado um corte da estrutura de concreto do repositório mostrando a degradação do teto, do material de enchimento (*backfill*) e dos embalados de rejeitos radioativos.

Considera-se que tanto as paredes laterais como a base do repositório não sofrem degradação, para que possa ser idealizado o transbordamento do repositório.

Conforme mencionado anteriormente, a água entra no repositório a uma vazão volumétrica \dot{Q}_1 e imediatamente atinge a base do mesmo, uma vez que é considerado que a resistência hidráulica na região interna do repositório é desprezível.

Com os embalados degradados, ocorrerá a formação de uma fase líquida (água + radionuclídeo) que pode migrar, para fora do repositório, tanto pela base como por suas paredes laterais, com vazões volumétricas iguais a \dot{Q}_2 e \dot{Q}_3 , respectivamente.

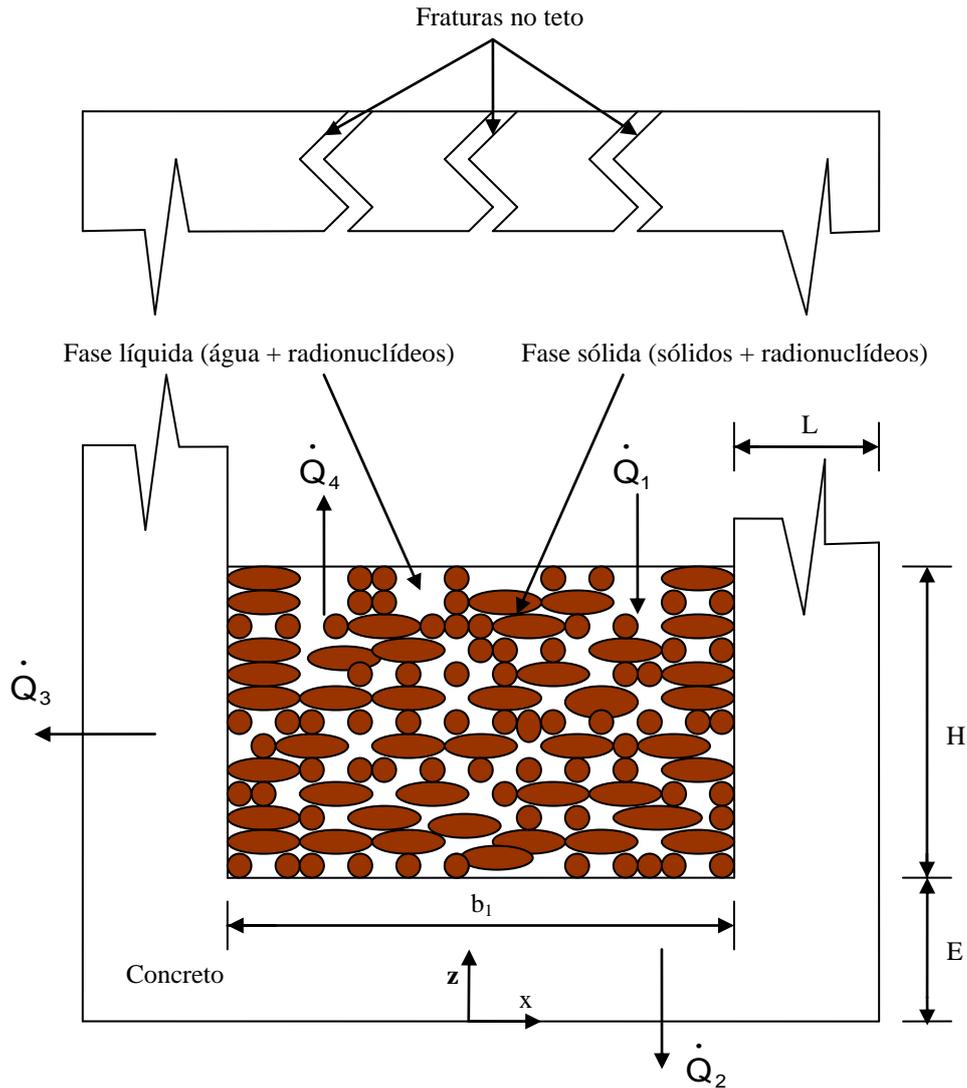


Figura 5.5 - Um corte da estrutura de concreto do repositório, mostrando a infiltração de água, após a degradação do teto, do material de enchimento (*backfill*) e dos embalados de rejeitos radioativos

Se a vazão volumétrica \dot{Q}_1 for maior que a soma das vazões \dot{Q}_2 e \dot{Q}_3 , ocorrerá um aumento na altura de coluna, H , podendo chegar até ao transbordamento (*overflow*) do repositório, dando origem à vazão volumétrica de transbordamento da fase líquida \dot{Q}_4 .

Considerando-se um volume de controle, V_c , envolvendo a superfície externa da estrutura de concreto do repositório, obtém-se a seguinte equação para o transporte de líquido em um meio poroso não-saturado (ANSI/ANS-2.17, 1980):

$$\left[\frac{\theta}{n} \cdot \alpha' + \theta \cdot \beta' + \frac{d\theta}{dh}\right] \cdot \frac{\partial h}{\partial t} = \nabla \cdot [\tilde{K}(h) \cdot (\vec{\nabla}h + \vec{\nabla}z)] \quad (5.4)$$

onde:

θ = conteúdo de líquido no poro;

n = porosidade do meio;

α' = coeficiente de compressibilidade modificado do meio, [m⁻¹];

β' = coeficiente de compressibilidade modificado do líquido, [m⁻¹];

h = pressão manométrica, [m];

t = tempo, [a];

\tilde{K} = tensor condutividade hidráulica, [m/a];

z = elevação, [m];

$\nabla \cdot$ = operador divergente, [m⁻¹];

∇ = operador gradiente, [m⁻¹].

Se forem desprezados os efeitos de compressibilidade do meio e do líquido, então $\alpha' = \beta' = 0$ (vide seção 5.2.2.3.1). Assim, a Eq. (5.4) poderá ser colocada na seguinte forma:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \nabla \cdot [\tilde{K}(h) \cdot (\vec{\nabla}h + \vec{\nabla}z)] \quad (5.5)$$

que é conhecida como equação de Richards (RICHARDS, 1931). Esta equação é exhaustivamente estudada em PACHEPSKY et al. (2003), ROSS (2006), SADEGHI et al. (2012), NACHABE et al. (1994), CAPUTO & STEPANYANTS (2008), LEE & ABRIOLA (1999), DAY (2014) e KAVANAGH et al. (2009).

Integrando-se a Eq. (5.5) no volume de controle, V_c , representativo da estrutura de concreto do repositório, obtém-se:

$$\int_{V_c} \frac{\partial \theta}{\partial t} \cdot dV = \int_{V_c} \nabla \cdot [\tilde{K}(h) \cdot (\vec{\nabla}h + \vec{\nabla}z)] \cdot dV \quad (5.6)$$

Pelo teorema da divergência, observa-se que a Eq. (5.6) pode ser transformada em:

$$\int_{V_c} \frac{\partial \theta}{\partial t} . dV = \int_{S_c} [\tilde{K}(h) . (\vec{\nabla}h + \vec{\nabla}z)] * \vec{s} . dS \quad (5.7)$$

onde o símbolo * representa o produto interno ou escalar entre 2 vetores e \vec{s} representa um vetor unitário normal à superfície dS , localizada na fronteira do volume de controle V_c .

Considerando-se que θ seja função apenas do tempo t (vide seção 5.2.2.3.1), então a Eq. (5.7) pode ser colocada na forma:

$$\frac{d\theta}{dt} . V_t = \int_{S_c} [\tilde{K}(h) . (\vec{\nabla}h + \vec{\nabla}z)] * \vec{s} . dS \quad (5.8)$$

O volume total, V_t , no interior do volume de controle, pode ser representado pela expressão (ZARADNY, 1993):

$$V_t = V_s + V_w + V_p \quad (5.9)$$

onde os símbolos V_s , V_w e V_p representam respectivamente o volume do sólido (*skeleton*), o volume do líquido e o volume de ar no poro.

Se o volume de poros é representado pelo símbolo V_n , então a porosidade, n , é definida como (ZARADNY, 1993):

$$n = \frac{V_n}{V_t} \quad (5.10)$$

Considerando-se que a porosidade, n , seja uniforme no meio, observa-se que a Eq. (5.10) se reduz a:

$$n = \frac{A_n}{A} \quad (5.11)$$

onde A_n e A representam respectivamente a área dos poros e área transversal do meio.

Considerando-se que abaixo do nível H , o líquido ocupa totalmente os vazios dos poros e desprezando o volume de líquido acima deste nível, o volume de líquido no interior do repositório, V_w , é:

$$V_w = n.A.H \quad (5.12)$$

onde H é a altura de coluna de líquido mostrada na Fig. 5.5.

De acordo com ZARADNY (1993), o conteúdo de líquido no interior do poro, θ , pode ser representado pela equação:

$$\theta = \frac{V_w}{V_t} \quad (5.13)$$

Substituindo-se as Eqs. (5.12) e (5.13) na Eq. (5.8) obtém-se a seguinte equação:

$$n.A. \frac{dH}{dt} = \int_{S_c} [\tilde{K}(h).(\vec{\nabla}h + \vec{\nabla}z)] * \vec{s}.dS \quad (5.14)$$

O termo no membro direito da Eq. (5.14) representa o balanço entre a vazão volumétrica de água que entra no repositório e as vazões volumétricas da fase líquida (água + radionuclídeos) que saem do mesmo, obedecendo à lei de Darcy para meios porosos (DARCY, 1856).

Entretanto, ao se utilizar a hipótese de ocorrência de fraturas no teto e no material de enchimento do repositório, observa-se que estas regiões não obedecem à lei de Darcy para meios porosos. Assim, a Eq. (5.14) deve ser modificada.

Por não ter sido considerada a presença de fraturas nem na base e nem nas paredes laterais do repositório, o escoamento de líquido nestas regiões continua obedecendo à referida lei de Darcy e a Eq. (5.14) pode ser substituída pela seguinte equação:

$$n.A. \frac{dH}{dt} = \dot{Q}_1 + \int_{S_c^*} [\tilde{K}(h).(\vec{V}h + \vec{V}z)]^* \vec{s}.dS \quad (5.15)$$

onde \dot{Q}_1 é a vazão volumétrica de água que entra pelo teto do repositório e S_c^* representa as fronteiras da estrutura de concreto do repositório com exceção do teto do mesmo.

Para o sistema de coordenadas ilustrado na Fig. 5.5, observa-se que a vazão de Darcy em meios porosos, \vec{V} , pode ser representada como:

$$\vec{V} = [\tilde{K}(h).(\vec{V}h + \vec{V}z)] \quad (5.16)$$

É importante observar que quando a Eq. (5.16) é aplicada à base e às paredes laterais do repositório (vide Fig. 5.5), o termo $\vec{V}h$ (considera-se que a pressão externa ao repositório é igual a pressão atmosférica) é negativo e o termo $\vec{V}z$ é negativo ou nulo, fazendo com que \vec{V} seja também negativo. Este resultado está coerente com o sistema de coordenadas utilizado na Fig. 5.5. Assim, substituindo-se a Eq. (5.16) na Eq. (5.15), obtém-se:

$$n.A. \frac{dH}{dt} = \dot{Q}_1 + \int_{S_c^*} \vec{V}^* \vec{s}.dS \quad (5.17)$$

Observa-se, com o auxílio da Fig. 5.5, que o escoamento de mistura pela base do repositório é descendente enquanto o “eixo z” tem sentido ascendente. Devido a este fato observa-se que $\vec{V}z = -\vec{k}$.

Assim, considerando o tensor \tilde{K} isotrópico, a Eq. (5.16) pode ser colocada na seguinte forma aberta:

$$\vec{V} = [K_x \cdot \left(\frac{\partial h}{\partial x}\right) \cdot \vec{i} + K_y \cdot \left(\frac{\partial h}{\partial y}\right) \cdot \vec{j} + K_z \cdot \left(\frac{\partial h}{\partial z} - 1\right) \cdot \vec{k}] \quad (5.18)$$

Trabalhando com as equações de Navier-Stokes (BIRD et al., 1960) e com a lei de Darcy para meios porosos (DARCY, 1856), ALVES & PASSOS (1994, 1995) mostraram que para o presente caso, $\frac{\partial h}{\partial x} = \frac{\partial h}{\partial y} = -\frac{y}{L}$ e $\frac{\partial h}{\partial z} = -\frac{H}{E}$, onde L e E são as espessuras das paredes laterais e da base do repositório, respectivamente. Substituindo-se estas relações na Eq.(5.18) observa-se que, para o caso em análise, o vetor vazão de Darcy em meios porosos pode ser representado como:

$$\vec{V} = -[K_x \cdot \left(\frac{y}{L}\right) \cdot \vec{i} + K_y \cdot \left(\frac{y}{L}\right) \cdot \vec{j} + K_z \cdot \left(\frac{H}{E} + 1\right) \cdot \vec{k}] \quad (5.19)$$

Substituindo-se a Eq. (5.19) na Eq. (5.17) obtém-se a seguinte equação:

$$n.A. \frac{dH}{dt} = \dot{Q}_1 - \left\{ \int_{S_c^B} [K_z \cdot \left(\frac{H}{E} + 1\right) \cdot \vec{k}] * \vec{s} \cdot dS + \int_{S_c^P} [K_x \cdot \left(\frac{y}{L}\right) \cdot \vec{i} + K_y \cdot \left(\frac{y}{L}\right) \cdot \vec{j}] * \vec{s} \cdot dS \right\} \quad (5.20)$$

onde os símbolos S_c^P e S_c^B representam as superfícies das paredes laterais e da base do repositório, respectivamente.

Deve-se observar que o segundo e o terceiro termos no membro direito da Eq. (5.20) representam, respectivamente, as vazões volumétricas da fase líquida que saem através da base, \dot{Q}_2 , e das paredes laterais do repositório, \dot{Q}_3 . Ou seja,

$$\dot{Q}_2 = \int_{S_c^B} [K_z \cdot \left(\frac{H}{E} + 1\right) \cdot \vec{k}] * \vec{s} \cdot dS \quad (5.21)$$

$$\dot{Q}_3 = \int_{S_c^P} [K_x \cdot \left(\frac{y}{L}\right) \cdot \vec{i} + K_y \cdot \left(\frac{y}{L}\right) \cdot \vec{j}] * \vec{s} \cdot dS \quad (5.22)$$

5.2.2.2.2 Situação em que não ocorre o transbordamento do repositório

Substituindo-se as Eqs. (5.21) e (5.22) na Eq. (5.20), obtém-se:

$$\frac{dH}{dt} = \frac{1}{n.A} [\dot{Q}_1 - (\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3)] \quad (5.23)$$

As integrais das Eqs. (5.21) e (5.22) foram resolvidas por ALVES & PASSOS (1994), substituindo-se as componentes da condutividade hidráulica K_x , K_y e K_z pela condutividade hidráulica do concreto, K_c , que é considerada constante.

Desta forma, foram obtidas as seguintes equações (ALVES & PASSOS, 1994):

$$\dot{Q}_2 = K_c . A . \left(\frac{H + E}{E} \right) \quad (5.24)$$

onde E e A representam, respectivamente, a espessura e a área interna da base do repositório, enquanto H e K_c já foram definidos anteriormente (vide Figs. 5.3 e 5.4), e

$$\dot{Q}_3 = K_c . \left(\frac{H^2}{L} \right) . (b_1 + b_2) \quad (5.25)$$

onde b_1 e b_2 , representam, respectivamente, a largura e o comprimento da base do repositório, enquanto L representa a espessura das paredes do mesmo.

Substituindo-se as Eqs. (5.3), (5.24) e (5.25) na Eq. (5.23), obtém-se:

$$\frac{dH}{dt} + a.H^2 + b.H + c(t) = 0 \quad (5.26)$$

onde:

$$a = \frac{K_c . (b_1 + b_2)}{n.A.L};$$

$$b = \frac{K_c}{n.E};$$

$$c(t) = \frac{1}{n} [K_c - F_d(t) \cdot (\dot{p} + \dot{i}_r - \dot{e} - \dot{r})].$$

A Eq. (5.26) é uma equação diferencial não-linear de primeira ordem e de primeiro grau, denominada equação de Riccati (KREIDER et al., 1972).

5.2.2.2.3 Quando ocorre o transbordamento do repositório

Observa-se que a altura de coluna de líquido no interior do repositório, H, atinge seu valor máximo H_r (vide Fig. 5.4) e a vazão volumétrica de transbordamento de mistura pelo teto do repositório é determinada pela equação:

$$\dot{Q}_4 = f_m \cdot [\dot{Q}_1 - (\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3)] \quad (5.27)$$

onde f_m ($0 \leq f_m \leq 1$) é o fator de mistura que leva em consideração que a fase líquida que sai pelo teto do repositório possui um valor de concentração em atividade menor do que a que sai pela base e pelas paredes laterais do mesmo. É utilizado conservadoramente um valor igual a 1 para este fator (vide Tabela 6.1).

5.2.2.3 Massa de radionuclídeo na fase líquida no repositório

5.2.2.3.1 Geral

A concentração em massa de radionuclídeos na fase líquida (água + radionuclídeo), no interior do repositório, C, é representada pela seguinte equação (COGHO & BOTA, 1984):

$$\theta.R_d \cdot \frac{\partial C}{\partial t} - \nabla \cdot (\theta.D \cdot \nabla C) + \nabla \cdot (\vec{v}.C) + [R_d \cdot \frac{\partial \theta}{\partial t} + \alpha'.\theta.R_d \cdot \frac{\partial h}{\partial t} + \lambda.\theta.R_d].C = 0 \quad (5.28)$$

onde:

C = concentração em massa de radionuclídeo na fase líquida (água + radionuclídeo), $[\text{kg}/\text{m}^3]$;

C_1 = concentração em massa de radionuclídeo na fase líquida, $[\text{mg}/\text{m}^3]$;

\tilde{D} = tensor coeficiente de dispersão do radionuclídeo no meio, $[\text{m}^2/\text{a}]$;

h = pressão manométrica, $[\text{m}]$;

k_d = coeficiente de distribuição = $\frac{S_1}{C_1}$, $[\text{m}^3/\text{kg}]$;

n = porosidade;

R_d = coeficiente de retardo = $(1 + \frac{\rho \cdot k_d}{n})$;

S_1 = razão entre a massa de radionuclídeo e a massa da fase sólida, $[\text{mg}/\text{kg}]$;

t = tempo, $[\text{a}]$;

\vec{v} = vetor velocidade superficial da fase líquida, $[\text{m}/\text{a}]$;

z = elevação, $[\text{m}]$;

α' = coeficiente de compressibilidade modificado do meio, $[\text{m}^{-1}]$;

λ = constante de decaimento radioativo do radionuclídeo, $[\text{a}^{-1}]$;

ρ = massa específica do meio poroso (sólido + líquido), $[\text{kg}/\text{m}^3]$;

θ = conteúdo volumétrico de líquido no poro;

$\nabla \cdot$ = operador divergente, $[\text{m}^{-1}]$;

∇ = operador gradiente, $[\text{m}^{-1}]$.

A Eq. (5.28) pode ser colocada na seguinte forma:

$$[\theta \cdot R_d \cdot \frac{\partial C}{\partial t} + R_d \cdot \frac{\partial \theta}{\partial t} \cdot C] - \nabla \cdot (\theta \cdot \tilde{D} \cdot \vec{\nabla} C) + \nabla \cdot (\vec{v} \cdot C) + [\alpha' \cdot \theta \cdot R_d \cdot \frac{\partial h}{\partial t} + \lambda \cdot \theta \cdot R_d] \cdot C = 0 \quad (5.29)$$

que é equivalente a:

$$R_d \cdot \frac{\partial (\theta \cdot C)}{\partial t} - \nabla \cdot (\theta \cdot \tilde{D} \cdot \vec{\nabla} C) + \nabla \cdot (\vec{v} \cdot C) + [\alpha' \cdot \theta \cdot R_d \cdot \frac{\partial h}{\partial t} + \lambda \cdot \theta \cdot R_d] \cdot C = 0 \quad (5.30)$$

Desprezando-se a compressibilidade do sólido e a variação espacial da concentração no interior do repositório, a Eq. (5.30) assume a seguinte forma reduzida:

$$R_d \cdot \frac{d(\theta.C)}{dt} = -C \cdot \nabla \cdot (\vec{v}) - \lambda \cdot \theta \cdot R_d \cdot C \quad (5.31)$$

Os efeitos da compressibilidade do meio são levados em consideração normalmente nos estudos de drenagem de solos, onde a retirada do líquido contido no poro pode provocar a deformação do meio poroso por compressão.

A compressão de um solo pode ser provocada por compressão de sua fase sólida, compressão de sua fase fluida e drenagem da fase fluida que preenche os vazios. A expansão ocorre de maneira inversa, ou seja, pela expansão das fases sólida e fluida, e pelo preenchimento dos vazios do meio por um fluido.

No caso da infiltração de água em repositórios de rejeitos radioativos, o poro que estava inicialmente vazio pode ser preenchido com líquido. Como a altura de coluna de líquido máxima no interior do repositório de Abadia de Goiás é igual 4,38 m, observa-se que a pressão no poro é muito baixa para provocar uma expansão significativa. Assim, os efeitos da compressibilidade e expansibilidade do meio podem ser desprezados no interior do repositório de Abadia de Goiás.

Admite-se neste trabalho (vide seção 5.2.1) que a infiltração de água no interior do repositório só ocorre após a degradação completa do seu material de enchimento e dos embalados radioativos depositados em seu interior. Adicionalmente, considera-se nesta mesma seção que a resistência hidráulica é desprezível no interior do repositório, após a sua degradação. Assim, não existem argumentos que justifiquem a consideração da dependência espacial da concentração em atividade no interior do repositório.

De maneira similar à apresentada anteriormente na seção 5.2.2.2.1, integrando-se a Eq. (5.31) no volume de controle, V_c , representativo da estrutura de concreto do repositório, obtém-se:

$$\int_{V_c} R_d \cdot \frac{d(\theta.C).dV}{dt} = - \int_{V_c} C \cdot \nabla \cdot (\vec{v}).dV - \int_{V_c} \lambda \cdot \theta \cdot R_d \cdot C.dV \quad (5.32)$$

Pelo teorema da divergência, observa-se que a Eq. (5.32) pode ser escrita na forma:

$$\int_{V_c} R_d \cdot \frac{d(\theta \cdot C) \cdot dV}{dt} = - \int_{S_c} C \cdot (\vec{v}) * \vec{s} \cdot dS - \int_{V_c} \lambda \cdot \theta \cdot R_d \cdot C \cdot dV \quad (5.33)$$

Na Eq. (5.33), observa-se que é mais fácil trabalhar com a massa de radionuclídeos na fase líquida, M_{rw} , do que com a concentração em massa de radionuclídeos nesta fase, C , pois a mesma está multiplicada pelo parâmetro θ que também é função do tempo.

A concentração C é definida pela equação:

$$C = \frac{M_{rw}}{V_w} \quad (5.34)$$

Das Eqs. (5.13) e (5.34) observa-se que o produto de θ por C pode ser representado como:

$$\theta \cdot C = \frac{M_{rw}}{V_t} \quad (5.35)$$

Substituindo-se as Eqs. (5.34) e (5.35) na Eq. (5.33) obtém-se:

$$\int_{V_c} \left(\frac{R_d}{V_t} \right) \cdot \frac{d(M_{rw})}{dt} \cdot dV = - \left(\frac{M_{rw}}{V_w} \right) \cdot \int_{S_c} \vec{v} * \vec{s} \cdot dS - \int_{V_c} \left(\frac{\lambda \cdot R_d \cdot M_{rw}}{V_t} \right) \cdot dV \quad (5.36)$$

Dos parâmetros que aparecem na Eq. (5.36), considera-se que apenas a massa de radionuclídeos na fase líquida, M_{rw} , e o vetor velocidade desta fase, \vec{v} , são funções do tempo. Os demais parâmetros não são função do tempo e nem do espaço. Desta maneira, a Eq. (5.36) pode ser colocada na seguinte forma:

$$\frac{dM_{rw}}{dt} = - \left[\lambda + \left(\frac{1}{V_w \cdot R_d} \right) \cdot \int_{S_c} \vec{v} * \vec{s} \cdot dS \right] \cdot M_{rw} \quad (5.37)$$

Substituindo-se a Eq. (5.12) na Eq. (5.37) obtém-se a seguinte equação:

$$\frac{dM_{rw}}{dt} = -\left[\lambda + \left(\frac{1}{n.A.R_d.H}\right) \cdot \int \vec{v} * \vec{s}.dS\right].M_{rw} \quad (5.38)$$

A integral que aparece na Eq. (5.38) representa a soma das vazões volumétricas da fase líquida (água + radionuclídeos) que saem do repositório.

5.2.2.3.2 Massa de radionuclídeo no instante da falha do repositório

Se o repositório falha no instante de tempo t_f , então no intervalo $0 \leq t \leq t_f$ a vazão volumétrica da fase líquida que sai do repositório é nula. Assim, a Eq. (5.38) se resume a:

$$\frac{dM_{rw}}{dt} = -\lambda.M_{rw} \quad (5.39)$$

A solução da equação diferencial (5.39) é imediata e pode ser representada pela equação:

$$M_{rw}(t_f) = M_{0w}.e^{-\lambda.t_f} \quad (5.40)$$

onde M_{0w} é a massa inicial de um determinado radionuclídeo na fase líquida no repositório no instante $t = 0$, e M_0 , a massa total do radionuclídeo no repositório (incluindo fase sólida e fase líquida) também em $t = 0$, valor este que é conhecido. Então, M_{0w} pode ser determinado utilizando-se a equação;

$$M_{0w} = \frac{M_0}{R_d} \quad (5.41)$$

Substituindo-se a Eq. (5.41) na Eq. (5.40), obtém-se a seguinte equação:

$$M_{rw}(t_f) = \frac{M_0}{R_d}.e^{-\lambda.t_f} \quad (5.42)$$

5.2.2.3.3 Massa de radionuclídeo após a falha do repositório

5.2.2.3.3.1 Situação em que não ocorre o transbordamento do repositório

A fase líquida deixa o repositório apenas pela base e pelas paredes laterais do mesmo, com vazões iguais a \dot{Q}_2 e \dot{Q}_3 , respectivamente. Assim, a Eq. (5.38) pode ser colocada na forma:

$$\frac{dM_{rw}}{dt} = -\left[\lambda + \left(\frac{\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3}{n.A.R_d.H}\right)\right].M_{rw} \quad (5.43)$$

5.2.2.3.3.2 Quando ocorre o transbordamento do repositório

A altura de coluna de líquido no interior do repositório, H, atinge seu valor máximo H_r e a vazão volumétrica de líquido que sai pelo teto do repositório, \dot{Q}_4 , é diferente de 0 (zero). Assim, a Eq. (5.38) assume a seguinte forma:

$$\frac{dM_{rw}}{dt} = -\left[\lambda + \left(\frac{\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3 + \dot{Q}_4}{R_d.n.A.H_r}\right)\right].M_{rw} \quad (5.44)$$

5.2.2.4 Concentração em atividade na fase líquida no repositório após a falha do mesmo

5.2.2.4.1 Geral

A concentração em massa de radionuclídeo na fase líquida no repositório, C_R , é definida pela Eq. (5.34).

Entretanto, para se obter a concentração em atividade de radionuclídeo, deve-se utilizar a seguinte equação, apresentada por ALVES & PASSOS (1995):

$$C_R = \left(\frac{A_0}{M_0}\right) \cdot \left(\frac{M_{rw}}{V_w}\right) \quad (5.45)$$

onde:

A_0 = Atividade inicial de um determinado radionuclídeo no interior do repositório no instante $t = 0$, [Bq];

M_0 = Massa total inicial de um determinado radionuclídeo no interior do repositório no instante $t = 0$, [kg].

5.2.2.4.2 Situação em que não ocorre o transbordamento do repositório

Substituindo-se a Eq. (5.12) na Eq. (5.45), pode-se calcular a concentração em atividade de radionuclídeo na fase líquida no repositório, antes do transbordamento do mesmo, pela equação:

$$C_R = \left(\frac{A_0}{M_0}\right) \cdot \left(\frac{M_{rw}}{n.A.H}\right) \quad (5.46)$$

É importante frisar que a massa M_{rw} na Eq. (5.46) tem que ser calculada com o auxílio da Eq. (5.43).

5.2.2.4.3 Quando ocorre o transbordamento do repositório

A altura de coluna de líquido no interior do repositório, H , atinge seu valor máximo, H_r e a concentração em atividade de radionuclídeo na fase líquida no repositório pode ser determinada pela equação:

$$C_R = \left(\frac{A_0}{M_0}\right) \cdot \left(\frac{M_{rw}}{n.A.H_r}\right) \quad (5.47)$$

A massa M_{rw} , na Eq. (5.47), é calculada utilizando-se a Eq. (5.44).

5.2.2.5 Taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente

5.2.2.5.1 Geral

A taxa de liberação em atividade de radionuclídeo do repositório para o meio ambiente, \dot{A} , pode ser determinada pela seguinte equação:

$$\dot{A} = C_R \cdot \sum_i \dot{Q}_i \quad (5.48)$$

onde \dot{Q}_i representa as vazões volumétricas da fase líquida que saem do repositório.

5.2.2.5.2 Situação em que não ocorre o transbordamento do repositório

Observa-se que $\sum_i \dot{Q}_i = \dot{Q}_2 + \dot{Q}_3$ e a Eq. (5.48) assume a seguinte forma:

$$\dot{A} = C_R \cdot (\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3) \quad (5.49)$$

5.2.2.5.3 Quando ocorre o transbordamento do repositório

Observa-se que $\sum_i \dot{Q}_i = \dot{Q}_2 + \dot{Q}_3 + \dot{Q}_4$ e a Eq. (5.48) assume a seguinte forma:

$$\dot{A} = C_R \cdot (\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3 + \dot{Q}_4) \quad (5.50)$$

Substituindo-se a Eq. (5.27) na Eq. (5.50), obtém-se:

$$\dot{A} = C_R \cdot [(1 - f_m) \cdot (\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3) + f_m \cdot \dot{Q}_1] \quad (5.51)$$

5.2.2.6 Concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero

5.2.2.6.1 Geral

Observa-se, com o auxílio da Fig. 5.2, que o material radioativo liberado de um repositório próximo à superfície, durante um cenário de acidente com infiltração de água em seu interior, migrará primeiramente para uma região não-saturada localizada logo abaixo do repositório, e posteriormente atingirá o aquífero em um ou mais pontos de descarga.

Considerando-se a presença de apenas um ponto de descarga, observa-se que a concentração em atividade de radionuclídeo neste local do aquífero, C_D , pode ser determinada pela seguinte equação (NUCLEN, 1996):

$$C_D = \frac{\dot{A}_a}{\dot{Q}_a} \quad (5.52)$$

onde \dot{A}_a e \dot{Q}_a representam respectivamente a taxa de descarga em atividade no aquífero e a vazão volumétrica média de água no aquífero.

A vazão volumétrica média de água no aquífero pode ser determinada pela equação (NUCLEN, 1996):

$$\dot{Q}_a = b_a \cdot H_a \cdot v_a \quad (5.53)$$

onde b_a , H_a e v_a representam a largura, a altura e a velocidade da água no aquífero.

Substituindo-se a Eq. (5.53) na Eq. (5.52), obtém-se:

$$C_D = \frac{\dot{A}_a}{b_a \cdot H_a \cdot v_a} \quad (5.54)$$

Sob um ponto de vista conservador, pode-se desprezar a influência da região não-saturada na migração dos radionuclídeos entre o repositório e o aquífero. Assim, a taxa de descarga em atividade no aquífero, \dot{A}_a , é igual à que sai do repositório, \dot{A} .

5.2.2.6.2 Situação em que não ocorre o transbordamento do repositório

A concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero pode ser determinada substituindo-se a Eq. (5.49) na Eq. (5.54). Assim:

$$C_D = \frac{C_R \cdot (\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3)}{b_a \cdot H_a \cdot v_a} \quad (5.55)$$

5.2.2.6.3 Quando ocorre o transbordamento do repositório

A concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero pode ser determinada substituindo-se a Eq. (5.51) na Eq. (5.54). Assim:

$$C_D = \frac{C_R \cdot [(1 - f_m) \cdot (\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3) + f_m \cdot \dot{Q}_1]}{b_a \cdot H_a \cdot v_a} \quad (5.56)$$

5.2.2.7 **Concentração em atividade ao longo do aquífero**

Se forem desprezadas as variações com o tempo do conteúdo de mistura, θ , e da altura manométrica, h , na Eq. (5.28), então esta pode ser utilizada para o aquífero na seguinte forma:

$$\theta \cdot R_{da} \cdot \frac{\partial C}{\partial t} - \nabla \cdot (\theta \cdot \tilde{D} \cdot \nabla C) + \nabla \cdot (\vec{v}_a \cdot C) + \lambda \cdot \theta \cdot R_{da} \cdot C = 0 \quad (5.57)$$

Obviamente que todos os termos na Eq. (5.57) se referem ao aquífero, porém para se evitar a criação exagerada de símbolos, resolveu-se fazer distinção apenas na velocidade da água e no coeficiente de retardo, no aquífero.

Dividindo-se ambos os lados da Eq. (5.57) pelo termo $\theta.R_{da}$ e passando alguns termos para o membro direito da mesma, obtém-se:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\nabla \cdot (\theta \tilde{D} \cdot \vec{\nabla} C)}{\theta R_{da}} - \frac{\nabla \cdot (\vec{v}_a \cdot C)}{\theta R_{da}} - \lambda \cdot C \quad (5.58)$$

Como o aquífero é uma região saturada, então θ não é função do tempo e nem do espaço, e a Eq. (5.58) pode ser colocada na forma:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\nabla \cdot (\tilde{D} \cdot \vec{\nabla} C)}{R_{da}} - \frac{\nabla \cdot (\vec{v}_a \cdot C)}{\theta R_{da}} - \lambda \cdot C \quad (5.59)$$

Em uma região saturada o conteúdo de líquido no poro θ é igual à porosidade do meio n . Assim, substituindo-se a porosidade do aquífero, n_a , na Eq. (5.59) obtém-se:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\nabla \cdot (\tilde{D} \cdot \vec{\nabla} C)}{R_{da}} - \frac{\nabla \cdot [(\vec{v}_a / n_a) \cdot C]}{R_{da}} - \lambda \cdot C \quad (5.60)$$

O vetor \vec{v}_a representa a velocidade superficial da água no aquífero, sendo determinado pela Lei de Darcy, como mostrado na Eq. (5.16). Um valor médio da velocidade superficial da água no aquífero é obtido dividindo-se a vazão volumétrica média de água no aquífero pela área de sua seção transversal média. É importante observar que a velocidade superficial é determinada considerando-se a área total (área de vazios + área de solo) da seção transversal do aquífero.

De acordo com ALVES & PASSOS (2003), o vetor velocidade da água no poro do aquífero, \vec{v}_{pa} , é determinado pela expressão:

$$\vec{v}_{pa} = \frac{\vec{v}_a}{n_a} \quad (5.61)$$

Substituindo-se a Eq. (5.61) na Eq. (5.60), obtém-se:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\nabla \cdot (\tilde{D} \cdot \vec{\nabla} C)}{R_{da}} - \frac{\nabla \cdot [\vec{v}_{pa} \cdot C]}{R_{da}} - \lambda \cdot C \quad (5.62)$$

O símbolo \tilde{D} se refere à dispersão no poro do aquífero e, por isso, é melhor substituí-lo na Eq. (5.62) pelo símbolo \tilde{D}_{pa} , obtendo-se a seguinte equação:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\nabla \cdot (\tilde{D}_{pa} \cdot \vec{\nabla} C)}{R_{da}} - \frac{\nabla \cdot [\vec{v}_{pa} \cdot C]}{R_{da}} - \lambda \cdot C \quad (5.63)$$

O tensor coeficiente de dispersão no poro \tilde{D}_{pa} é determinado pela expressão:

$$\tilde{D}_{pa} = \frac{\tilde{D}_a}{n_a}, \quad (5.64)$$

onde \tilde{D}_a é o tensor coeficiente de difusão do radionuclídeo na água.

Considerando-se que o meio poroso seja unidimensional (direção x) e que \tilde{D}_{pa} e \vec{v}_{pa} sejam constantes, então a Eq. (5.62) pode ser colocada na forma:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = \left(\frac{D_{px}}{R_{da}} \right) \cdot \frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} - \left(\frac{v_{px}}{R_{da}} \right) \cdot \frac{\partial C_A}{\partial x} - \lambda \cdot C_A \quad (5.65)$$

onde C_A é a concentração em atividade no aquífero, e as razões $D_{rx} = \frac{D_{px}}{R_{da}}$ e

$v_{rx} = \frac{v_{px}}{R_{da}}$ representam respectivamente o coeficiente de dispersão e a velocidade do

radionuclídeo no poro. Substituindo-se estas relações na Eq. (5.65), obtém-se a seguinte equação:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = D_{rx} \cdot \frac{\partial^2 C_A}{\partial X^2} - v_{rx} \cdot \frac{\partial C_A}{\partial X} - \lambda \cdot C_A \quad (5.66)$$

Quando a Eq. (5.66) está sujeita às seguintes condições de valor inicial e de contorno, respectivamente,

$$C_A(0,0) = 0, \quad C_A(0,t) = C_D \quad \text{e} \quad C_A(\infty,t) = 0 \quad (5.67)$$

obtém-se a seguinte solução analítica (SCHWARZER, 1972; ALVES & PASSOS, 2003):

$$C_A = (0.5) \cdot C_D \cdot \text{Exp}\left[\left(\frac{v_{rx}}{2 \cdot D_{rx}}\right) \cdot x\right] \cdot \text{Exp}[-B^* \cdot x] \cdot \text{erfc}\left[\frac{x - A^* \cdot t}{2 \cdot \sqrt{D_{rx} \cdot t}}\right] + \\ (0.5) \cdot C_D \cdot \text{Exp}\left[\left(\frac{v_{rx}}{2 \cdot D_{rx}}\right) \cdot x\right] \cdot \text{Exp}[B^* \cdot x] \cdot \text{erfc}\left[\frac{x + A^* \cdot t}{2 \cdot \sqrt{D_{rx} \cdot t}}\right] \quad (5.68)$$

onde:

$$A^* = \sqrt{(v_{rx})^2 + 4 \cdot \lambda \cdot D_{rx}}$$

$$B^* = \sqrt{\left(\frac{v_{rx}}{2 \cdot D_{rx}}\right)^2 + \left(\frac{\lambda}{D_{rx}}\right)}$$

erfc = função erro complementar.

Esta seção (seção 5.2.2) fornece o embasamento teórico necessário para o desenvolvimento dos modelos matemáticos determinísticos 1 e 2, apresentados nos Apêndices A e B, respectivamente.

5.2.3 Modelo estocástico

5.2.3.1 Geral

Conforme mostrado na Eq. (5.3) a vazão volumétrica de água que entra no repositório durante o acidente, \dot{Q}_1 , é função da taxa de precipitação pluviométrica do local do repositório, \dot{p} . Mesmo se for conhecido o comportamento deste parâmetro para um período longo de tempo (período de vários anos), não se pode dizer com precisão qual será o valor desta taxa amanhã ou daqui a alguns anos. Isto ocorre porque a taxa de precipitação pluviométrica em um determinado local ou região é um processo estocástico.

Desta maneira, se justifica a utilização do modelo estocástico na análise de segurança de um repositório de rejeitos radioativos.

5.2.3.2 Taxa de precipitação pluviométrica

Quando a taxa de precipitação pluviométrica é considerada um processo estocástico (LEE et al., 2001), ela pode ser representada pela seguinte equação:

$$\dot{p} = \dot{p}_m + \varepsilon \quad (5.69)$$

onde:

\dot{p}_m = taxa de precipitação pluviométrica média, [m/a];

ε = ruído branco gaussiano, [m/a].

5.2.3.3 Vazão volumétrica de água que entra no repositório

A vazão volumétrica de água que entra no repositório pode ser determinada pela equação obtida pela substituição da Eq. (5.69) na Eq. (5.3), ou seja:

$$\dot{Q}_1 = F_d(t).A.(\dot{p}_m + \dot{i}_r - \dot{e} - \dot{r}) + F_d(t).A.\varepsilon \quad (5.70)$$

A Fig. 5.6 mostra as equações de \dot{Q}_1 para os modelos determinísticos e estocásticos.

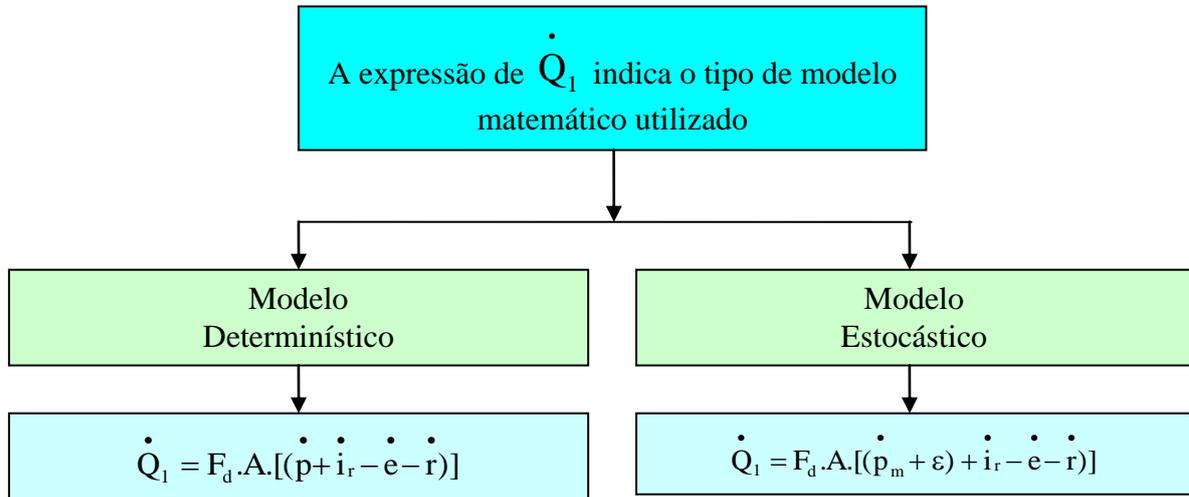


Figura 5.6 – Equações de \dot{Q}_1 para o modelo determinístico e para o estocástico

5.2.3.4 Altura de coluna de líquido no interior do repositório

5.2.3.4.1 Situação em que não ocorre o transbordamento do repositório

Substituindo-se as Eqs. (5.24), (5.25) e (5.70) na Eq. (5.23) obtém-se:

$$\frac{dH}{dt} + a.H^2 + b.H + c(t) - \left(\frac{F_d(t)}{n}\right).\varepsilon = 0 \quad (5.71)$$

onde:

$$c(t) = \frac{1}{n}[K_c - F_d(t).(\dot{p}_m + \dot{i}_r - \dot{e} - \dot{r})]$$

Substituindo-se a expressão $\varepsilon = \frac{dW_t}{dt}$ na Eq. (5.71) e utilizando-se a simbologia do cálculo estocástico (OKSENDAL, 2000), com $H = X_t$, obtém-se:

$$dX_t = -[a.X_t^2 + b.X_t + c(t)].dt + \left(\frac{F_d(t)}{n}\right).dW_t \quad (5.72)$$

que é sujeita à condição de valor inicial $X_{t_0} = H(t_f)$.

Neste momento é importante observar que:

- A Eq. (5.72) é uma equação diferencial estocástica não-linear de Ito com $a(t, X_t) = -[a.X_t^2 + b.X_t + c(t)]$ e $b(t, X_t) = \frac{F_d(t)}{n}$;
- Conforme mencionado anteriormente, embora o ruído branco gaussiano seja representado pela expressão $\varepsilon = \frac{dW_t}{dt}$, ela não é correta sob o ponto de vista matemático de derivada, pois a trajetória (*path*) do processo de Wiener é formada por pontos onde as inclinações das tangentes à esquerda e à direita são diferentes (MISTURINI, 2010). Porém, esta inconsistência não interfere na solução das equações diferenciais estocásticas, pois esta não se baseia no conceito de derivada e sim no conceito de integrais estocásticas, que são muito bem elaboradas matematicamente.

5.2.3.4.2 Quando ocorre o transbordamento do repositório

A média da altura de coluna de líquido em seu interior atinge o valor máximo H_r e a Eq. (5.72) se reduz a:

$$dX_t = \left(\frac{F_d(t)}{n}\right).dW_t \quad (5.73)$$

com a condição de valor inicial $X_{t_0} = H_r$.

5.2.3.5 Massa de radionuclídeo na fase líquida no repositório

5.2.3.5.1 Geral

A solução da Eq. (5.72) é um processo estocástico H que pode ser representado pela seguinte equação:

$$H = \bar{H} + \Delta H \quad (5.74)$$

onde:

\bar{H} = parte determinística, [m];

ΔH = parte estocástica, [m].

5.2.3.5.2 Massa de radionuclídeo no instante da falha do repositório

A massa de radionuclídeo no instante da falha do repositório é determinada pela Eq. (5.42).

5.2.3.5.3 Massa de radionuclídeo após a falha do repositório

A massa de radionuclídeo, após a falha do repositório e quando não ocorre o transbordamento do mesmo, é determinada com o auxílio da Eq. (5.43). Quando ocorrer o transbordamento do repositório, deve-se utilizar a Eq. (5.44) para esta finalidade.

Entretanto, é importante observar que, na modelagem estocástica, a altura de coluna H que aparece nesta equação deve ser determinada pela Eq. (5.72) antes do transbordamento do repositório e pela Eq. (5.73), em caso contrário. Esta observação se aplica aos itens de 5.2.3.6 a 5.2.3.9.

5.2.3.6 Concentração em atividade na fase líquida no repositório após a falha do mesmo

A concentração em atividade na fase líquida no repositório pode ser determinada utilizando-se as Eqs. (5.46) e (5.47) para as situações de não-transbordamento e transbordamento do repositório, respectivamente. Entretanto, é importante observar que no transbordamento, deve-se utilizar a expressão $\bar{H} = H_r$ na Eq. (5.74), onde H_r é a altura interna do repositório.

5.2.3.7 Taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente

A taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente é determinada com o auxílio das Eqs. (5.49) e (5.51) para as situações de transbordamento e não-transbordamento do repositório, respectivamente.

5.2.3.8 Concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero

A concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero pode ser determinada com o auxílio das Eqs. (5.55) e (5.56), para as situações de transbordamento e não-transbordamento do repositório, respectivamente.

5.2.3.9 Concentração em atividade ao longo do aquífero

A concentração em atividade ao longo do aquífero é determinada no modelo estocástico com a utilização da Eq. (5.68). Entretanto, é importante frisar que o valor de C_D , utilizado nesta equação, é determinado pela via estocástica no item 5.2.3.8.

A seção 5.2.3 fornece o embasamento teórico necessário para o desenvolvimento dos modelos matemáticos estocásticos 1 e 2, mostrados nos Apêndices D e E, respectivamente.

6. APRESENTAÇÃO E ANÁLISE DOS RESULTADOS

6.1 GERAL

Os modelos matemáticos aqui desenvolvidos são apropriados para a determinação dos seguintes parâmetros:

- Altura de coluna de líquido (água + radionuclídeos) no interior do repositório, H ;
- Concentração em atividade em seu interior, C_R ;
- Taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente, \dot{A} ;
- Concentração em atividade no ponto de descarga em atividade no aquífero, C_D ;
- Concentração em atividade ao longo do aquífero, C_A .

6.2 DADOS UTILIZADOS

Quando não houver menção em contrário, aqui estarão sendo utilizados os dados do repositório de Abadia de Goiás (NUCLEN, 1996), constantes da Tabela 6.1.

Tabela 6.1 - Valores dos parâmetros utilizados neste trabalho (NUCLEN, 1996)

Parâmetro	Símbolo	Unidade	Valor
Altura de coluna de líquido no interior do repositório no instante da falha do mesmo	$H(t_f)$	[m]	10^{-4} (*)
Altura do aquífero	H_a	[m]	28
Área do teto ou da base do repositório	A	[m ²]	$1,1760 \times 10^3$
Atividade inicial no interior do repositório	A_0	[Bq]	$4,5800 \times 10^{13}$

(*) – Tem que ser um valor pequeno, porém, diferente de 0 para que a concentração em massa ou atividade possa ser definida em $t = 0$. Este valor inicial tem pouca influência no valor de $H(t)$

Tabela 6.1 (Cont.) - Valores dos parâmetros utilizados neste trabalho (NUCLEN, 1996)

Parâmetro	Símbolo	Unidade	Valor
Altura interna do repositório	H_r	[m]	4,3800
Coefficiente de difusão do radionuclídeo na água	D_a	[m ² /a]	0,1419
Coefficiente de distribuição no aquífero	k_{da}	[m ³ /kg]	0,4300
Coefficiente de distribuição no interior do repositório	k_d	[m ³ /kg]	0,4630
Comprimento da base do repositório	b_2	[m]	19,6000
Condutividade hidráulica do concreto	K_c	[m/a]	$3,1500 \times 10^{-4}$
Constante de decaimento radioativo do ¹³⁷ Cs	λ	[a ⁻¹]	$2,3100 \times 10^{-2}$
Distância entre o poço e o repositório	x	[m]	0,5000
Espessura da base do repositório	E	[m]	0,2000
Espessura das paredes laterais do repositório	L	[m]	0,2000
Fator de mistura	f_m	-----	1,0000
Função degradação do teto do repositório	F_d	-----	0,1000
Largura da base do repositório	b_1	[m]	60
Massa inicial de radionuclídeo no repositório	m_0	[kg]	$1,4250 \times 10^{-2}$
Massa específica do líquido no repositório	ρ_l	[kg/m ³]	10^3
Massa específica do sólido no repositório	ρ_s	[kg/m ³]	$2,8100 \times 10^3$
Massa específica do aquífero	ρ_a	[kg/m ³]	$1,7150 \times 10^3$
Porosidade da região interna do repositório	n	-----	0,1000

Tabela 6.1 (Cont.) - Valores dos parâmetros utilizados neste trabalho (NUCLEN, 1996)

Parâmetro	Símbolo	Unidade	Valor
Porosidade do aquífero	n_a	-----	0,4700
Taxa de evapotranspiração da capa do repositório	$\cdot e$	[m/a]	1,4570
Taxa de irrigação do repositório	$\cdot i_r$	[m/a]	0
Taxa de precipitação pluviométrica média	$\cdot p_m$	[m/a]	1,5920
Instante em que se inicia a falha do repositório	t_f	[a]	0
Vazão de água tangente à superfície externa da capa do repositório (<i>surface runoff</i>)	$\cdot r$	[m/a]	0
Velocidade da água no aquífero	v_a	[m/a]	14,6000

6.3 MODELOS MATEMÁTICOS DETERMINÍSTICOS

6.3.1 Geral

Soluções analíticas para os modelos determinísticos 1 e 2 apresentados nos Apêndices A e B foram introduzidas nos programas de computador correspondentes REPDA1 e REPDA2, em linguagem FORTRAN 99 (vide Fig. 2.3).

As denominações desses programas são oriundas das palavras chaves: “Repositório – Determinístico – Analítico”, com a numeração indicando se o programa contém o modelo determinístico 1 ou 2. É importante lembrar que nos modelos matemáticos do tipo 1 são considerados vazamentos de material radioativo apenas pela base e teto (em caso de transbordamento) do repositório. Já nos modelos do tipo 2, além desses vazamentos, é considerada também a fuga de material radioativo pelas paredes laterais do repositório.

Paralelamente aos programas REPDA1 e REPDA2, foram desenvolvidos, também em linguagem FORTRAN 99, os programas REPDN1 e REPDN2, cujas equações

diferenciais dos modelos determinísticos 1 e 2, são resolvidas numericamente pelo método de Runge-Kutta de 4ª ordem. As denominações REPDN1 e REPDN2 se originaram das palavras chaves: “Repositório – Determinístico – Numérico”, com a numeração indicando o tipo de vazamento que é considerado no modelo.

Um resumo das aplicações dos programas de computador, com modelagem determinística, é apresentado na Tabela 6.2.

Tabela 6.2 - Programas de computador desenvolvidos para os modelos determinísticos 1 e 2

Modelos Determinísticos	Tipo de solução	
	Analítica	Numérica
1	REPDA1	REPDN1
2	REPDA2	REPDN2

6.3.2 Resultados obtidos com os modelos determinísticos 1 e 2

6.3.2.1 Geral

Os programas REPDA1 e REPDN1, contendo respectivamente as soluções analítica (vide Apêndice A) e numérica (método de Runge-Kutta de 4ª ordem) do modelo determinístico 1, foram executados com os dados da Tabela 6.1, e os resultados são apresentados nas Tabelas 6.3 e 6.4.

Tabela 6.3 – Valores obtidos com o programa de computador REPDA1

Tempo [a]	H [m]	C _R [Bq/m ³]	\dot{A} [Bq/a]	C _D [Bq/m ³]	C _A [Bq/m ³] (x = 0,5 m)
0	10 ⁻⁴	3,3258x10 ¹¹	1,2326x10 ¹¹	5,0253x10 ⁶	0
1	1,3092x10 ⁻¹	2,4823x10 ⁸	1,5215x10 ⁸	6,2030x10 ³	0
2	2,5969x10 ⁻¹	1,2228x10 ⁸	1,0412x10 ⁸	4,2448x10 ³	0
3	3,8645x10 ⁻¹	8,0297x10 ⁷	8,7219x10 ⁷	3,5559x10 ³	2,4007x10 ⁻¹³
4	5,1122x10 ⁻¹	5,9312x10 ⁷	7,8133x10 ⁷	3,1855x10 ³	1,6672x10 ⁻⁷
5	6,3405x10 ⁻¹	4,6730x10 ⁷	7,2190x10 ⁷	2,9432x10 ³	3,7435x10 ⁻⁴
10	1,2200	2,1637x10 ⁷	5,6908x10 ⁷	2,3201x10 ³	1,5163x10 ²
20	2,2621	9,2621x10 ⁶	4,2238x10 ⁷	1,7220x10 ³	1,2494x10 ³
30	3,1524	5,2754x10 ⁶	3,2757x10 ⁷	1,3355x10 ³	9,8174x10 ²
40	3,9129	3,3734x10 ⁶	2,5698x10 ⁷	1,0477x10 ³	7,7018x10 ²
50	4,3800	2,3920x10 ⁶	3,7976x10 ⁷	1,5483x10 ³	1,1382x10 ³
60	4,3800	1,8986x10 ⁶	3,0142x10 ⁷	1,2289x10 ³	9,0338x10 ²
70	4,3800	1,5070x10 ⁶	2,3924x10 ⁷	9,7539x10 ²	7,1702x10 ²
80	4,3800	1,1961x10 ⁶	1,8989x10 ⁷	7,7418x10 ²	5,6911x10 ²
90	4,3800	9,4936x10 ⁵	1,5072x10 ⁷	6,1448x10 ²	4,5171x10 ²
100	4,3800	7,5353x10 ⁵	1,1963x10 ⁷	4,8773x10 ²	3,5854x10 ²
150	4,3800	2,3737x10 ⁵	3,7685x10 ⁶	1,5364x10 ²	1,1294x10 ²
200	4,3800	7,4776x10 ⁴	1,1871x10 ⁶	4,8400x10 ¹	3,5580x10 ¹
250	4,3800	2,3556x10 ⁴	3,7397x10 ⁵	1,5247x10 ¹	1,1208x10 ¹
300	4,3800	7,4204x10 ³	1,1781x10 ⁵	4,8030	3,5308

Tabela 6.4 – Valores obtidos com o programa de computador REPDN1

Tempo [a]	H [m]	C _R [Bq/m ³]	\dot{A} [Bq/a]	C _D [Bq/m ³]	C _A [Bq/m ³] (x = 0,5 m)
0	10 ⁻⁴	3,3258x10 ¹¹	1,2326x10 ¹¹	5,0253x10 ⁶	0
1	1,3092x10 ⁻¹	2,4824x10 ⁸	1,5215x10 ⁸	6,2031x10 ³	0
2	2,5969x10 ⁻¹	1,2228x10 ⁸	1,0412x10 ⁸	4,2449x10 ³	0
3	3,8645x10 ⁻¹	8,0298x10 ⁷	8,7221x10 ⁷	3,5560x10 ³	2,4007x10 ⁻¹³
4	5,1122x10 ⁻¹	5,9313x10 ⁷	7,8134x10 ⁷	3,1855x10 ³	1,6672x10 ⁻⁷
5	6,3405x10 ⁻¹	4,6730x10 ⁷	7,2191x10 ⁷	2,9432x10 ³	3,7435x10 ⁻⁴
10	1,2200	2,1637x10 ⁷	5,6909x10 ⁷	2,3201x10 ³	1,5163x10 ²
20	2,2621	9,2622x10 ⁶	4,2239x10 ⁷	1,7221x10 ³	1,2494x10 ³
30	3,1524	5,2755x10 ⁶	3,2757x10 ⁷	1,3355x10 ³	9,8174x10 ²
40	3,9129	3,3734x10 ⁶	2,5699x10 ⁷	1,0477x10 ³	7,7018x10 ²
50	4,3800	2,3920x10 ⁶	3,7976x10 ⁷	1,5483x10 ³	1,1382x10 ³
60	4,3800	1,8986x10 ⁶	3,0142x10 ⁷	1,2289x10 ³	9,0338x10 ²
70	4,3800	1,5070x10 ⁶	2,3924x10 ⁷	9,7539x10 ²	7,1702x10 ²
80	4,3800	1,1961x10 ⁶	1,8989x10 ⁷	7,7419x10 ²	5,6912x10 ²
90	4,3800	9,4937x10 ⁵	1,5072x10 ⁷	6,1449x10 ²	4,5172x10 ²
100	4,3800	7,5353x10 ⁵	1,1963x10 ⁷	4,8773x10 ²	3,5854x10 ²
150	4,3800	2,3737x10 ⁵	3,7685x10 ⁶	1,5364x10 ²	1,1294x10 ²
200	4,3800	7,4777x10 ⁴	1,1872x10 ⁶	4,8400x10 ¹	3,5580x10 ¹
250	4,3800	2,3556x10 ⁴	3,7397x10 ⁵	1,5247x10 ¹	1,1208x10 ¹
300	4,3800	7,4205x10 ³	1,1781x10 ⁵	4,8030	3,5308

Os valores obtidos com os programas de computador REPDA2 (solução analítica do Apêndice B) e REPDN2 (solução numérica com método de Runge-Kutta de 4ª ordem), desenvolvidos para o modelo determinístico 2, são apresentados nas Tabelas 6.5 e 6.6, respectivamente. Estes programas foram também executados com os dados apresentados na Tabela 6.1.

Tabela 6.5 – Valores obtidos com o programa de computador REPDA2

Tempo [a]	H [m]	C _R [Bq/m ³]	\dot{A} [Bq/a]	C _D [Bq/m ³]	C _A [Bq/m ³] (x = 0,5 m)
0	10 ⁻⁴	3,3255x10 ¹¹	1,2325x10 ¹¹	5,0249x10 ⁶	0
1	1,3092x10 ⁻¹	2,4825x10 ⁸	1,5269x10 ⁸	6,2250x10 ³	0
2	2,5964x10 ⁻¹	1,2231x10 ⁸	1,0516x10 ⁸	4,2873x10 ³	0
3	3,8629x10 ⁻¹	8,0330x10 ⁷	8,8735x10 ⁷	3,6177x10 ³	2,4424x10 ⁻¹³
4	5,1085x10 ⁻¹	5,9355x10 ⁷	8,0091x10 ⁷	3,2653x10 ³	1,7089x10 ⁻⁷
5	6,3334x10 ⁻¹	4,6783x10 ⁷	7,4562x10 ⁷	3,0399x10 ³	3,8665x10 ⁻⁴
10	1,2147	2,1731x10 ⁷	6,0963x10 ⁷	2,4854x10 ³	1,6243x10 ²
20	2,2266	9,4099x10 ⁶	4,8142x10 ⁷	1,9627x10 ³	1,4240x10 ³
30	3,0514	5,4499x10 ⁶	3,9183x10 ⁷	1,5975x10 ³	1,1743x10 ³
40	3,7121	3,5558x10 ⁶	3,1908x10 ⁷	1,3009x10 ³	9,5631x10 ²
50	4,2338	2,4746x10 ⁶	2,5883x10 ⁷	1,0552x10 ³	7,7569x10 ²
60	4,3800	1,8986x10 ⁶	3,0141x10 ⁷	1,2289x10 ³	9,0338x10 ²
70	4,3800	1,5069x10 ⁶	2,3924x10 ⁷	9,7537x10 ²	7,1701x10 ²
80	4,3800	1,1961x10 ⁶	1,8989x10 ⁷	7,7417x10 ²	5,6910x10 ²
90	4,3800	9,4934x10 ⁵	1,5072x10 ⁷	6,1447x10 ²	4,5171x10 ²
100	4,3800	7,5351x10 ⁵	1,1963x10 ⁷	4,8772x10 ²	3,5853x10 ²
150	4,3800	2,3737x10 ⁵	3,7685x10 ⁶	1,5364x10 ²	1,1294x10 ²
200	4,3800	7,4775x10 ⁴	1,1871x10 ⁶	4,8399x10 ¹	3,5579x10 ¹
250	4,3800	2,3555x10 ⁴	3,7396x10 ⁵	1,5246x10 ¹	1,1208x10 ¹
300	4,3800	7,4203x10 ³	1,1780x10 ⁵	4,8029	3,5307

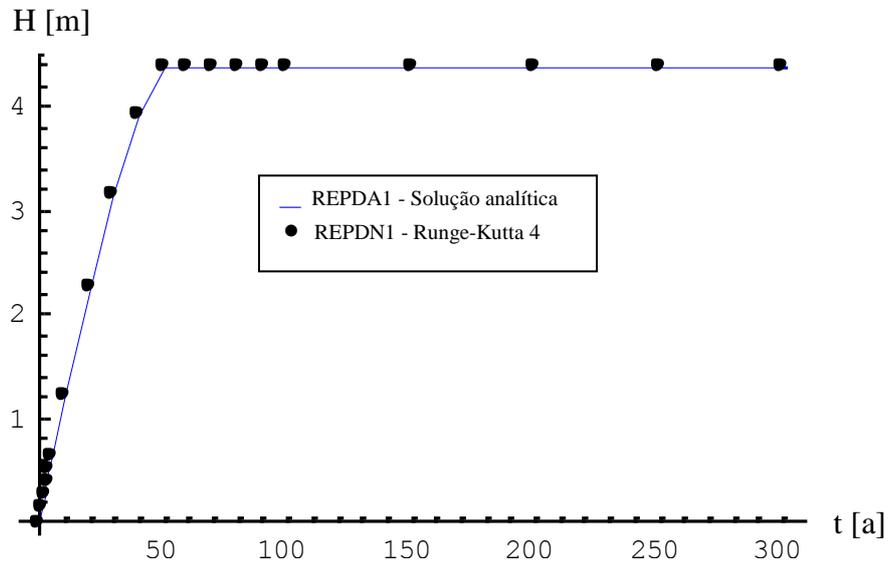
Tabela 6.6 – Valores obtidos com o programa de computador REPDN2

Tempo [a]	H [m]	C _R [Bq/m ³]	\dot{A} [Bq/a]	C _D [Bq/m ³]	C _A [Bq/m ³] (x = 0,5 m)
0	10 ⁻⁴	3,3255x10 ¹¹	1,2325x10 ¹¹	5,0249x10 ⁶	0
1	1,3091x10 ⁻¹	2,4825x10 ⁸	1,5269x10 ⁸	6,2250x10 ³	0
2	2,5964x10 ⁻¹	1,2231x10 ⁸	1,0516x10 ⁸	4,2873x10 ³	0
3	3,8629x10 ⁻¹	8,0331x10 ⁷	8,8736x10 ⁷	3,6177x10 ³	2,4424x10 ⁻¹³
4	5,1085x10 ⁻¹	5,9356x10 ⁷	8,0092x10 ⁷	3,2653x10 ³	1,7089x10 ⁻⁷
5	6,3334x10 ⁻¹	4,6783x10 ⁷	7,4563x10 ⁷	3,0399x10 ³	3,8665x10 ⁻⁴
10	1,2147	2,1731x10 ⁷	6,0963x10 ⁷	2,4855x10 ³	1,6243x10 ²
20	2,2266	9,4101x10 ⁶	4,8142x10 ⁷	1,9628x10 ³	1,4241x10 ³
30	3,0514	5,4500x10 ⁶	3,9184x10 ⁷	1,5975x10 ³	1,1743x10 ³
40	3,7121	3,5559x10 ⁶	3,1909x10 ⁷	1,3009x10 ³	9,5631x10 ²
50	4,2338	2,4746x10 ⁶	2,5884x10 ⁷	1,0553x10 ³	7,7577x10 ²
60	4,3800	1,8986x10 ⁶	3,0142x10 ⁷	1,2289x10 ³	9,0338x10 ²
70	4,3800	1,5070x10 ⁶	2,3925x10 ⁷	9,7540x10 ²	7,1703x10 ²
80	4,3800	1,1961x10 ⁶	1,8989x10 ⁷	7,7419x10 ²	5,6912x10 ²
90	4,3800	9,4937x10 ⁵	1,5072x10 ⁷	6,1449x10 ²	4,5172x10 ²
100	4,3800	7,5353x10 ⁵	1,1963x10 ⁷	4,8773x10 ²	3,5854x10 ²
150	4,3800	2,3738x10 ⁵	3,7686x10 ⁶	1,5364x10 ²	1,1294x10 ²
200	4,3800	7,4777x10 ⁴	1,1872x10 ⁶	4,8400x10 ¹	3,5580x10 ¹
250	4,3800	2,3556x10 ⁴	3,7397x10 ⁵	1,5247x10 ¹	1,1208x10 ¹
300	4,3800	7,4205x10 ³	1,1781x10 ⁵	4,8030	3,5308

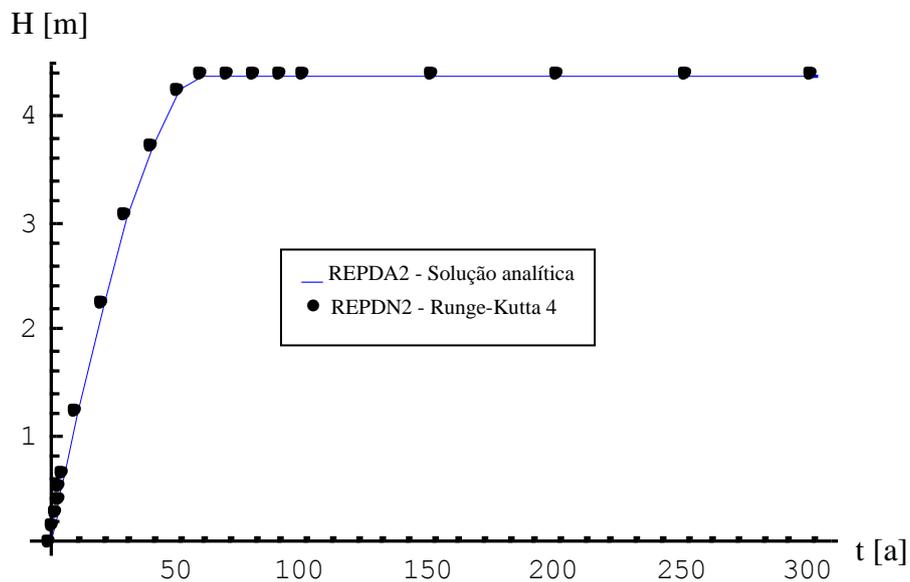
Os valores da altura de coluna de líquido e concentração em atividade no interior do repositório, representadas respectivamente pelos símbolos H e C_R, da taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente, \dot{A} , da concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero, C_D, e da concentração em atividade ao longo do aquífero, C_A, serão apresentados a seguir em forma de gráficos.

6.3.2.2 Altura de coluna de líquido no interior do repositório

Os valores da altura de coluna de líquido, H , apresentados nas Tabelas 6.3, 6.4, 6.5 e 6.6, são colocados em forma de gráfico na Fig. 6.1.



(a) Modelo determinístico 1



(b) Modelo determinístico 2

Figura 6.1 – Altura de coluna de líquido no interior do repositório

Na Fig. 6.1-(a) são traçados os valores do modelo determinístico 1, sendo a solução analítica (Tabela 6.3) representada em forma de linha e a solução numérica em forma de ponto (Tabela 6.4).

Os valores do modelo determinístico 2 são traçados na Fig. 6.1-(b), onde de forma análoga ao caso anterior, a solução analítica (Tabela 6.5) é representada na forma de linha e a solução numérica (Tabela 6.6) na forma de ponto.

Observa-se, com o auxílio da Fig. 6.1, que a altura de coluna de líquido no interior do repositório, H , é uma função crescente do tempo. Este comportamento se justifica pelo fato da taxa de infiltração de água no interior do repositório ser maior do que a fuga de material radioativo através de suas fronteiras.

De acordo com a Fig. 6.1, a altura de coluna de líquido, H , aumenta desde um valor inicial igual a $H(t_f) = 10^{-4}$ m (vide Tabelas 6.3, 6.4, 6.5 e 6.6), que é a altura de coluna de líquido no instante da falha do repositório, até atingir seu valor máximo igual a 4,38 m, que corresponde à altura interna do repositório. Observa-se, ainda com o auxílio dessa figura, que o instante de tempo necessário para que H atinja seu valor máximo (tempo para que ocorra o transbordamento do repositório) é diferente nos modelos determinísticos 1 e 2. Enquanto no primeiro modelo (modelo 1) este tempo é igual a 47 anos, no segundo (modelo 2) o transbordamento do repositório só ocorre após 53 anos.

Essa diferença entre os tempos de transbordamento do repositório, nos modelos determinísticos 1 e 2, é atribuída ao fato de que no modelo 1 são consideradas apenas a fuga de material radioativo pela base e pelo teto do repositório (em caso de transbordamento), enquanto que, no modelo 2, além destas fugas, é também considerada a fuga de material radioativo pelas paredes laterais do repositório. Assim, o modelo que considera mais fugas de material radioativo (modelo 2), através das fronteiras do repositório, terá como resultado um menor valor de altura de coluna de líquido, H , e conseqüentemente, um maior valor de tempo de transbordamento, t_f (vide Fig. 6.2).

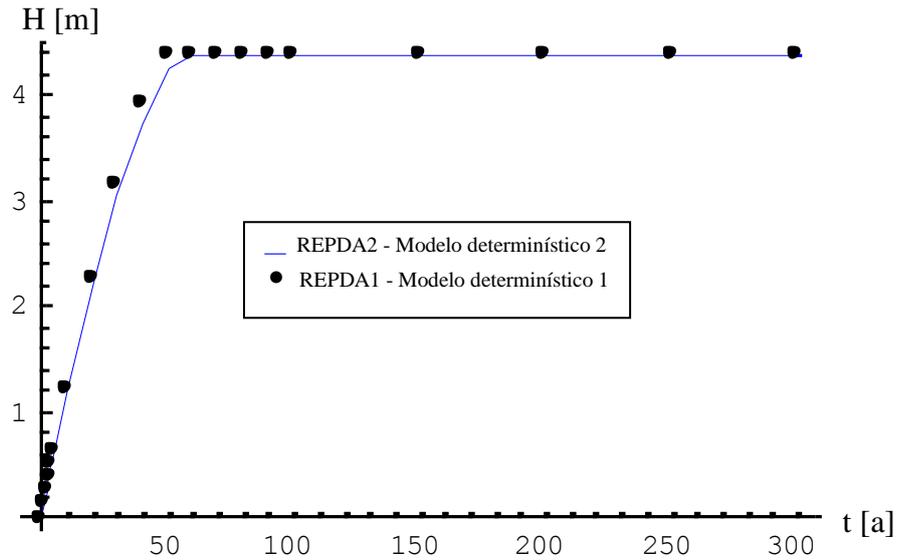


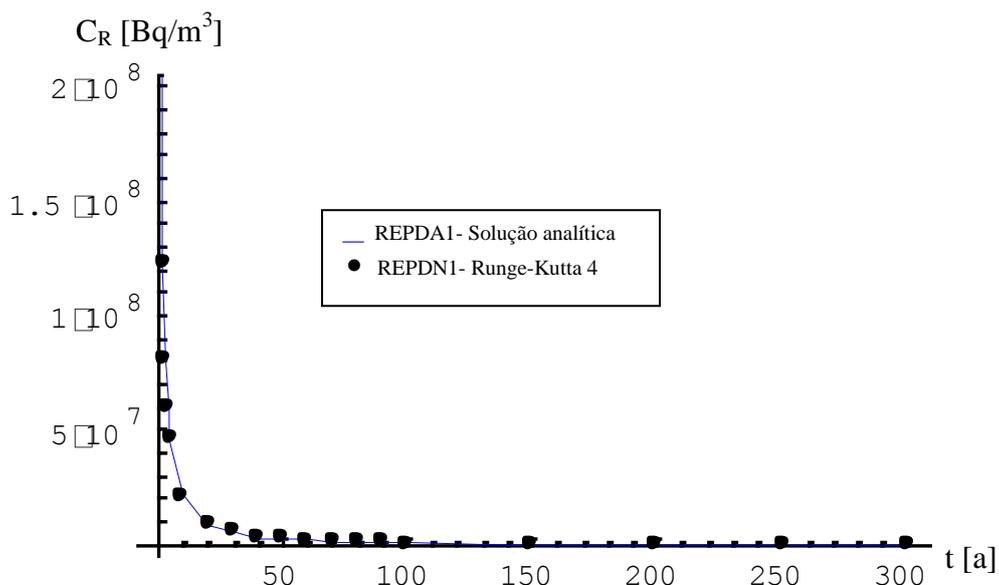
Figura 6.2 – Altura de coluna de líquido no interior do repositório obtida com os modelos determinísticos 1 e 2

De acordo com os valores apresentados nas Tabelas 6.3 e 6.4, observa-se que o desvio relativo percentual entre a solução analítica (programa REPDA1) e a solução numérica (programa REPDN1) do modelo determinístico 1 é desprezível (10^{-14} %), evidenciando uma ótima concordância entre estas soluções, para a altura de coluna de líquido no interior do repositório.

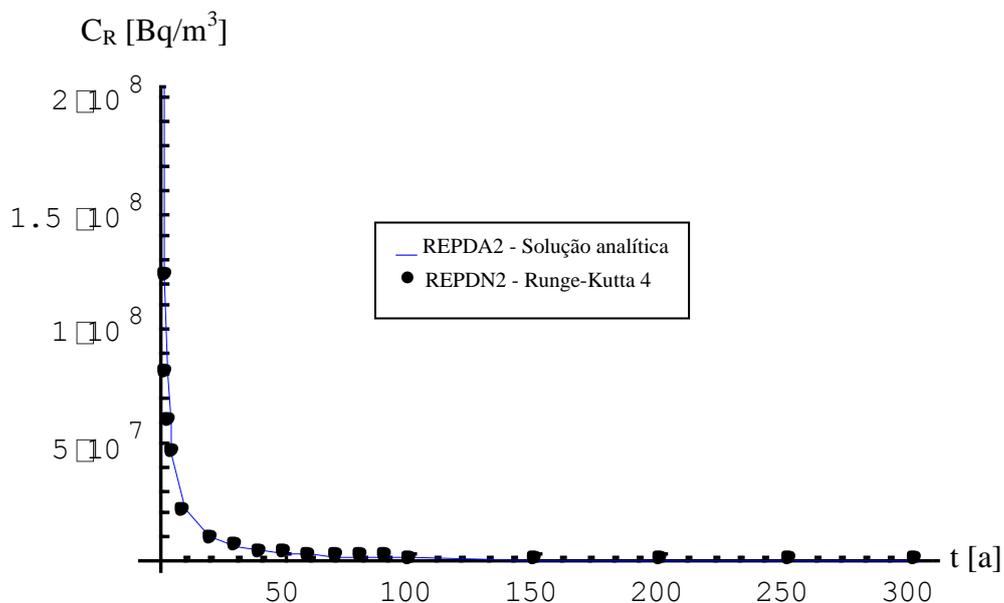
O desvio relativo percentual entre a solução analítica (programa REPDA2) e a solução numérica (programa REPDN2) do modelo determinístico 2, obtido com o auxílio das Tabelas 6.5 e 6.6, é igual a aproximadamente 0,008%, o que também evidencia uma ótima concordância entre as soluções analítica e numérica apresentadas para este modelo.

6.3.2.3 Concentração em atividade no interior do repositório

Na Fig. 6.3 são mostrados os valores da concentração em atividade no interior do repositório, C_R , extraídos das Tabelas 6.3, 6.4, 6.5 e 6.6.



(a) Modelo determinístico 1



(b) Modelo determinístico 2

Figura 6.3 – Concentração em atividade no interior do repositório

Observa-se, com o auxílio da Fig. 6.3, que a concentração em atividade no interior do repositório é uma função decrescente do tempo. Esta característica pode ser atribuída tanto ao aumento do volume de líquido (volume de diluição) no interior do repositório, com o tempo, como a redução da atividade em seu interior, devido à fuga de material radioativo pelas suas fronteiras e devido ao decaimento radioativo.

Também neste caso, observa-se uma ótima concordância entre os resultados obtidos com as soluções analíticas e numéricas, para os modelos determinísticos 1 e 2.

No modelo determinístico 1, apresentado na Fig. 6.3-(a), as soluções analítica (programa REPDA1) e a numérica (programa REPDN2), concordam entre si com um desvio relativo percentual, obtido com o auxílio das Tabelas 6.3 e 6.4, igual a aproximadamente 0,004%.

Para o caso do modelo determinístico 2, mostrado na Fig. 6.3-(b), também se verifica uma ótima concordância entre as soluções analítica (programa REPDA2) e numérica (programa REPDN2), com um desvio relativo percentual igual a 0,007% (vide Tabelas 6.5 e 6.6).

Uma confrontação entre os modelos determinísticos 1 (REPDA1) e 2 (REPDA2), no cálculo da concentração em atividade na fase líquida no repositório, C_R , pode ser feita com o auxílio das Tabelas 6.3 e 6.5.

No instante $t = 0$, os modelos determinísticos 1 e 2 devem fornecer o mesmo valor de concentração em atividade, pois o volume e a atividade da fase líquida são iguais nos dois modelos, neste instante de tempo. Com base na Tabela 6.3, observa-se que os valores de concentração C_R , determinados por estes modelos em $t = 0$, são iguais a $3,3258 \times 10^{11}$ Bq/m³ e $3,3255 \times 10^{11}$ Bq/m³, respectivamente, evidenciando um ótimo desempenho desses modelos no instante de tempo considerado.

Para o intervalo de tempo $0 < t < t_t$, onde t_t representa o instante de tempo em que ocorre o transbordamento do repositório, observa-se que os valores de C_R calculados com o modelo determinístico 2 são sempre maiores do que os calculados com o modelo determinístico 1.

Isto ocorre porque o valor da altura de coluna de líquido no interior do repositório, H , calculado com o modelo determinístico 2, é inferior ao valor determinado com o modelo determinístico 1 (pelo fato do modelo determinístico 2 considerar mais fuga de líquido pelas fronteiras do repositório do que o modelo determinístico 1) e porque a

atividade na fase líquida no interior do repositório, A_R , é igual nos dois modelos (vide Fig. 6.4). Assim, o modelo que fornece o menor valor de volume para a fase líquida é também aquele que produzirá os maiores valores de C_R .

O que foi dito para o intervalo de tempo $0 < t < t_t$ é reforçado com a análise dos valores de C_R para o transbordamento do repositório, ou seja, quando $t \geq t_t$.

O transbordamento do repositório ocorre em aproximadamente 47 anos e 53 anos nos modelos determinísticos 1 e 2, respectivamente. Nesta situação, a altura de coluna de líquido no interior do repositório atinge o seu valor máximo igual 4,38 m e o volume da fase líquida é igual nos 2 modelos. Como a atividade na fase líquida no repositório é igual nos 2 modelos, então os valores de C_R calculados com os modelos determinísticos 1 e 2, para instantes de tempo superiores a 53 anos, devem ser iguais. Observa-se, com o auxílio das Tabelas 6.3 e 6.5 (terceiras colunas), que isso é verdade.

Uma evidência de que a atividade na fase líquida no repositório, A_R , é igual nos 2 modelos é obtida utilizando-se os programas de computador REPDA1 e REPDA2, na elaboração da Figura 6.4. Os valores obtidos por esses programas são apresentados nesta figura em forma de linha e de ponto, respectivamente.

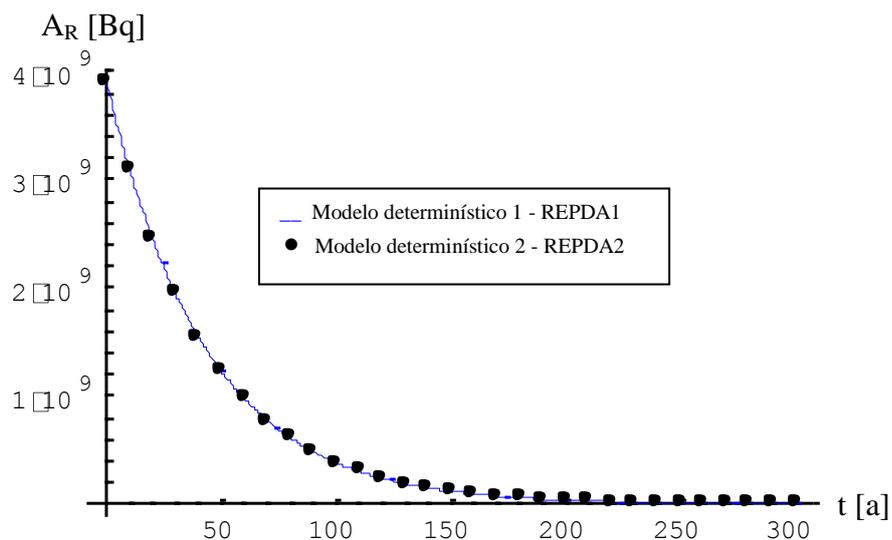


Figura 6.4 – Atividade na fase líquida no interior do repositório

Para melhor ilustrar esta questão deve-se recorrer ao balanço de massa de radionuclídeos na fase líquida no repositório, representado pela Eq. (5.43).

Com base nesta equação, observa-se que os termos que representam o decaimento radioativo e a fuga de material radioativo pelas fronteiras do repositório são a constante

de decaimento radioativo, λ , e a expressão $(\frac{\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3}{n.A.R_d.H})$, respectivamente. A maior

diferença entre os modelos determinísticos 1 e 2 ocorre no transbordamento do repositório, quando $\dot{Q}_2 = 8,48308 \text{ m}^3 / \text{a}$, $\dot{Q}_3 = 2,40515 \text{ m}^3 / \text{a}$ e $H = 4,38 \text{ m}$. Com o auxílio da Tabela 6.1, observa-se que $n = 0,10$ e $A = 1,1760 \times 10^3 \text{ m}^2$, e o valor $R_d = 11710,27$ é obtido no Apêndice D. Substituindo-se os valores desses parâmetros na

expressão anterior, obtém-se $(\frac{\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3}{n.A.R_d.H}) = 1,8051 \times 10^{-6} \text{ a}^{-1}$.

O valor da constante de decaimento radioativo para o ^{137}Cs é $\lambda = 2,31 \times 10^{-2} \text{ a}^{-1}$ (vide Tabela 6.1).

Assim, fica evidente que o decaimento radioativo domina o balanço de massa (e consequentemente o balanço em atividade) de radionuclídeo no interior do repositório, fazendo com que a diferença entre os modelos determinísticos 1 e 2 seja insignificante no tocante ao conteúdo em atividade na fase líquida no repositório (vide Fig. 6.4).

Desta forma, pode-se afirmar que as diferenças existentes nos valores da concentração em atividade no interior do repositório, obtidos com os modelos determinísticos 1 e 2, podem ser atribuídas, exclusivamente, às diferenças nos valores de H , calculados com estes modelos.

Esta afirmação é corroborada com os valores de H e C_R apresentados nas Tabelas 6.3 e 6.5, onde se pode observar que as diferenças entre os valores de C_R obtidos com os modelos determinísticos 1 e 2 se devem às diferenças entre os valores de H obtidos com estes modelos, evidenciando que a influência da atividade pode ser desprezada neste caso.

6.3.2.4 Taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente

Os valores da taxa em liberação em atividade do repositório para o meio ambiente constam da Fig. 6.5.

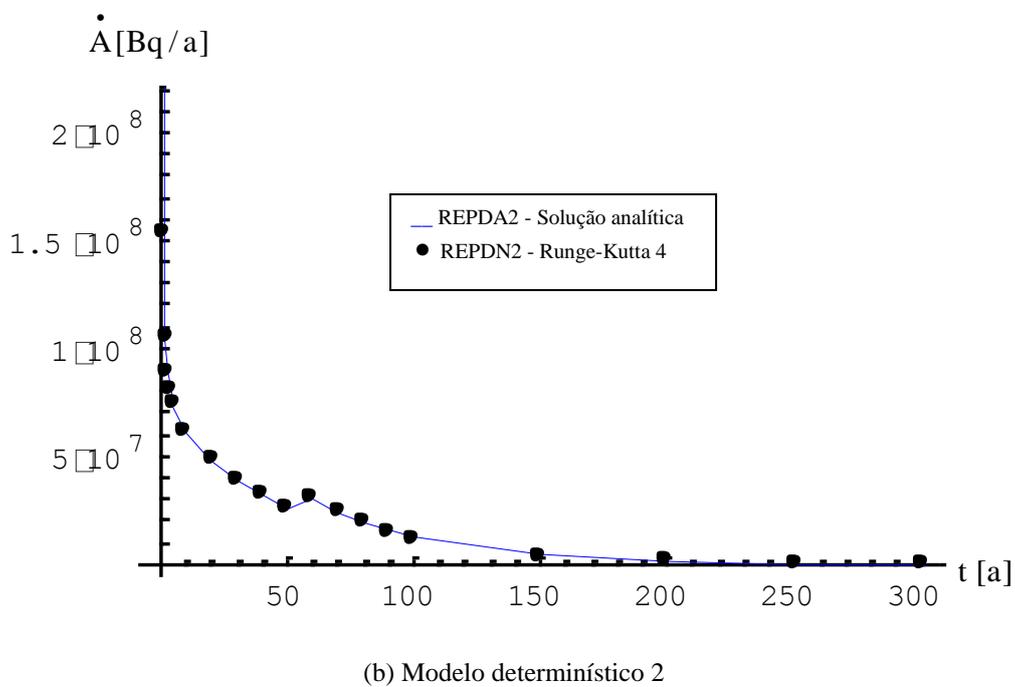
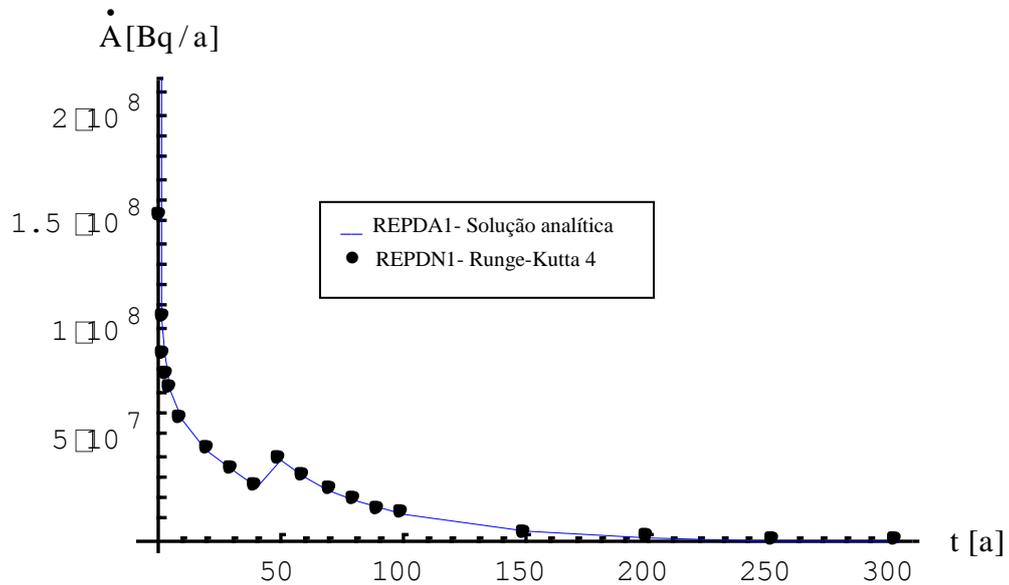


Figura 6.5 – Taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente

Esta taxa é obtida multiplicando-se a concentração em atividade, no interior do repositório, pela soma das vazões volumétricas de mistura líquida (água + radionuclídeos) que saem do interior do mesmo [vide Eq. (5.48)]. Embora a vazão volumétrica de mistura seja uma função crescente do tempo até o transbordamento do repositório, a influência da concentração em atividade no interior do repositório na taxa de liberação em atividade é preponderante, fazendo com que este parâmetro também seja decrescente com o tempo, conforme pode ser visto na Fig. 6.5.

O aumento que ocorre na taxa de liberação em atividade próximo ao tempo de 50 anos pode ser atribuído ao transbordamento do repositório. Com o transbordamento, uma maior quantidade em atividade é subitamente liberada do repositório para o meio ambiente.

Verifica-se, com o auxílio das Tabelas 6.3 e 6.4, que as soluções analítica (programa REPDA1) e numérica (programa REPDN1) no modelo determinístico 1, cujos resultados são mostrados na Fig. 6.5-(a), concordam entre si com um desvio relativo percentual igual a aproximadamente 0,008%.

Uma ótima concordância é também verificada entre as soluções analítica (programa REPDA2) e numérica (programa REPDN2) do modelo determinístico 2, cujos resultados são mostrados na Fig. 6.5-(b), com um desvio relativo percentual, obtido com o auxílio das Tabelas 6.5 e 6.6, igual a 0,009%.

Com o auxílio das Tabelas 6.3 e 6.5 (quarta coluna), observa-se que, antes do transbordamento do repositório e com exceção do tempo $t = 0$ (onde os dois programas devem fornecer o mesmo valor), os valores da taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente, \dot{A} , calculados com o modelo determinístico 2, são maiores do que os obtidos com o modelo determinístico 1. Este resultado já era esperado, uma vez que tanto a concentração em atividade no interior do repositório, como as fugas de material radioativo do repositório para o meio ambiente são maiores no modelo determinístico 2.

É importante observar que no instante de tempo $t = 50$ anos, após o início da infiltração de água no interior do repositório, ocorre justamente o contrário, ou seja, o valor de \dot{A} calculado com o modelo determinístico 1 é superior ao calculado com o modelo determinístico 2. Esta situação ocorre porque no modelo determinístico 1, o transbordamento do repositório ocorre para um tempo $t = 47$ anos, provocando um aumento considerável no valor de \dot{A} em $t = 50$ anos. Por outro lado, como no modelo determinístico 2 o transbordamento do repositório só ocorre no tempo $t = 53$ anos, esta influência ainda não pôde ser sentida em $t = 50$ anos.

Após o transbordamento do repositório, observa-se, com o auxílio das Tabelas 6.3 e 6.5, que os valores de \dot{A} calculados com os modelos determinísticos 1 e 2 são praticamente iguais. Isto ocorre porque durante o transbordamento do repositório a concentração em atividade na fase líquida e a fuga de material radioativo do repositório para o meio ambiente são iguais nos dois modelos.

6.3.2.5 Concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero

A concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero é representada na Fig. 6.6.

Esta grandeza tem o mesmo comportamento da taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente, uma vez que ela é obtida dividindo-se esta taxa de liberação de atividade pela vazão volumétrica média de água no aquífero, que é considerada constante.

As soluções analítica e numérica, para a concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero, obtidas com o modelo determinístico 1, concordam entre si com um desvio relativo percentual inferior a 0,006%.

Para o modelo determinístico 2, observa-se que a concordância entre as soluções analítica e numérica existe com um desvio relativo percentual igual a 0,009%.

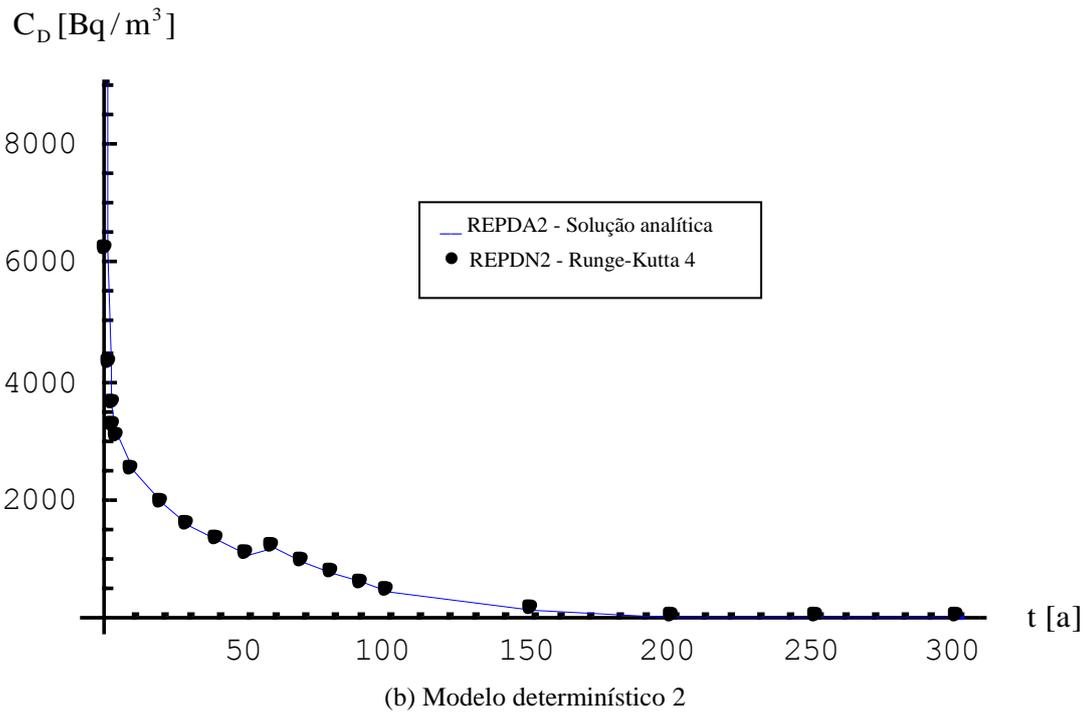
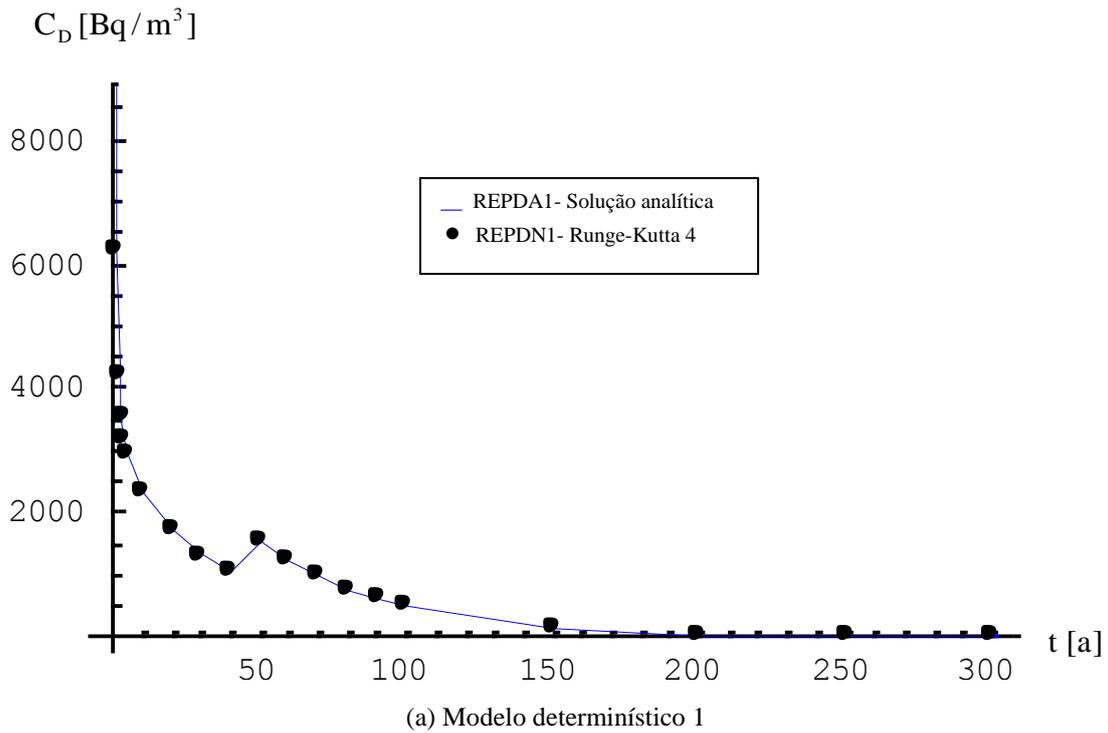


Figura 6.6 – Concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero

Observa-se, com o auxílio da Fig. 6.6, que o valor da concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero, C_D , se torna inferior ao valor de C_{crit} ($7,42 \times 10^3$ Bq/m³) para valores de tempo muito pequenos. Isto evidencia, que o valor de x_{crit} , calculado com o modelo determinístico, é também muito pequeno (vide Fig. 6.26).

6.3.2.6 Concentração em atividade ao longo do aquífero

Os valores de concentração em atividade, para um ponto situado a uma distância $x = 0,5$ m em relação à origem do aquífero, são representados na Fig. 6.7.

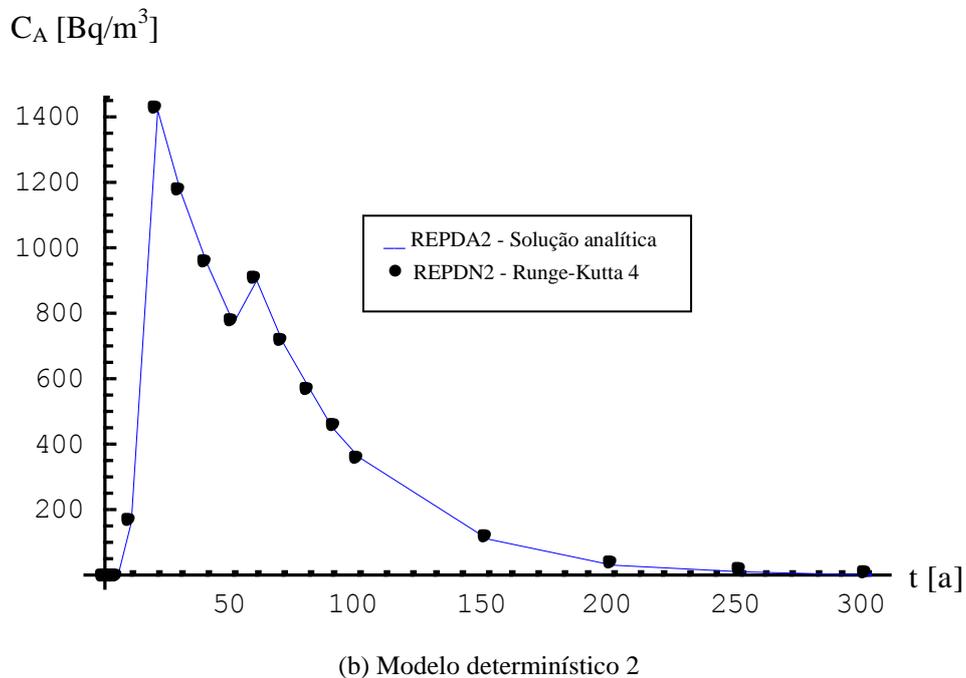
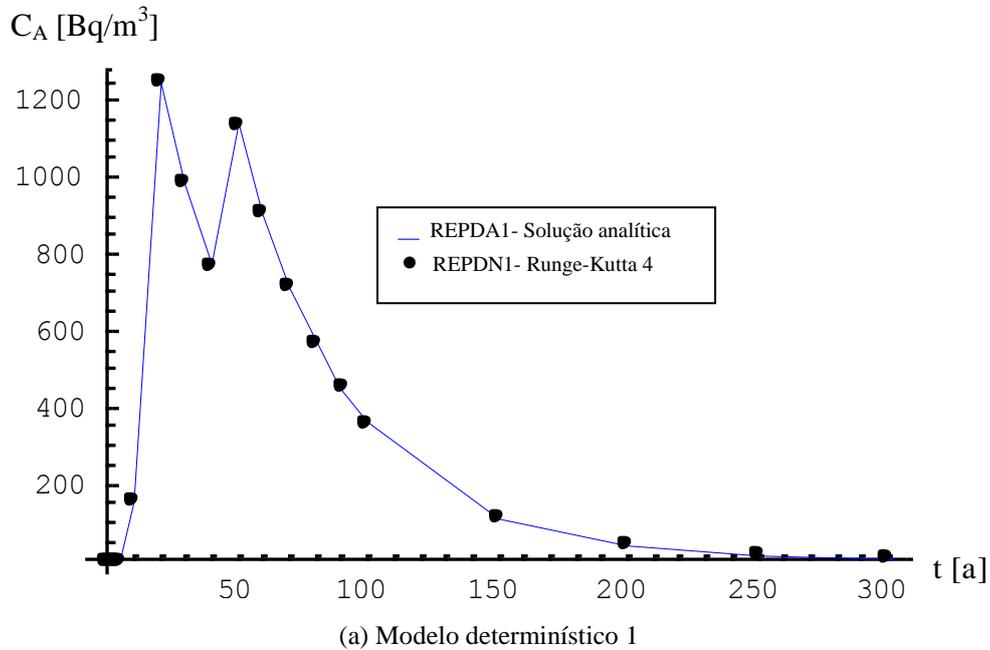


Figura 6.7 – Concentração em atividade ao longo do aquífero (alguns pontos) para $x = 0,5$ m

A escolha do ponto $x = 0,5$ m é arbitrária, podendo ser escolhido qualquer outro valor de x . Entretanto, é importante observar que a escolha de pontos muito afastados da origem do aquífero (grandes valores de x) pode redundar na necessidade de se considerar grandes valores de tempo, para se obter o completo desenvolvimento das curvas mostradas na Fig. 6.7.

Observa-se, com o auxílio da Fig. 6.7, que para instantes de tempo iniciais os valores da concentração C_A são iguais a zero. Este comportamento é atribuído ao fato de que, inicialmente, o radionuclídeo é liberado na origem do aquífero (despreza a influência da região não-saturada existente entre o repositório e o aquífero), em $t_f = 0$ (vide Tabela 6.1), e que é necessário um determinado intervalo de tempo para que este atinja algum ponto ao longo do aquífero (como por exemplo, o ponto $x = 0,5$ m). Isso ocorre devido aos efeitos da sorção (RANÇON, 1972), que retarda a migração do radionuclídeo no meio poroso.

Com o passar do tempo aumenta a quantidade de radionuclídeos que alcança o ponto x escolhido e, conseqüentemente, a concentração em atividade, neste ponto, irá aumentar até atingir seu valor máximo, que é em torno de 1250 Bq/m^3 no modelo determinístico 1 e 1400 Bq/m^3 no modelo determinístico 2. Um maior valor de concentração em atividade, obtido como o modelo determinístico 2, é atribuído ao fato de que este modelo considera mais fugas de material radioativo do repositório para o meio ambiente. Conseqüentemente, uma maior quantidade de material radioativo é liberada no aquífero, para um mesmo tempo de decaimento radioativo considerado nos dois modelos.

Se a concentração em atividade fosse constante na origem do aquífero (ponto de descarga), então o valor de C_A do primeiro ponto de máximo das curvas da Fig. 6.7 se manteria ao longo do tempo. Mas, como isso não ocorre, pois de acordo com a Fig. 6.6, a concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero é uma função decrescente do tempo, então é esperado que o valor de C_A também diminua ao longo do tempo até atingir um valor mínimo. Após este ponto de mínimo, a concentração em atividade no ponto x sofre um aumento repentino devido à grande quantidade de material radioativo que é lançada ao aquífero pelo transbordamento do repositório, fazendo com que C_A atinja um segundo ponto de máximo.

O segundo ponto de máximo da Fig. 6.7-(a) é maior que o da Fig. 6.7-(b), porque no modelo determinístico 1 o transbordamento do repositório ocorre antes (47 anos) que no modelo determinístico 2 (53 anos), evidenciando que o tempo de decaimento até o transbordamento do repositório, é menor no modelo determinístico 1 (vide seção 6.3.2.3).

Esta afirmação está de acordo com a argumentação mostrada na seção 6.3.2.4, ou seja, que a fuga de material radioativo pelas fronteiras do repositório e antes do transbordamento do mesmo tem pouca influência no balanço de massa de radionuclídeo em seu interior, para as condições do repositório de Abadia de Goiás.

Desta forma, fica evidente que as diferenças nos valores dos segundos pontos de máximos da Fig. 6.7 podem ser atribuídas exclusivamente aos diferentes tempos de decaimento do radionuclídeo até o transbordamento do repositório, nos modelos determinísticos 1 e 2.

Após o segundo ponto de máximo, a concentração em atividade no ponto x decresce continuamente com o tempo até chegar a $3,53 \text{ Bq/m}^3$, nos dois modelos matemáticos, para um instante de tempo igual a 300 anos.

Para o modelo determinístico 1, observa-se que as soluções analítica e numérica, para a concentração em atividade ao longo do aquífero, apresentam ótima concordância com um desvio relativo percentual igual a 0,002%.

Pode também ser considerada ótima a concordância entre as soluções analítica e numérica no modelo determinístico 2. O desvio relativo percentual entre estas soluções é igual a 0,01%.

As curvas da concentração em atividade ao longo do aquífero, C_A , foram traçadas na Fig. 6.7, com poucos pontos coordenados (20 pontos), com o principal objetivo de mostrar a concordância entre as soluções analítica e numérica, desenvolvidas para este parâmetro. Entretanto, o comportamento das curvas da Fig. 6.7 pode ser melhor compreendido aumentando-se o número dos pontos coordenados nos gráficos. Assim, utilizando-se as soluções analíticas, introduzidas nos programas de computador

REPDA1 e REPDA2, obtêm-se as curvas mostradas nas Figs. 6.8-(a) e 6.8-(b), respectivamente.

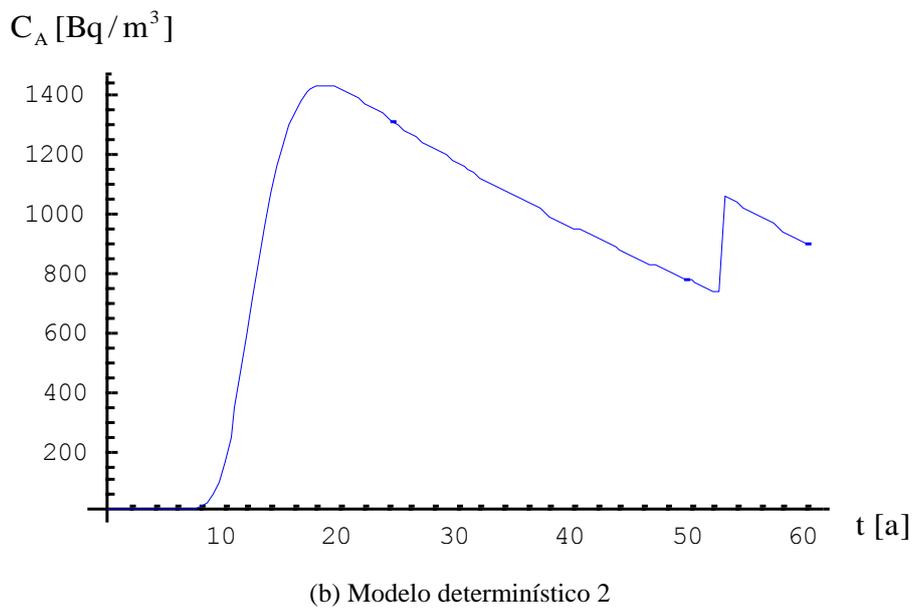
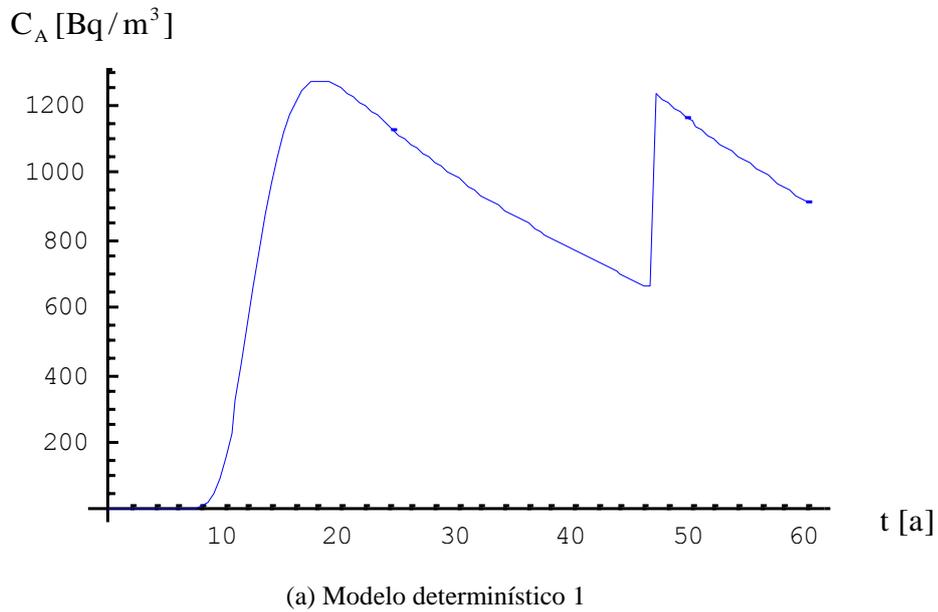


Figura 6.8 – Concentração em atividade ao longo do aquífero (muitos pontos) para $x = 0,5$ m

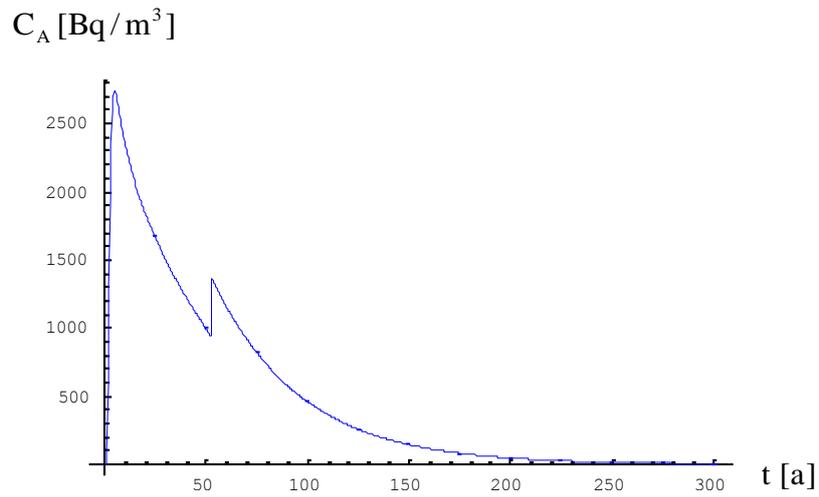
Com o auxílio da Fig. 6.8, pode-se utilizar uma argumentação mais convincente com relação às diferenças dos segundos pontos de máximos da função C_A , quando determinada com os modelos determinísticos 1 e 2.

Conforme mencionado anteriormente, o transbordamento do repositório ocorre nos instantes de tempo iguais a 47 anos e 53 anos nos modelos determinísticos 1 e 2, respectivamente. Isso equivale a uma diferença de tempo de decaimento entre os dois modelos igual a 6 anos. Na Tabela 1, é mostrado que a constante de decaimento radioativo do ^{127}Cs , λ , é igual a $2,31 \times 10^{-2} \text{ a}^{-1}$. Assim, observa-se que existe um fator de redução entre os dois modelos igual a $e^{-\lambda \cdot t}$, que equivale a 0,8706 para um tempo de 6 anos. Como o segundo ponto de máximo de C_A na Fig. 6.8-(a) é aproximadamente igual a 1200 Bq/m^3 , então, multiplicando-se este valor por 0,8706 obtém-se um valor de C_A igual a 1045 Bq/m^3 , que está muito próximo do valor apresentado na Fig. 6.8-(b).

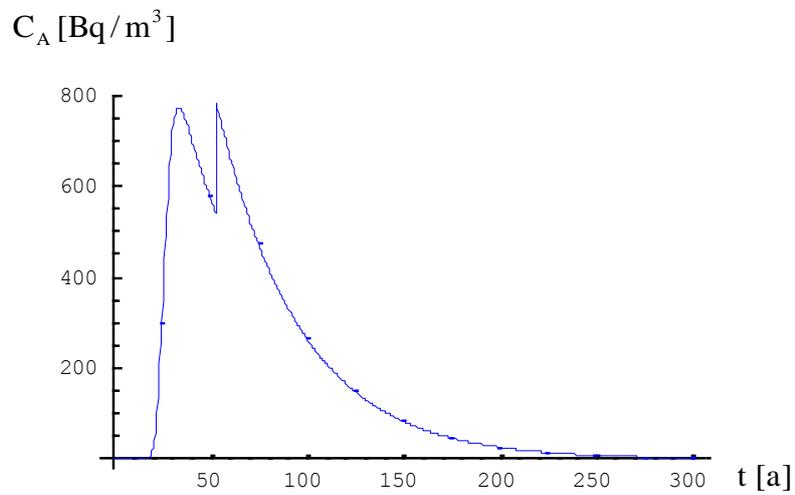
O comportamento de C_A com o tempo, em função da distância entre o poço e o repositório, x , é mostrado nas Figs. 6.9 e 6.10. Os valores apresentados nestas figuras foram obtidos com a utilização do programa REPDA2.

Observa-se, com o auxílio da Fig. 6.9, que para valores de x iguais a 0,1 m e 1 m, a função C_A possui dois pontos de máximos, de maneira similar ao que ocorre para $x = 0,5 \text{ m}$ na Fig. 6.8, cuja situação já foi analisada anteriormente. Entretanto, a medida que o valor de x é incrementado, observa-se que o efeito do transbordamento do repositório, no valor de C_A , não pode mais ser observado no gráfico desta função, que agora tem a forma aproximada de um “sino”. Este resultado pode ser atribuído ao comportamento das funções exponenciais e da função erro complementar na Eq. (5.68).

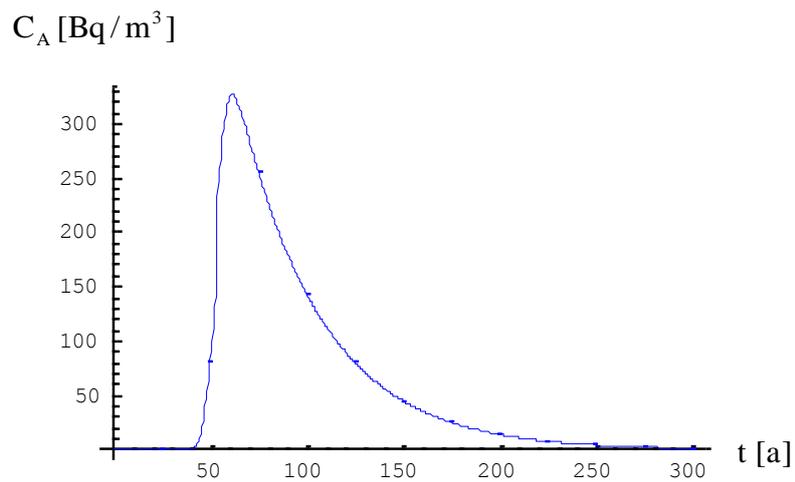
Observa-se, com o auxílio das Figs. 6.9 e 6.10 que o aumento no valor de x desloca a curva de C_A para a direita e provoca a redução no valor máximo deste parâmetro. Este comportamento pode ser atribuído ao aumento da influência da sorção no meio poroso, provocado pelo aumento no valor de x . Em outras palavras significa dizer que, um aumento no valor x provoca um aumento na espessura da barreira existente entre o radionuclídeo e o poço de captação de água no aquífero, provocando os efeitos mencionados anteriormente.



(a) Valor de x igual a 0,1 m

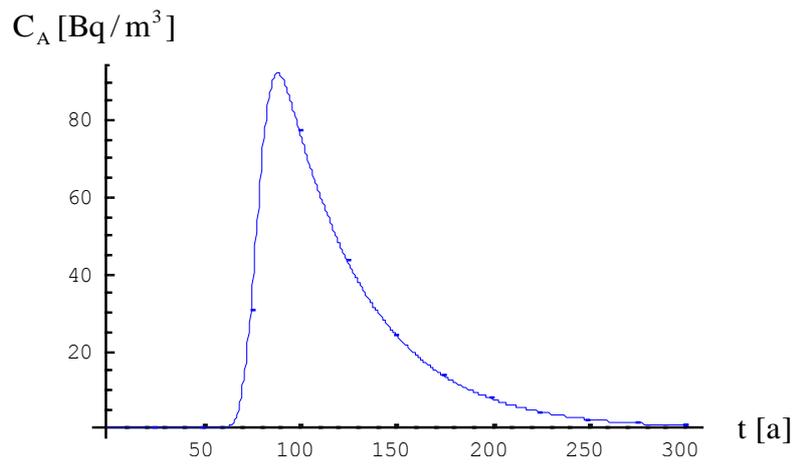


(b) Valor de x igual a 1 m

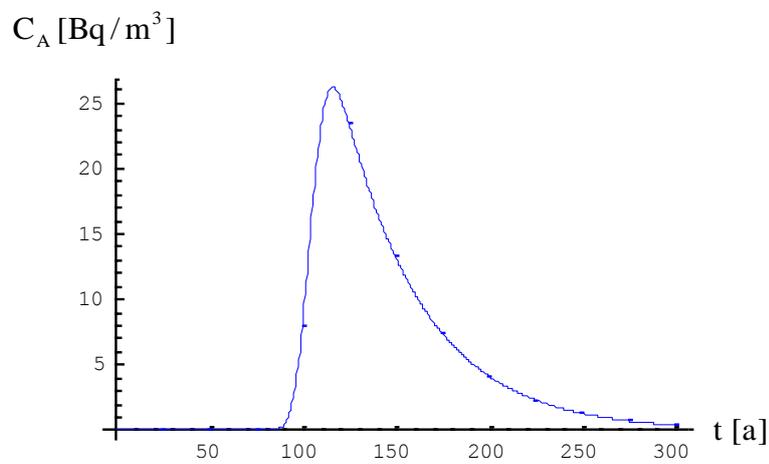


(c) Valor de x igual a 2 m

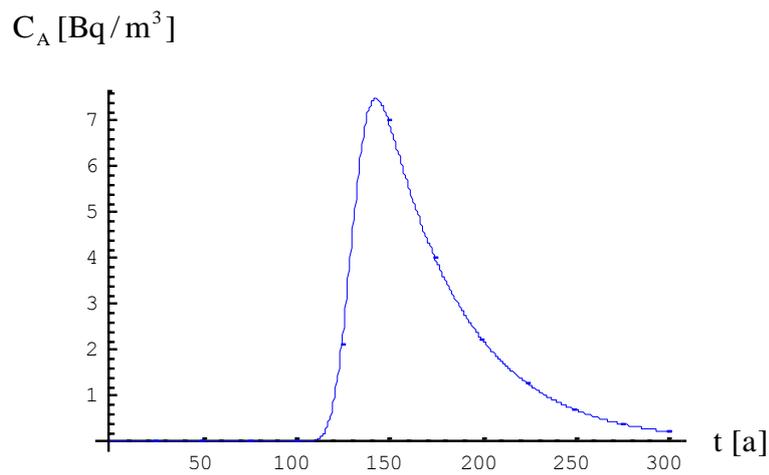
Figura 6.9 – Concentração em atividade ao longo do aquífero (muitos pontos) para valores de x iguais a 0,1 m, 1 m e 2 m no modelo determinístico 2



(a) Valor de x igual a 3 m



(b) Valor de x igual a 4 m



(c) Valor de x igual a 5 m

Figura 6.10 – Concentração em atividade ao longo do aquífero (muitos pontos) para valores de x iguais a 3 m, 4 m e 5 m no modelo determinístico 2

É importante ressaltar que os valores máximos de C_A (picos) apresentados nas Figs 6.9 e 6.10, para alguns valores de x , são iguais aos valores de $C_{A_{\max}}$ mostrados na Fig. 6.28 e na Tabela 6.11, para o modelo determinístico 2 (programa REFDA2).

6.3.3 Definição de um padrão determinístico para futuras comparações com os modelos estocásticos

Nos itens 6.3.1 e 6.3.2 foram comparadas as soluções analíticas com as soluções numéricas obtidas com a utilização do método de Runge-Kutta de quarta ordem, para os modelos matemáticos determinísticos 1 e 2. As comparações foram realizadas para a altura de coluna de líquido (água + radionuclídeos) no interior do repositório, H , a concentração em atividade em seu interior, C_R , a taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente, \dot{A} , a concentração em atividade no ponto de descarga em atividade no aquífero, C_D , e a concentração em atividade ao longo do mesmo, C_A . A concordância entre as soluções analítica e numérica, para estes parâmetros, foi considerada ótima com o máximo desvio relativo percentual encontrado igual a 0,01%. Assim, observa-se que as soluções analíticas para os modelos determinísticos 1 e 2 podem ser consideradas satisfatórias, e serão utilizadas para a comparação com os modelos estocásticos apresentados na seção 6.4.

6.4 MODELOS MATEMÁTICOS ESTOCÁSTICOS

6.4.1 Geral

A solução analítica para o modelo estocástico 1, apresentada no Apêndices D, foi implementada no programa de computador REPEA1, no Mathematica 9.0.

Paralelamente ao programa REPEA1, foi desenvolvido o programa REPEN1, cuja principal diferença em relação ao primeiro é a utilização de uma solução numérica para a Eq. (D.2), que é uma equação diferencial estocástica linear de Ito para a altura de coluna de líquido no interior do repositório, H . Neste programa, esta equação é

resolvida numericamente, utilizando-se o método de Euler-Maruyama (KLOEDEN & PLATEN, 1999; SAUER, 2012).

As denominações desses programas são oriundas das palavras chaves: “Repositório – Estocástico – Analítico” e “Repositório – Estocástico – Numérico”, com a numeração indicando que estes programas contêm o modelo estocástico 1. Conforme mencionado anteriormente, no modelo estocástico 1 são considerados apenas os vazamentos de material radioativo pela base e pelo teto (em caso de transbordamento) do repositório.

Adicionalmente, foi desenvolvido o programa REPEN2 contendo o modelo estocástico 2, apresentado no Apêndice E. Neste modelo estocástico, são consideradas as fugas de material radioativo pela base, paredes laterais e teto (em caso de transbordamento) do repositório. Consequentemente, a altura de coluna de líquido em seu interior, H , é representada por uma equação diferencial estocástica não-linear de Ito, [Eq. (E.2)]. No programa REPEN2, esta equação é resolvida numericamente pelo método de Euler-Maruyama.

Um resumo das aplicações dos programas de computador, com modelagem estocástica, é apresentado na Tabela 6.7.

Tabela 6.7 - Programas de computador desenvolvidos para os modelos estocásticos 1 e 2

Modelos Estocásticos	Tipo de solução	
	Analítica	Numérica
1	REPEA1	REPEN1
2	(*)	REPEN2

(*) – Solução não disponibilizada pelo fato de que a equação diferencial de Ito é não-linear

6.4.2 Resultados obtidos com os modelos estocásticos 1 e 2

6.4.2.1 Geral

Os programas REPEA1 e REPEN1, contendo respectivamente as soluções analítica e numérica do modelo estocástico 1 (vide Apêndice D), foram executados uma única vez (ou seja, para uma única chuva) com os dados da Tabela 6.1, e os resultados são apresentados nas Tabelas 6.8 e 6.9.

Tabela 6.8 – Valores obtidos com o programa de computador REPEA1

Tempo [a]	H [m]	C_R [Bq/m ³]	\dot{A} [Bq/a]	C_D [Bq/m ³]	C_A [Bq/m ³] (x = 0,5 m)
0	10 ⁻⁴	3,3258x10 ¹¹	1,2326x10 ¹¹	5,0253x10 ⁶	0
1	7,7760x10 ⁻¹	4,1792x10 ⁷	7,5674x10 ⁷	3,0852x10 ³	0
2	1,8002	1,7640x10 ⁷	6,5352x10 ⁷	2,6644x10 ³	0
3	1,2608	2,4612x10 ⁷	6,6591x10 ⁷	2,7149x10 ³	1,8329x10 ⁻¹³
4	1,7438	1,7388x10 ⁷	6,2603x10 ⁷	2,5523x10 ³	1,3358x10 ⁻⁷
5	2,0307	1,4591x10 ⁷	6,0284x10 ⁷	2,4578x10 ³	3,1261x10 ⁻⁴
10	4,3800	6,0270x10 ⁶	- 1,4991x10 ⁹	- 6,1116x10 ⁴	- 3,9941x10 ³
20	2,2672	9,2412x10 ⁶	4,2231x10 ⁷	1,7217x10 ³	1,2492x10 ³
30	4,3800	3,7969x10 ⁶	6,6934x10 ⁸	2,7289x10 ⁴	2,0060x10 ⁴
40	4,3800	3,0137x10 ⁶	1,3852x10 ⁹	5,6474x10 ⁴	4,1515x10 ⁴
50	4,3800	2,3920x10 ⁶	3,3699x10 ⁷	1,3739x10 ³	1,0100x10 ³
60	4,3800	1,8986x10 ⁶	- 5,2105x10 ⁷	- 2,1243x10 ³	- 1,5616x10 ³
70	4,3800	1,5070x10 ⁶	3,2277x10 ⁸	1,3159x10 ⁴	9,6736x10 ³
80	4,3800	1,1961x10 ⁶	1,0900x10 ⁸	4,4440x10 ³	3,2668x10 ³
90	4,3800	9,4936x10 ⁵	- 4,4020x10 ⁷	- 1,7947x10 ³	- 1,3193x10 ³
100	4,3800	7,5353x10 ⁵	- 2,4802x10 ⁸	- 1,0112x10 ⁴	- 7,4333x10 ³
150	4,3800	2,3737x10 ⁵	- 7,1328x10 ⁷	- 2,9080x10 ³	- 2,1377x10 ³
200	4,3800	7,4776x10 ⁴	1,9059x10 ⁷	7,7703x10 ²	5,7121x10 ²
250	4,3800	2,3556x10 ⁴	- 9,9851x10 ⁵	- 4,0709x10 ¹	- 2,9926x10 ¹
300	4,3800	7,4204x10 ³	- 1,1409x10 ⁶	- 4,6516x10 ¹	- 3,4194x10 ¹

Tabela 6.9 – Valores obtidos com o programa de computador REPEN1

Tempo [a]	H [m]	C _R [Bq/m ³]	\dot{A} [Bq/a]	C _D [Bq/m ³]	C _A [Bq/m ³] (x = 0,5 m)
0	10 ⁻⁴	3,3258x10 ¹¹	1,2326x10 ¹¹	5,0253x10 ⁶	0
1	7,8319x10 ⁻¹	4,1494x10 ⁷	7,5134x10 ⁷	3,0632x10 ³	0
2	1,8133	1,7513x10 ⁷	6,4880x10 ⁷	2,6452x10 ³	0
3	1,2690	2,4453x10 ⁷	6,6161x10 ⁷	2,6974x10 ³	1,8211x10 ⁻¹³
4	1,7553	1,7275x10 ⁷	6,2195x10 ⁷	2,5357x10 ³	1,3271x10 ⁻⁷
5	2,0438	1,4497x10 ⁷	5,9898x10 ⁷	2,4420x10 ³	3,1060x10 ⁻⁴
10	4,3800	6,0270x10 ⁶	- 1,4991x10 ⁹	- 6,1116x10 ⁴	- 3,9941x10 ³
20	2,2722	9,2212x10 ⁶	4,2139x10 ⁷	1,7180x10 ³	1,2465x10 ³
30	4,3800	3,7969x10 ⁶	6,6934x10 ⁸	2,7289x10 ⁴	2,0060x10 ⁴
40	4,3800	3,0137x10 ⁶	1,3852x10 ⁹	5,6474x10 ⁴	4,1515x10 ⁴
50	4,3800	2,3920x10 ⁶	3,37000x10 ⁷	1,3739x10 ³	1,0100x10 ³
60	4,3800	1,8986x10 ⁶	- 5,2105x10 ⁷	- 2,1243x10 ³	- 1,5616x10 ³
70	4,3800	1,5070x10 ⁶	3,2277x10 ⁸	1,3159x10 ⁴	9,6736x10 ³
80	4,3800	1,1961x10 ⁶	1,0900x10 ⁸	4,4440x10 ³	3,2668x10 ³
90	4,3800	9,4936x10 ⁵	- 4,4020x10 ⁷	- 1,7947x10 ³	- 1,3193x10 ³
100	4,3800	7,5353x10 ⁵	- 2,4802x10 ⁸	- 1,0112x10 ⁴	- 7,4333x10 ³
150	4,3800	2,3737x10 ⁵	- 7,1328x10 ⁷	- 2,9080x10 ³	- 2,1377x10 ³
200	4,3800	7,4776x10 ⁴	1,9059x10 ⁷	7,7703x10 ²	5,7121x10 ²
250	4,3800	2,3556x10 ⁴	- 9,9851x10 ⁵	- 4,0709x10 ¹	- 2,9926x10 ¹
300	4,3800	7,4204x10 ³	- 1,1409x10 ⁶	- 4,6516x10 ¹	- 3,4194x10 ¹

Os valores obtidos com o programa de computador REPEN2 (solução numérica), desenvolvido para o modelo estocástico 2 (vide Apêndice E), são apresentados na Tabela 6.10. Este programa também foi executado com os dados apresentados na Tabela 6.1.

Tabela 6.10 – Valores obtidos com o programa de computador REPEN2

Tempo [a]	H [m]	C_R [Bq/m ³]	\dot{A} [Bq/a]	C_D [Bq/m ³]	C_A [Bq/m ³] (x = 0,5 m)
0	10 ⁻⁴	3,3258x10 ¹¹	1,2326x10 ¹¹	5,0253x10 ⁶	0
1	7,8225x10 ⁻¹	4,1544x10 ⁷	7,8769x10 ⁷	3,2114x10 ³	0
2	1,8106	1,7539x10 ⁷	7,2523x10 ⁷	2,9567x10 ³	0
3	1,2617	2,4594x10 ⁷	7,1493x10 ⁷	2,9148x10 ³	1,9678x10 ⁻¹³
4	1,7458	1,7368x10 ⁷	6,9232x10 ⁷	2,8226x10 ³	1,4772x10 ⁻⁷
5	2,0306	1,4591x10 ⁷	6,7827x10 ⁷	2,7653x10 ³	3,5172x10 ⁻⁴
10	4,3800	6,0270x10 ⁶	- 1,4990x10 ⁹	- 6,1116x10 ⁴	- 3,9941x10 ³
20	1,9868	1,0546x10 ⁷	4,7933x10 ⁷	1,9542x10 ³	1,4178x10 ³
30	4,3800	3,7969x10 ⁶	6,6934x10 ⁸	2,7289x10 ⁴	2,0060x10 ⁴
40	4,3800	3,0137x10 ⁶	1,3852x10 ⁹	5,6474x10 ⁴	4,1515x10 ⁴
50	4,3800	2,3920x10 ⁶	3,3699x10 ⁷	1,3739x10 ³	1,0100x10 ³
60	4,3800	1,8986x10 ⁶	- 5,2105x10 ⁷	- 2,1243x10 ³	- 1,5616x10 ³
70	4,3800	1,5069x10 ⁶	3,2277x10 ⁸	1,3159x10 ⁴	9,6736x10 ³
80	4,3800	1,1961x10 ⁶	1,0900x10 ⁸	4,4440x10 ³	3,2668x10 ³
90	4,3800	9,4936x10 ⁵	- 4,4020x10 ⁷	- 1,7947x10 ³	- 1,3193x10 ³
100	4,3800	7,5352x10 ⁵	- 2,4802x10 ⁸	- 1,0112x10 ⁴	- 7,4333x10 ³
150	4,3800	2,3737x10 ⁵	- 7,1327x10 ⁷	- 2,9080x10 ³	- 2,1377x10 ³
200	3,5001	9,3585x10 ⁴	7,8509x10 ⁵	3,2008x10 ¹	2,3530x10 ¹
250	4,3800	2,3556x10 ⁴	- 9,9851x10 ⁵	- 4,0709x10 ¹	- 2,9926x10 ¹
300	4,3800	7,4204x10 ³	- 1,1409x10 ⁶	- 4,6516x10 ¹	- 3,4194x10 ¹

Os valores dos números escolhidos aleatoriamente de uma distribuição normal padrão N(0,1), n_i , do processo de Wiener, W_t , do ruído branco gaussiano, ε , da altura

de coluna de líquido e da concentração em atividade no interior do repositório, representadas respectivamente pelos símbolos H e C_R , da taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente, \dot{A} , da concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero, C_D , e da concentração em atividade ao longo do aquífero, C_A , são apresentados a seguir em forma de gráficos.

6.4.2.2 Números escolhidos aleatoriamente de uma distribuição normal padrão

Na Fig. 6.11 são mostrados os valores dos números n_i escolhidos aleatoriamente de uma distribuição normal padrão $N(0,1)$, para uma única chuva, utilizando-se o Mathematica 9.0 (observa-se que $\pm 3\sigma$ é igual a ± 3 , pois $\sigma=1$). Para atingir este objetivo, devem-se utilizar os seguintes comandos nesta ordem:

- `<<Statistics`ContinuousDistributions;`
- `ndist=NormalDistribution[0,1];`
- `a=CDF[ndist,x];`
- `ni=Table[Random[ndist],{n}]`.

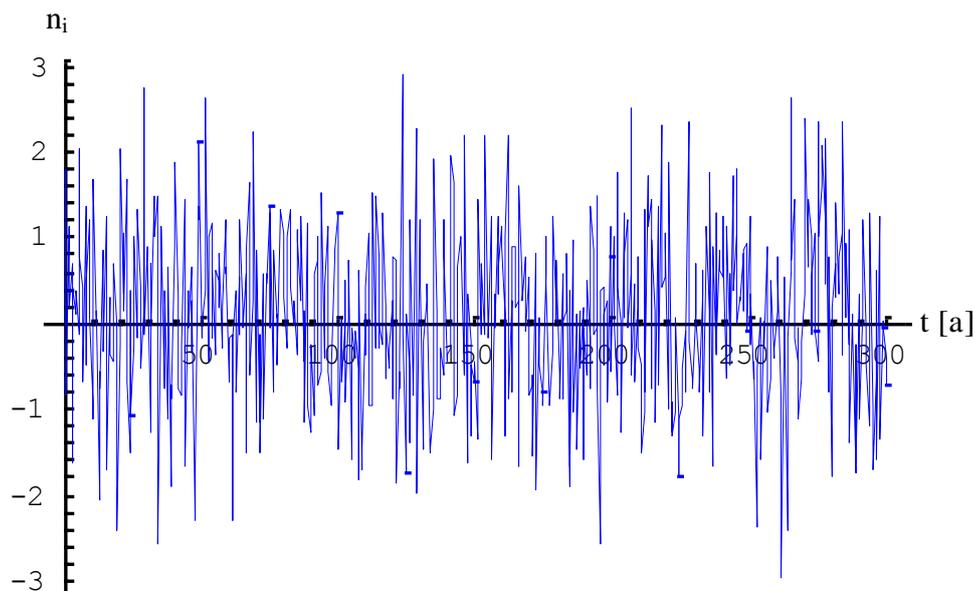


Figura 6.11 – Valores dos números n_i escolhidos aleatoriamente de uma distribuição normal padrão $N(0,1)$ no Mathematica 9.0

O conjunto de números n_i apresentado na Fig. 6.11, englobando um período de tempo no intervalo de 0 a 300 anos, está associado a um tipo de chuva neste intervalo.

Assim, em cada execução dos programas com modelagem estocástica REPEA1, REPEN1 e REPEN2, um novo tipo de chuva é determinado pela escolha aleatória de um novo conjunto de números n_i , e todos os parâmetros de importância para o repositório são calculados para esta nova situação. Observa-se que, esta técnica é mais abrangente e mais segura do que se utilizar o levantamento histórico de chuvas, na região do repositório, durante um período de tempo, porque os valores obtidos para a chuva são mais conservadores.

6.4.2.3 Processo de Wiener

Na seção 4.4.4 foi mostrado que o processo de Wiener pode ser representado pela expressão $W_{t_i} = W_{t_{i-1}} + \sqrt{\Delta t_i} \cdot n_i$, onde por definição $W(0) = 0$. Assim, utilizando-se nesta expressão os valores de n_i (que podem ser positivos, negativos ou nulos) apresentados na Fig. 6.11, juntamente com o valor $\Delta t = 0,5$ a, obtêm-se os valores de W_t apresentados na Fig. 6.12.

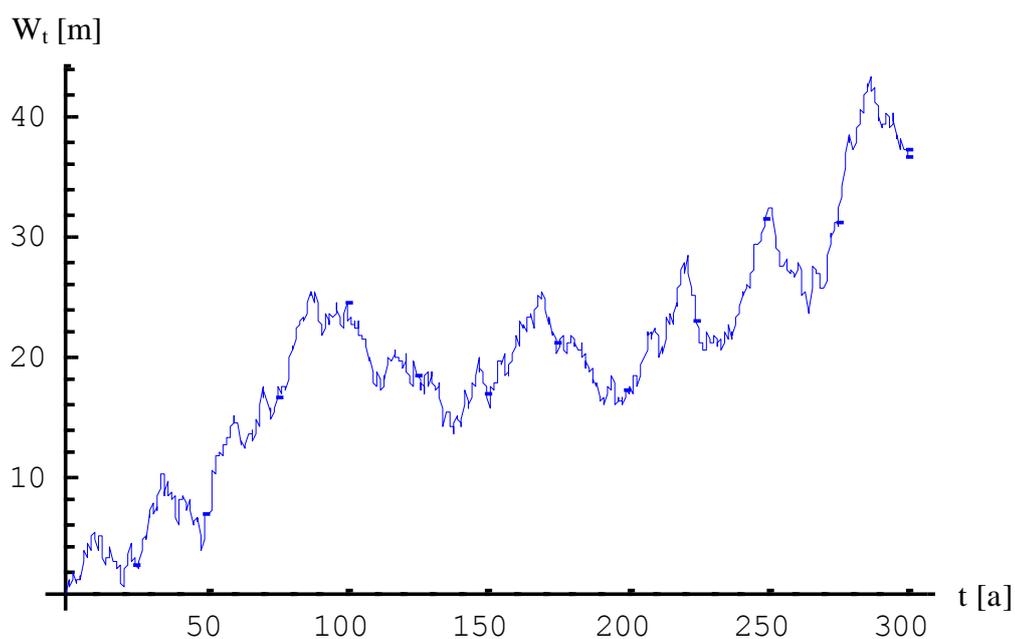


Figura 6.12 – Representação do processo de Wiener

6.4.2.4 Ruído branco gaussiano

O ruído branco gaussiano, ε , foi definido na seção 4.5 como a derivada do processo de Wiener em relação ao tempo, ou seja, $\varepsilon = \frac{dW_t}{dt}$. Embora esta definição não seja matematicamente correta, pois, de acordo com MISTURINI (2010) esta derivada não existe para nenhum ponto da trajetória desse processo (vide Fig. 6.12), ela não interfere na solução das equações diferenciais estocásticas, já que esta não se baseia no conceito de derivada e sim no de integrais estocásticas que são muito bem elaboradas matematicamente.

Na Eq. (4.11) é mostrado que $\Delta W_i = \sqrt{\Delta t} \cdot n_i$. Substituindo-se esta equação na expressão anterior utilizada na definição de ε , obtém-se: $\varepsilon_i = n_i / \sqrt{\Delta t}$. Assim, para os números n_i mostrados na Fig. 6.11 e $\Delta t = 0,5$ a, obtém-se o gráfico apresentado na Fig. 6.13 para o ruído branco gaussiano.

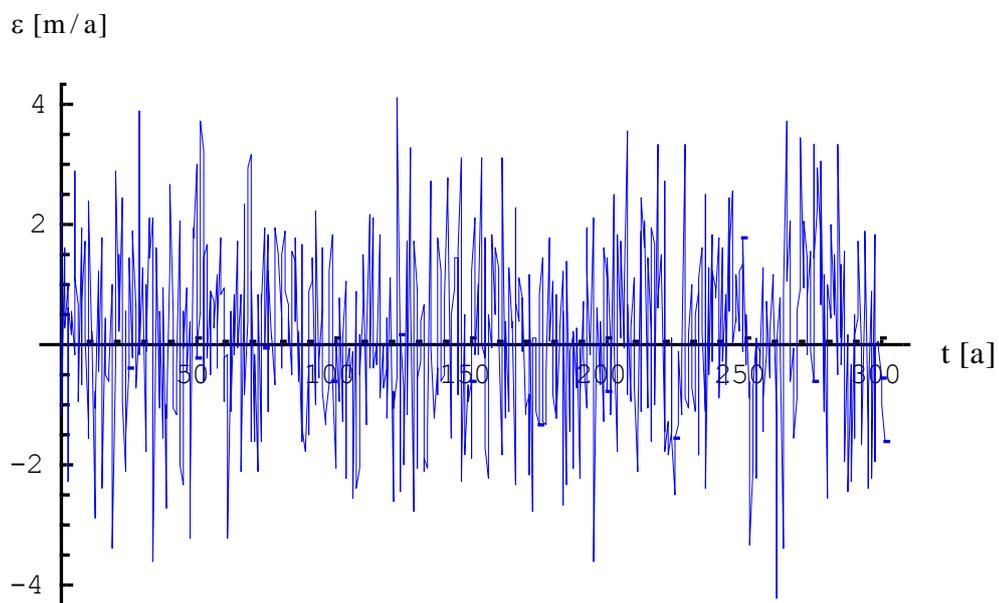


Figura 6.13 – Representação do ruído branco gaussiano

6.4.2.5 Vazão volumétrica de água que entra no repositório

A vazão volumétrica de água que entra através do teto do repositório, \dot{Q}_1 , é representada no modelo estocástico pela Eq. (5.70).

Para uma chuva representada pelos números n_i da Fig. 6.11 e utilizando-se a Eq. (5.70), obtêm-se os valores \dot{Q}_1 mostrados no gráfico da Fig. 6.14.

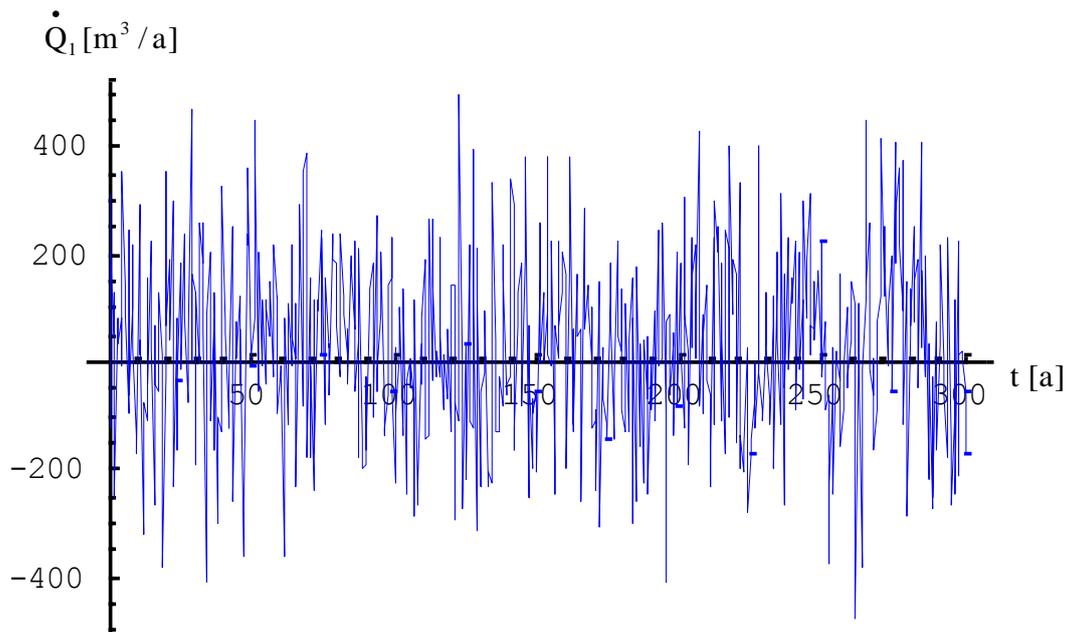


Figura 6.14 – Vazão volumétrica de água que entra no interior do repositório

Os valores negativos de \dot{Q}_1 não possuem significado físico, porém eles são mantidos na Fig. 6.14 apenas para mostrar as oscilações nos valores desse parâmetro ao longo do tempo.

6.4.2.6 Altura de coluna de líquido no interior do repositório

Os valores da altura de coluna de líquido no interior do repositório, H , apresentados nas Tabelas 6.8, 6.9, e 6.10, são colocados em forma de gráfico na Fig. 6.15.

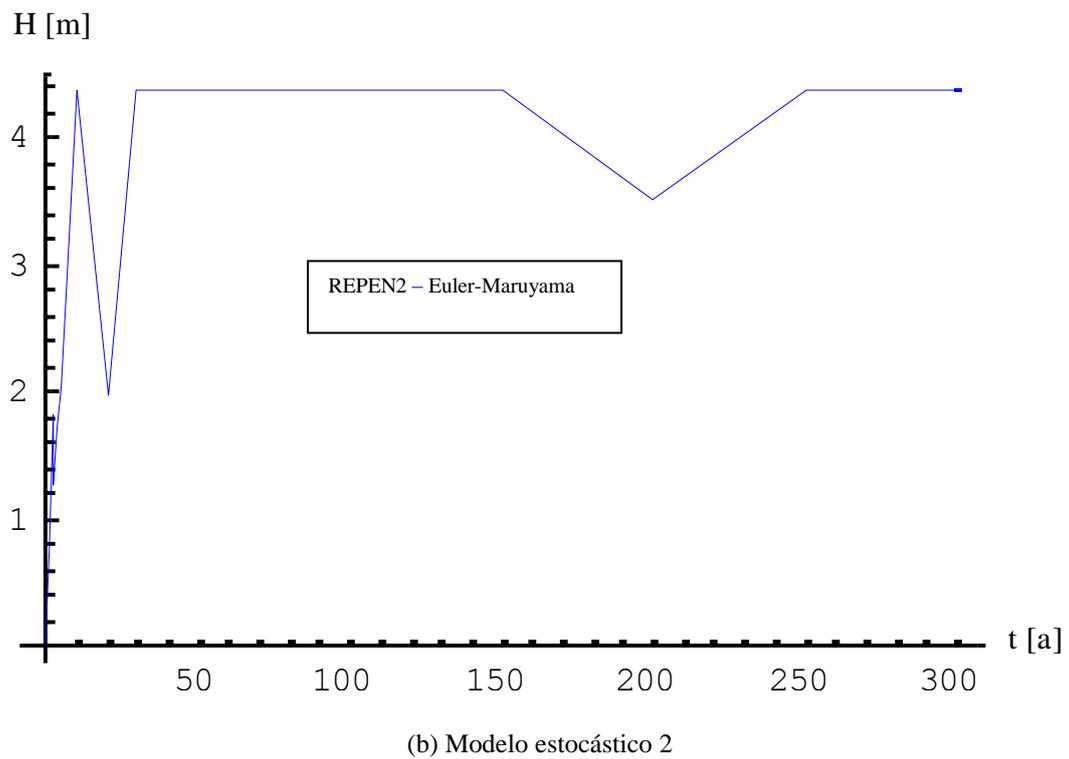
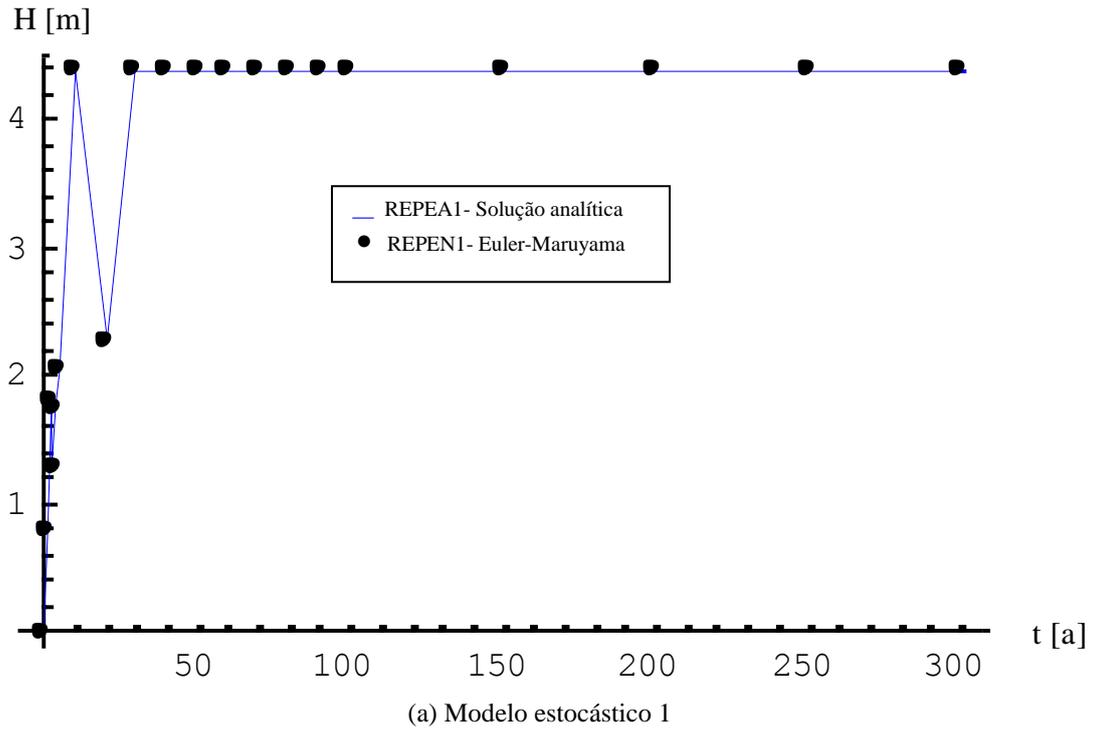


Figura 6.15 – Altura de coluna de líquido no interior do repositório utilizando-se um filtro para limitar a altura máxima igual a 4,38 m

Na Fig. 6.15-(a) são mostrados em forma de gráfico os valores do modelo estocástico 1 (vide Apêndice D), sendo a solução analítica (Tabela 6.8) representada em forma de linha e a solução numérica em forma de ponto (Tabela 6.9).

Os valores do modelo estocástico 2 (vide Apêndice E) são representados na Fig. 6.15-(b), apenas para a solução numérica da Eq. (5.71), utilizando-se o método de Euler-Maruyama (Tabela 6.10). A solução analítica desta equação não foi incluída no escopo desta tese. Por ser uma equação estocástica não-linear iria tornar este escopo ainda mais pesado, sem trazer contribuições significativas para o entendimento do problema tratado aqui.

Os gráficos das Fig. 6.15 foram construídos utilizando-se um filtro nos programas REPEA1, REPEN1 e REPEN2, para evitar valores de H fora do intervalo de projeto, ou seja, $0 \leq H \leq H_r$, onde H_r é a altura interna do repositório igual a 4,38 m.

Observa-se, com o auxílio da Fig. 6.15-(a) que, para os números n_i mostrados na Fig. 6.11 (representando um tipo de chuva), H é uma função crescente com o tempo no intervalo de 0 a 10 anos, sendo limitada em $H = 4,38$ m pelos filtros dos programas. Após este intervalo, os valores de H diminuem até atingir seu valor mínimo igual a 2,2722 m (no programa REPEN1) e 2,2672 m (no programa REPEA1), no instante de tempo igual a 20 anos. Em seguida, os valores de H aumentam novamente até atingir a altura interna do repositório em $t = 30$ anos e são limitados novamente pelos filtros mencionados anteriormente até o instante de tempo final $t = 300$ anos.

De acordo com os valores apresentados nas Tabelas 6.8 e 6.9, observa-se que o desvio relativo percentual máximo entre a solução analítica (programa REPEA1) e a solução numérica (programa REPEN1) do modelo estocástico 1 é igual a 0,7224%, evidenciando que existe uma boa concordância entre estas soluções, para a altura de coluna de líquido no interior do repositório. Estes resultados foram obtidos utilizando-se valores de Δt iguais a 0,5 a (0,5 ano) no método de Euler-Maruyama. Esse desvio pode ser reduzido significativamente reduzindo-se os valores de Δt no programa REPEN1 (vide Apêndice F), mas esta alternativa não será utilizada aqui, pois este erro não provoca nenhum impacto no valor da distância crítica do repositório de Abadia de

Goiás, x_{crit} . Isso ocorre porque os valores de x_{crit} são determinados utilizando-se os valores máximos de concentração em atividade no aquífero $C_{A_{max}}$, para cada valor de x . Como os valores de $C_{A_{max}}$ ocorrem durante o transbordamento do repositório, os valores de H , obtidos com os programas de computador REPEA1 e REPEN1, para esta situação, são iguais entre si. Seu valor é igual a altura interna do repositório, ou seja, 4,38 m.

Quando os filtros para a limitação dos valores de H no intervalo $0 \leq H \leq H_r$ são desativados nos programas de computador REPEA1 e REPEN1, obtêm-se os valores de H apresentados na Fig. 6.16. Observa-se, com o auxílio desta figura, que existe uma boa concordância entre as soluções analítica (programa REPEA1) e numérica (programa REPEN1) no intervalo $0 \leq H \leq 25$ m, com um desvio relativo percentual máximo igual a 0,7224%, para o intervalo de tempo compreendido entre 0 e 300 anos.

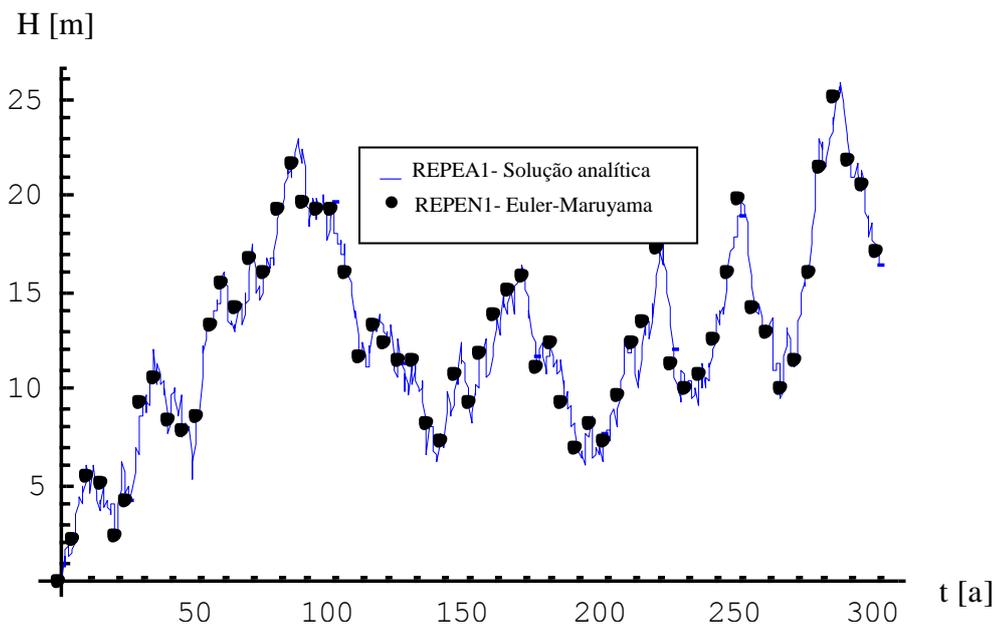


Figura 6.16 – Altura de coluna de líquido no interior do repositório sem a utilização de filtros para controle de H no modelo estocástico 1

Enquanto na Fig. 6.15-(a) o valor de H é mantido em 4,38 m pelo filtro do programa até $t = 300$ anos, na Fig. 6.15-(b) o valor deste parâmetro sofre uma redução de 4,38 m para 3,50 m (vide Tabela 6.10) em $t = 200$ anos.

Esta situação pode ser melhor entendida com o auxílio da Fig. 6.17, onde são representadas as curvas de H obtidas com os programas REPEN1 (modelo estocástico 1) e REPEN2 (modelo estocástico 2), para um repositório com altura ilimitada. Também é representada nesta figura a altura interna do repositório $H_r = 4,38$ m.

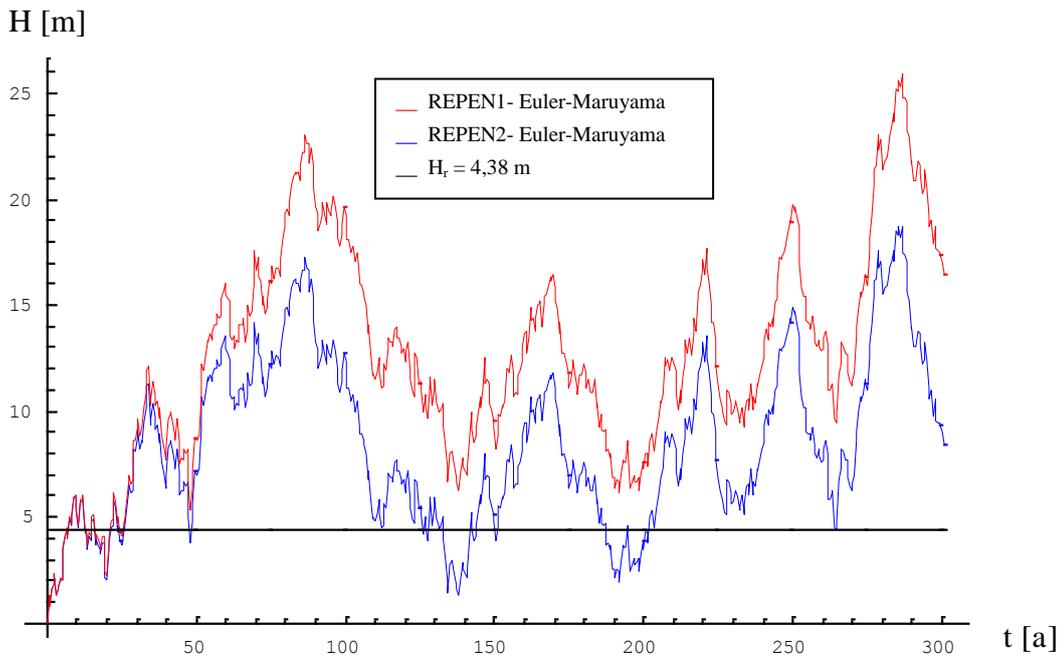


Figura 6.17 – Altura de coluna de líquido no interior do repositório sem a utilização de filtros nos modelos estocásticos 1 e 2

Com base na Fig. 6.17, observa-se que os valores de H obtidos com o modelo estocástico 2 (programa REPEN2), e representados pela curva azul nesta figura, são inferiores à altura interna do repositório, H_r , nas imediações da abscissa $t = 200$ anos. Este comportamento justifica o formato em “V” da curva de H nas imediações dessa abscissa, mostrado na Fig. 6.15-(b).

Observa-se com o auxílio da Fig. 6.17, que os valores de H obtidos com o modelo estocástico 1 são iguais ou superiores aos valores de H obtidos com o modelo estocástico 2, e que a diferença entre eles, para um mesmo instante de tempo t , aumenta com o valor de H . Este comportamento pode ser explicado observando que no modelo estocástico 1 são consideradas fugas de material radioativo pela base (proporcional a H) e teto (não depende de H) do repositório, enquanto que no modelo estocástico 2, além

dessas fugas é também considerada a fuga de material radioativo pelas paredes laterais do repositório que é proporcional a H^2 . Assim, o aumento no valor de H provoca um aumento muito maior na fuga de material radioativo pelas paredes laterais do repositório do que por sua base, fazendo com que o valor de H calculado com o modelo estocástico 2 seja cada vez menor que o calculado com o modelo estocástico 1.

Esta explicação pode ser melhor ilustrada com o auxílio da Fig. 6.18, onde é representada a diferença entre os respectivos valores de H calculados com os modelos estocásticos 1 e 2, $\Delta H_{1,2} = H_1 - H_2$, em função do tempo.

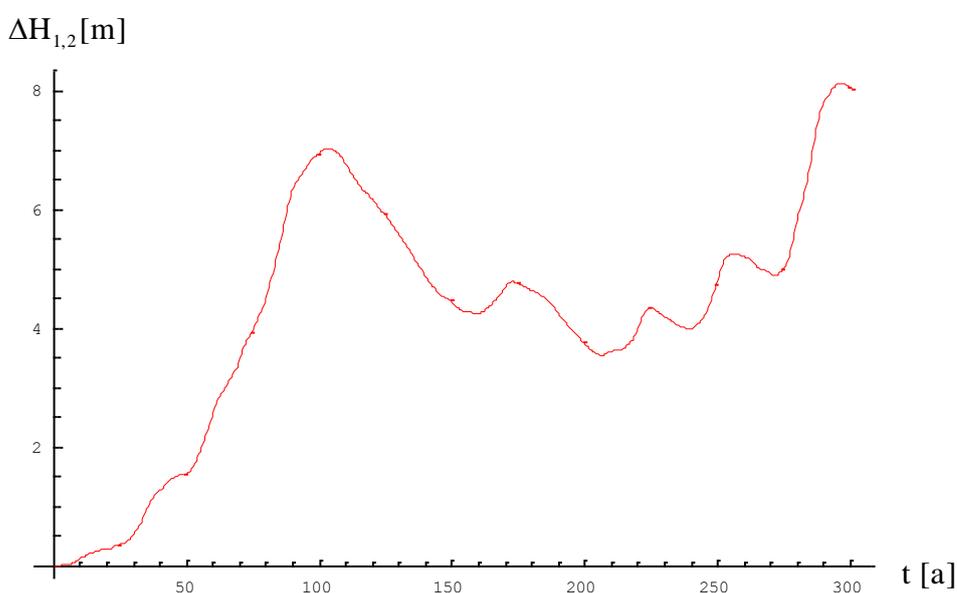


Figura 6.18 – Diferença entre os valores de H calculados com os modelos estocásticos 1 e 2

Observa-se, com o auxílio das Figs. 6.17 e 6.18, que os valores máximos de $\Delta H_{1,2}$ ocorrem aproximadamente nos instantes de tempo em que também são máximos os valores de H , calculados com os modelos estocásticos 1 e 2, confirmando as afirmações apresentadas no penúltimo parágrafo.

Uma característica encontrada na modelagem estocástica que a distingue da modelagem determinística é a possibilidade de ocorrência de vários transbordamentos

do repositório ao longo do tempo, mesmo quando a função de degradação do seu teto, F_d , é constante. Isso não ocorre na modelagem determinística.

Observa-se, com o auxílio da Fig. 6.15, a ocorrência de 2 transbordamentos no repositório nos instantes de tempo iguais a 10 e 30 anos.

Na seção 1.4 do Apêndice D foi mostrado que o valor médio do instante de tempo em que se inicia o transbordamento do repositório, na modelagem estocástica, é igual ao valor do instante de tempo em que se inicia o transbordamento do repositório, na modelagem determinística. Esta afirmativa é verdadeira para um número relativamente grande de tipos de chuva, e pode ser utilizada para simplificar o desenvolvimento dos programas de computador com modelagem estocástica, considerando-se um tempo médio para o transbordamento do repositório.

Entretanto, é importante frisar que este recurso não foi utilizado no desenvolvimento dos programas de computador REPEA1, REPEN1 e REPEN2. Nestes programas, todos os transbordamentos são tratados nos seus instantes de tempo reais (sem utilização de médias) e em cada situação é utilizada a equação apropriada para o cálculo de H , C_R , \dot{A} , C_D e C_A .

6.4.2.7 Concentração em atividade no interior do repositório

Na Fig. 6.19-(a) são representados os valores da concentração em atividade no interior do repositório, C_R , obtidos com o modelo estocástico 1 (vide Apêndice D). A solução analítica (Tabela 6.8) é representada em forma de linha e a solução numérica em forma de ponto (Tabela 6.9).

Os valores do modelo estocástico 2 (vide Apêndice E) são apresentados na Fig. 6.19-(b), apenas para a solução numérica da Eq. (5.71), obtidos com a utilização do método de Euler-Maruyama (Tabela 6.10).

Para a chuva representada pelos números n_i da Fig. 6.11, o comportamento da concentração em atividade no interior do repositório, na modelagem estocástica, é similar ao comportamento na modelagem determinística. Ou seja, C_R é uma função decrescente com o tempo devido ao aumento do volume de líquido no repositório e a redução da atividade em seu interior.

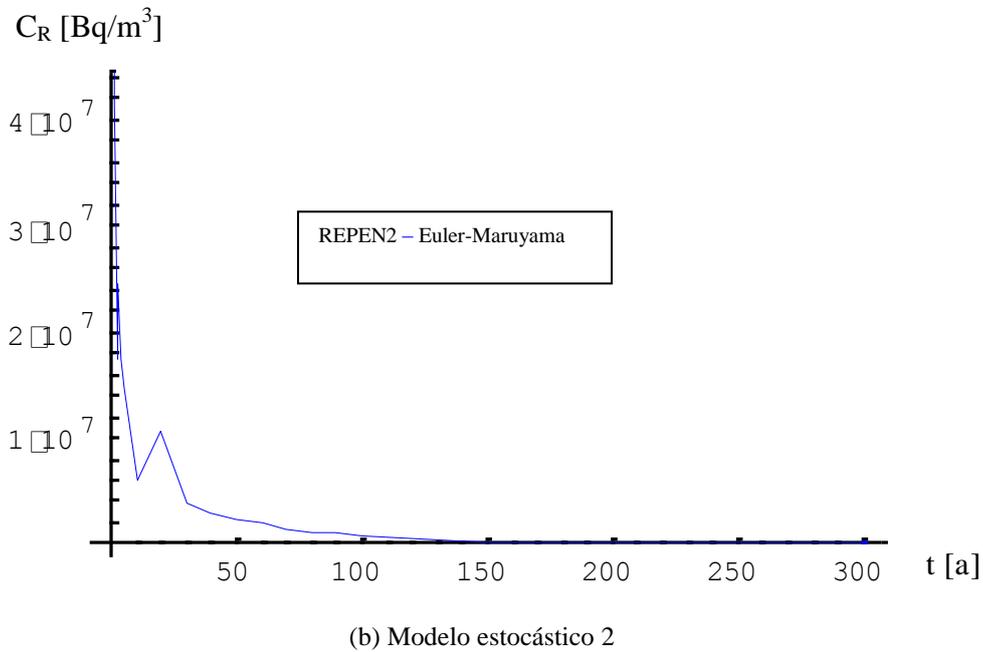
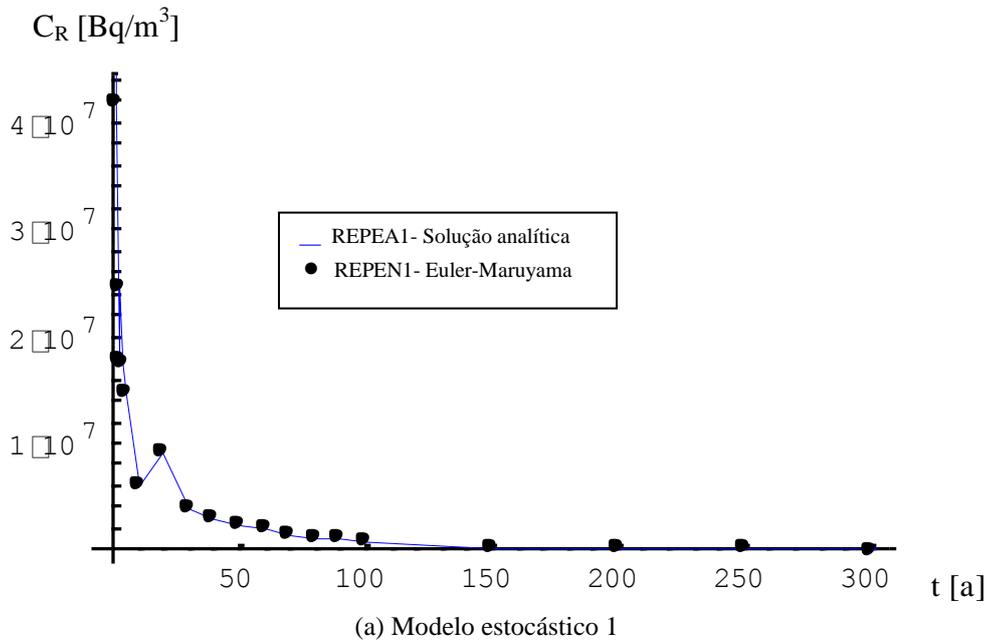


Figura 6.19 – Concentração em atividade no interior do repositório

Como no caso da modelagem determinística, a redução de atividade no interior do repositório, na modelagem estocástica, se deve principalmente ao decaimento radioativo, já que a fuga de material radioativo através das fronteiras do repositório desempenha um papel secundário (vide Apêndice D).

O aumento repentino de concentração em atividade que ocorre no instante de tempo igual a 20 anos é devido à redução no valor da altura de coluna de líquido no interior do repositório, H , mostrada na Fig. 6.15.

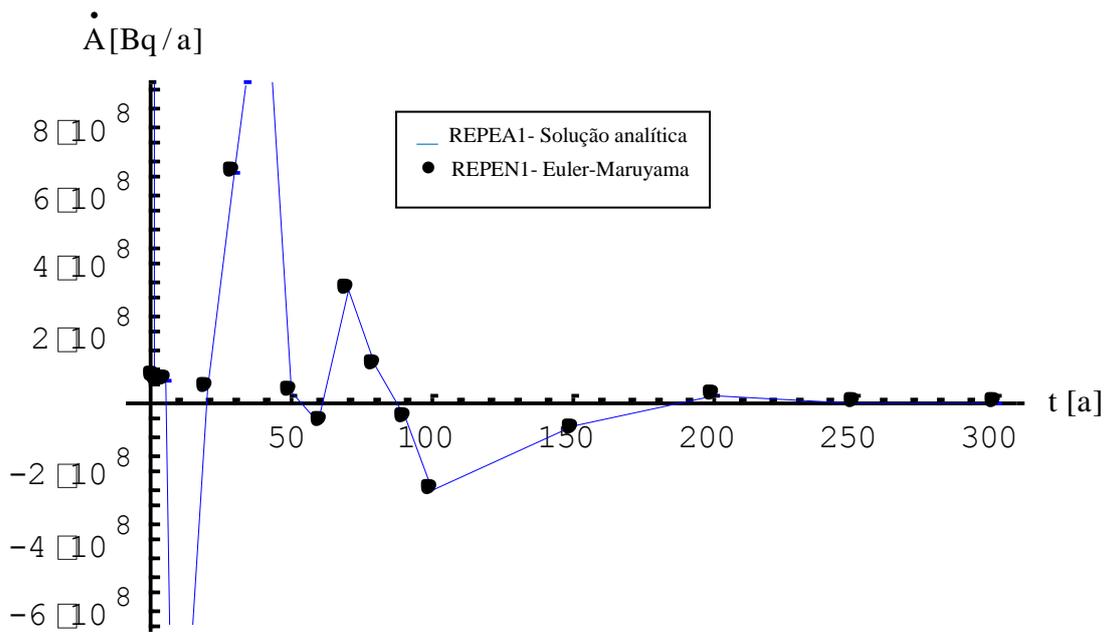
O desvio relativo percentual máximo entre a solução analítica (programa REPEA1) e a solução numérica (programa REPEN1) do modelo estocástico 1, obtido com os valores das Tabelas 6.8 e 6.9, é igual a 0,7252%, evidenciando uma boa concordância entre estas soluções, para a concentração em atividade no interior do repositório.

Observa-se, com o auxílio das Tabelas 6.9 e 6.10, que os valores de C_R obtidos com o modelo estocástico 2 são um pouco maiores que os obtidos com o modelo estocástico 1. Este resultado pode ser atribuído exclusivamente ao fato de que o volume da fase líquida no interior do repositório no modelo estocástico 2 é menor que no modelo estocástico 1, já que o valor de H é menor no modelo 2, e a atividade no interior do repositório é igual nos dois modelos.

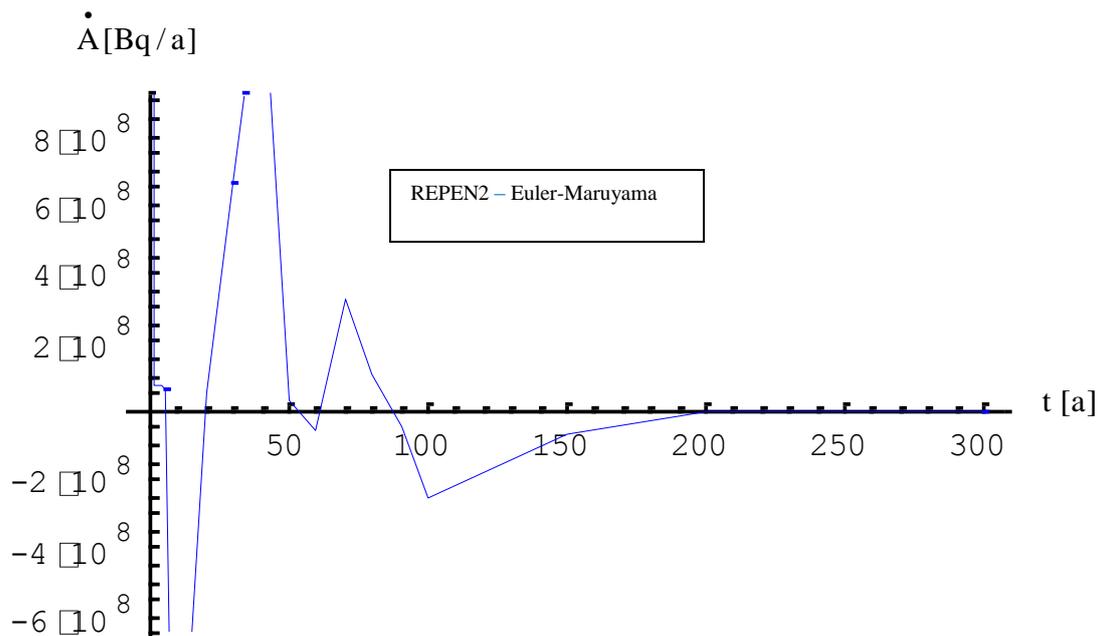
Uma evidência de que a atividade é igual nos dois modelos é encontrada nas Tabelas 6.9 e 6.10, observando-se que durante o transbordamento do repositório, onde os volumes das fases líquidas são iguais nos dois modelos, os valores de C_R obtidos com os modelos estocásticos 1 e 2 são praticamente iguais. Este tipo de abordagem já havia sido feita na análise realizada na seção 6.3.2.3 para os modelos determinísticos.

6.4.2.8 Taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente

Os valores da taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente, \dot{A} , apresentados nas Tabelas 6.8, 6.9, e 6.10, são colocados em forma de gráfico na Fig. 6.20.



(a) Modelo estocástico 1



(b) Modelo estocástico 2

Figura 6.20 – Taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente

Com o objetivo de se analisar o comportamento matemático de \dot{A} , não são utilizados filtros para excluir os valores negativos da chuva, embora estes valores não tenham significado físico.

No modelo estocástico, os números n_i escolhidos aleatoriamente de uma distribuição normal, $N(0,1)$, influenciam o ruído branco gaussiano, ε , que, de acordo com a Eq. (5.70), influencia os valores da vazão volumétrica de água que entra no interior do repositório, \dot{Q}_1 . Esta, por sua vez, influencia os valores de \dot{A} , durante o transbordamento do repositório [vide Eq. (5.71)].

Desta maneira, valores negativos de chuva, durante o transbordamento do repositório, podem levar a valores negativos de \dot{A} , desde que os valores de $|\varepsilon|$ sejam suficientemente grandes. Este fato é observado nas Tabelas 6.8, 6.9 e 6.10, onde valores negativos de \dot{A} só ocorrem quando H é igual a 4,38 m, ou seja, no transbordamento do repositório.

Na Fig. 6.20 é mostrado que, quando não são utilizados filtros para a chuva, a taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente, \dot{A} , possui um comportamento oscilatório amortecido, em torno do eixo das abscissas, ao longo do tempo, ou seja, seus valores tendem a 0 à medida que o tempo tende a infinito. Esse comportamento oscilatório é atribuído aos números n_i escolhidos aleatoriamente de uma distribuição normal padrão, $N(0,1)$, e que caracterizam o tipo de chuva (vide Fig. 6.11). Já o amortecimento é atribuído à redução da atividade com o tempo no interior do repositório, conforme mostrado na Fig. 6.4. Embora esta figura represente o comportamento da atividade no interior do repositório na modelagem determinística, é mostrado no Apêndice D, com a utilização de números adimensionais, que ela também se aplica à modelagem estocástica.

Na Fig. 6.20-(a) são representados os valores da taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente, \dot{A} , obtidos com o modelo estocástico 1. A solução analítica (vide Apêndice D) é representada em forma de linha e a solução numérica em forma de ponto (método de Euler-Maruyama).

O desvio relativo percentual máximo entre a solução analítica (programa REPEA1) e a solução numérica (programa REPEN1) do modelo estocástico 1, obtido com os

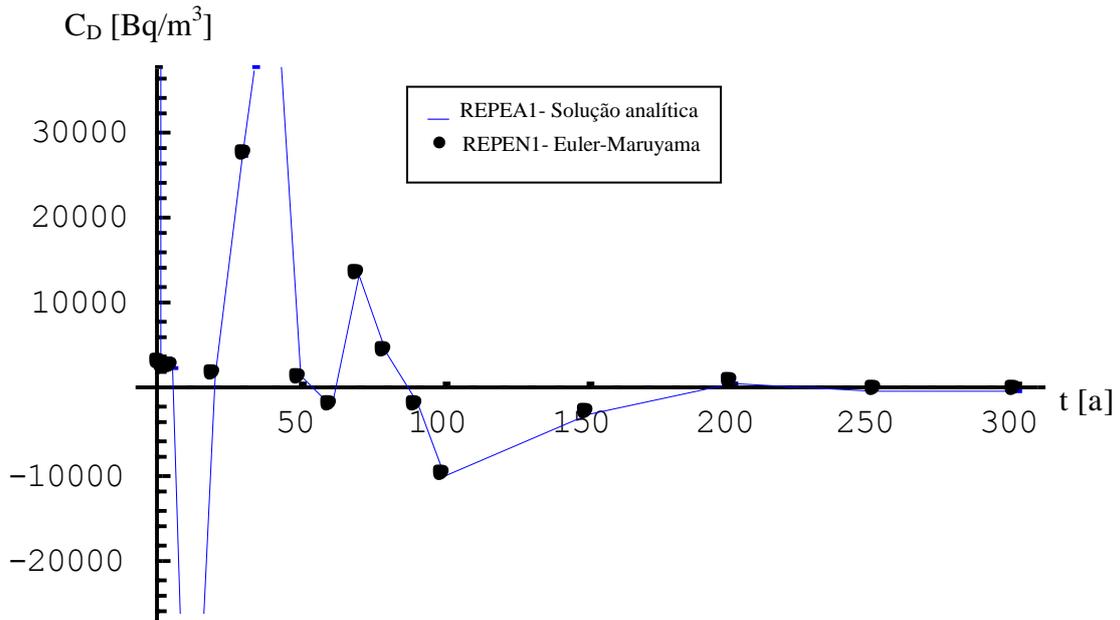
valores das Tabelas 6.8 e 6.9, é igual a 0,7222%. Este resultado mostra uma boa concordância entre estas soluções analítica e numérica, para a taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente.

Os valores da taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente, \dot{A} , obtidos com o modelo estocástico 2, são mostrados na Fig. 6.20-(b). Observa-se com o auxílio das Tabelas 6.9 e 6.10 que os valores de \dot{A} , obtidos com o modelo estocástico 2 são geralmente maiores que os valores obtidos para este parâmetro com o modelo estocástico 1. Isso ocorre porque os valores de concentração em atividade no interior do repositório e as fugas de material radioativo deste para o meio ambiente são maiores no modelo estocástico 2 [vide Eq. (5.48)].

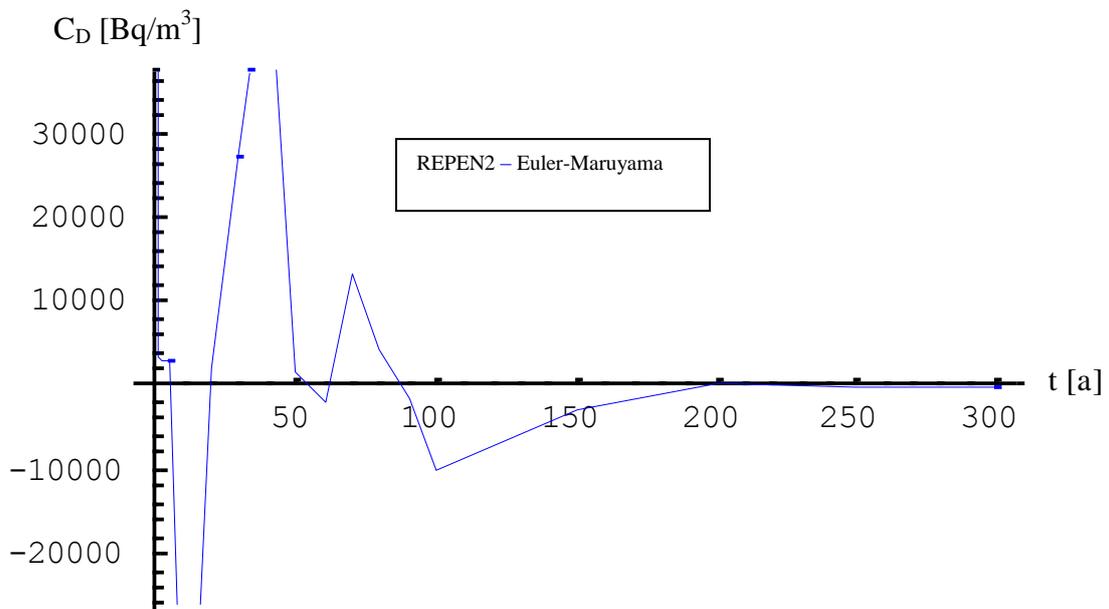
Entretanto, observa-se que, durante o transbordamento do repositório, os valores de \dot{A} são iguais nos dois modelos, já que também são iguais nos modelos estocásticos 1 e 2 a concentração em atividade no interior do repositório e as fugas de material radioativo deste para o meio ambiente (vide seção 6.3.2.5).

6.4.2.9 Concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero

Na Fig. 6.21 são mostrados em forma de gráficos os valores da concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero, C_D , apresentados nas Tabelas 6.8, 6.9, e 6.10. A não-utilização de filtros para selecionar apenas valores positivos de chuva conduz a valores negativos de C_D , como no caso da taxa de liberação em atividade, \dot{A} .



(a) Modelo estocástico 1



(b) Modelo estocástico 2

Figura 6.21 – Concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero

Na Fig. 6.21-(a) são representados os valores de C_D obtidos com o modelo estocástico 1. A solução analítica (vide Apêndice D) é representada em forma de linha e a solução numérica em forma de ponto (método de Euler-Maruyama).

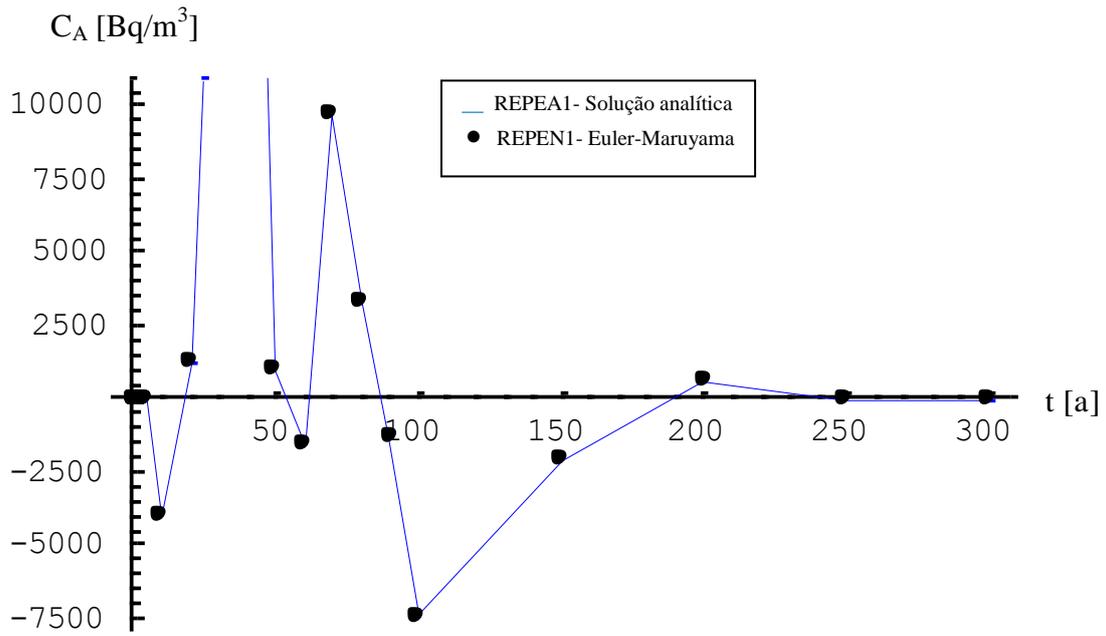
O desvio relativo percentual máximo entre a solução analítica (programa REPEA1) e a solução numérica (programa REPEN1) do modelo estocástico 1, obtido com os valores das Tabelas 6.8 e 6.9, é igual a 0,7258%, evidenciando que existe uma boa concordância entre as soluções analítica e numérica para a concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero, C_D .

Os valores de C_D , obtidos com o modelo estocástico 2, são mostrados na Fig. 6.21-(b). Observa-se, com o auxílio das Tabelas 6.9 e 6.10, que estes valores são geralmente maiores que os obtidos para este parâmetro com o modelo estocástico 1. Isso ocorre porque a concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero, C_D , é definida como a razão entre \dot{A} e a vazão volumétrica média de água no aquífero, \dot{Q}_a , que é considerada constante. Assim, observa-se que o parâmetro C_D tem o mesmo comportamento de \dot{A} .

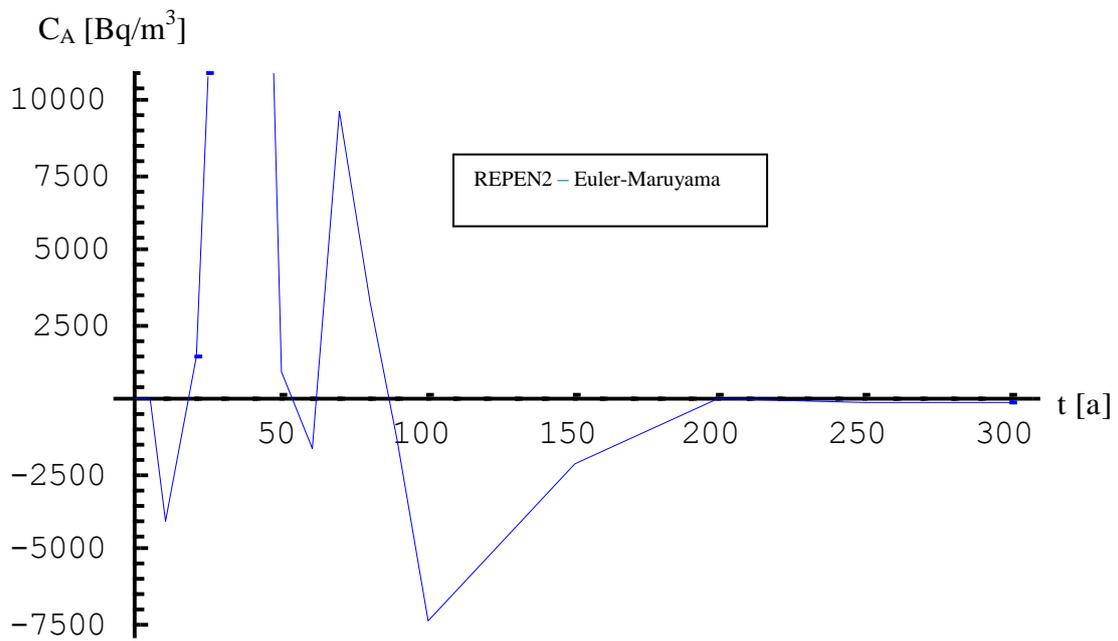
6.4.2.10 Concentração em atividade ao longo do aquífero

Os valores da concentração em atividade em um ponto do aquífero localizado a uma distância $x = 0,5$ m, C_A , são mostrados em forma de gráficos na Fig. 6.22. Estes valores são apresentados nas Tabelas 6.8, 6.9 e 6.10.

Também neste caso, observa-se a presença das oscilações amortecidas dos valores de C_A em torno do eixo das abscissas ao longo do tempo. Esse comportamento já era esperado, uma vez que a concentração em atividade ao longo do aquífero, C_A , é diretamente proporcional à concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero, C_D , que também possui esse comportamento.



(a) Modelo estocástico 2



(b) Modelo estocástico 2

Figura 6.22 – Concentração em atividade ao longo do aquífero

Na Fig. 6.22-(a) é mostrada uma boa concordância entre as soluções analítica (programa REPEA1) e numérica (programa REPEN1) da concentração em atividade ao longo do aquífero, C_A , já que o desvio relativo percentual máximo entre estas soluções, obtido com os valores das Tabelas 6.8 e 6.9, é igual a 0,6556%.

Os valores da concentração em atividade ao longo do aquífero, C_A , obtidos com o modelo estocástico 2 (programa REPEN2), são mostrados na Fig. 6.22-(b). Observa-se, com o auxílio das Tabelas 6.9 e 6.10, que estes valores são geralmente maiores que os obtidos para este parâmetro com o modelo estocástico 1. Isso ocorre pela mesma razão descrita na seção 6.4.2.8.

6.5 COMPARAÇÃO ENTRE OS MODELOS DETERMINÍSTICOS E OS ESTOCÁSTICOS

6.5.1 Geral

A comparação entre modelos determinísticos e estocásticos é uma tarefa árdua, tendo em vista que estes modelos possuem concepções bem diferentes.

Nos modelos determinísticos, os parâmetros que entram na concepção do modelo são variáveis determinísticas, que possuem valores bem definidos no tempo e no espaço.

Já na modelagem estocástica, pelo menos um parâmetro que entra na concepção do modelo é uma variável aleatória, cujos valores não estão bem definidos no tempo e no espaço. O melhor que se pode dizer é que esse parâmetro é uma função que associa elementos de um espaço amostral a um número real, segundo uma distribuição de probabilidade.

Desta maneira, surge o dilema de como esses modelos com natureza tão diferentes podem ser comparados.

Em princípio, dependendo dos valores dos números n_i escolhidos aleatoriamente de uma distribuição normal padrão, $N(0,1)$, os valores obtidos com o modelo estocástico, para os parâmetros H , C_R , \dot{A} , C_D e C_A do repositório, podem ser completamente diferentes dos obtidos com o modelo determinístico.

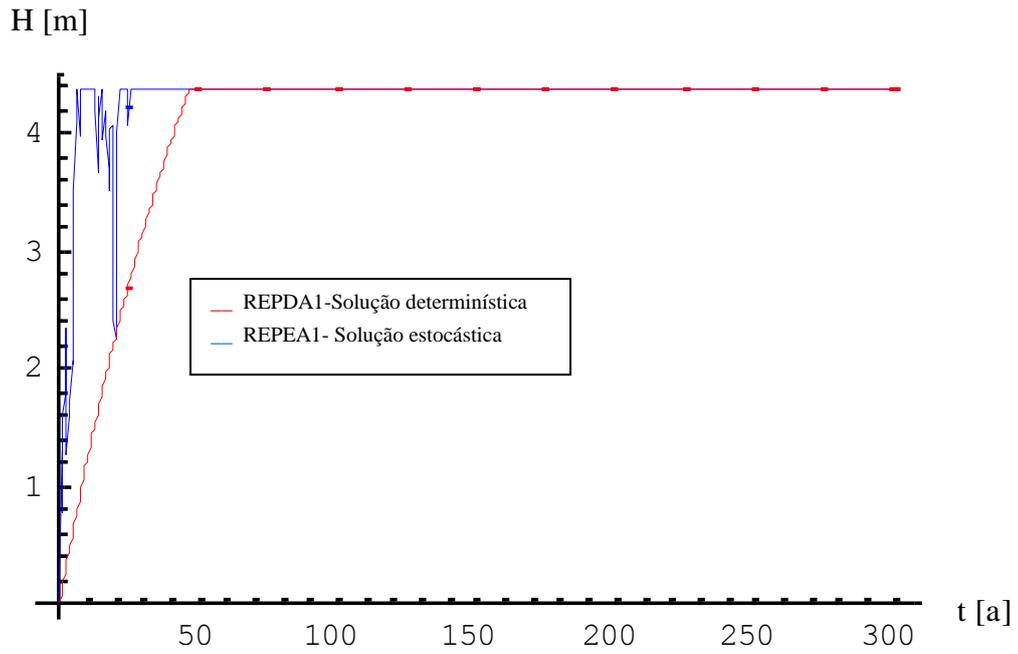
Assim, uma forma para se comparar o modelo determinístico com o estocástico é fazer uma escolha não-aleatória (escolha direcionada) dos números n_i , de tal maneira que a chuva tenha um comportamento similar nos dois modelos. Pode-se, por exemplo, escolher um tipo de chuva que faça com que a altura de coluna de líquido no interior do repositório, H , no modelo estocástico seja crescente em média em um determinado intervalo de tempo, já que H tem este comportamento no modelo determinístico (vide Fig. 6.1). Observa-se, que a escolha aleatória dos números n_i , pode gerar valores de H com comportamento contrário ao mencionado anteriormente, dificultando a comparação entre os modelos.

Os números n_i mostrados na Fig. 6.11 possuem esta característica, uma vez que as alturas de coluna de líquido no interior do repositório, H , geradas por eles são crescentes em média no intervalo de 0 a 80 anos, conforme mostrado na Fig. 6.17.

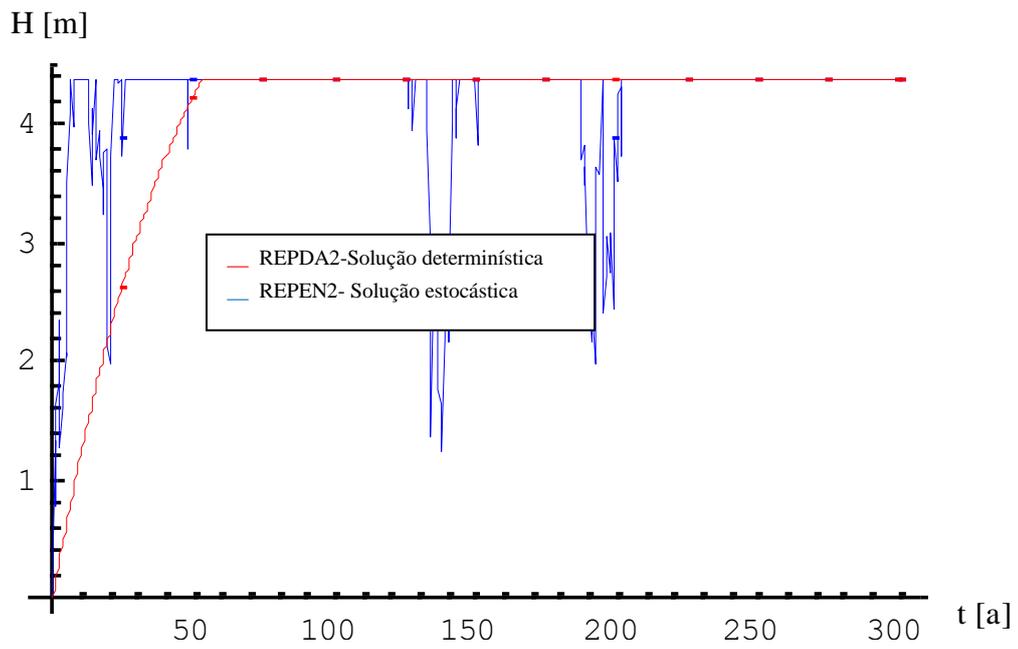
Utilizando-se os valores dos números n_i da Fig. 6.11, obtêm-se os valores da altura de coluna de líquido no interior do repositório, H , a concentração em atividade em seu interior, C_R , a taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente, \dot{A} , a concentração em atividade no ponto de descarga em atividade no aquífero, C_D , e a concentração em atividade ao longo do mesmo, C_A , apresentados nas Figs. 6.23, 6.24, 6.25, 6.26 e 6.27.

6.5.2 Altura de coluna de líquido no interior do repositório

Na Fig. 6.23, os valores de H são limitados no intervalo $0 \leq H \leq H_f$ por filtros utilizados nos programas REPDA1, REPEA1, REPDA2 e REPEN2 (vide Fig. 2.3).



(a) Modelos determinístico e estocástico 1



(b) Modelos determinístico e estocástico 2

Figura 6.23 – Altura de coluna de líquido no interior do repositório

Observa-se com o auxílio da Fig. 6.23, que H é uma função crescente na modelagem determinística e uma função oscilatória na modelagem estocástica, ou seja, uma função que é crescente em média em um intervalo de tempo e decrescente em média no intervalo subsequente.

Uma ilustração para este fato é encontrada na Fig. 6.17, onde as funções estocásticas que representam H nos modelos estocásticos 1 (curva vermelha) e 2 (curva azul) são crescentes em média no intervalo de 0 a 90 anos e decrescentes em média no intervalo e 90 a 140 anos.

Enquanto na modelagem determinística H atinge o seu valor máximo igual a 4,38 m apenas uma vez, na modelagem estocástica este valor máximo é atingido várias vezes no intervalo de 0 a 40 anos, no modelo estocástico 1, e no intervalo de 0 a 200 anos, no modelo estocástico 2.

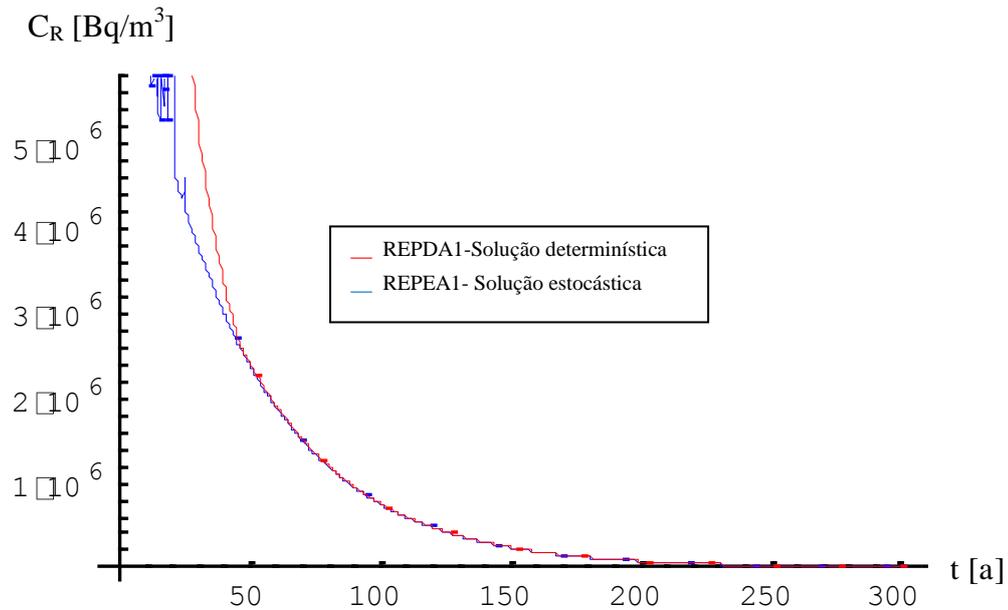
Assim, observa-se que na modelagem estocástica existe a possibilidade de ocorrerem vários transbordamentos do repositório, mesmo quando o fator de degradação de seu teto, F_d , é constante. Isto não ocorre na modelagem determinística.

Levando-se em consideração que o vazamento máximo de material radioativo para o meio ambiente ocorre durante o transbordamento do repositório, observa-se que a modelagem estocástica produz um maior impacto radiológico em um indivíduo do público do que a modelagem determinística.

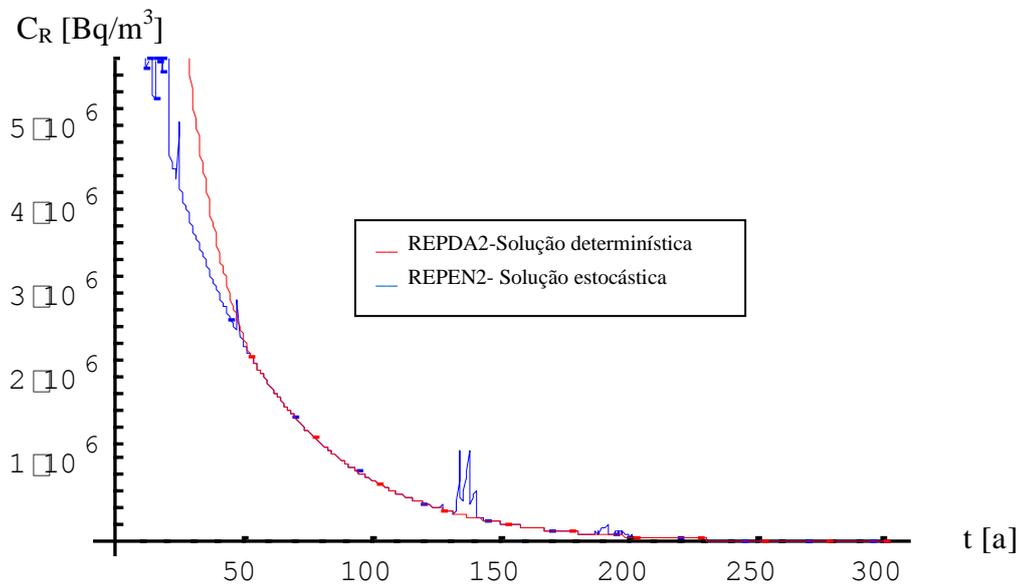
Outro fato muito importante que pode ser observado na Fig. 6.23 é a possibilidade de ocorrência de transbordamentos para instantes de tempo relativamente curtos (inferiores a 10 anos) na metodologia estocástica, quando o tempo de decaimento do radionuclídeo no interior do repositório é ainda muito pequeno. Este fato faz com que esta metodologia seja ainda mais impactante.

6.5.3 Concentração em atividade no interior do repositório

Na Fig. 6.24 são mostrados, em forma de gráficos, os valores da concentração em atividade no interior do repositório, C_R , obtidos com os programas REPDA1, REPEA1, REPDA2 e REPEN2.



(a) Modelos determinístico e estocástico 1



(b) Modelos determinístico e estocástico 2

Figura 6.24 – Concentração em atividade no interior do repositório

Observa-se, com o auxílio da Fig. 6.24, que na metodologia determinística, os valores de C_R são decrescentes com o tempo no intervalo de 0 a 300 anos. O mesmo acontece com a metodologia estocástica embora algumas oscilações ocorram neste intervalo.

Os valores da concentração em atividade no interior do repositório, C_R , na metodologia estocástica são inferiores aos valores deste parâmetro na metodologia determinística, antes do transbordamento do repositório determinado por esta metodologia.

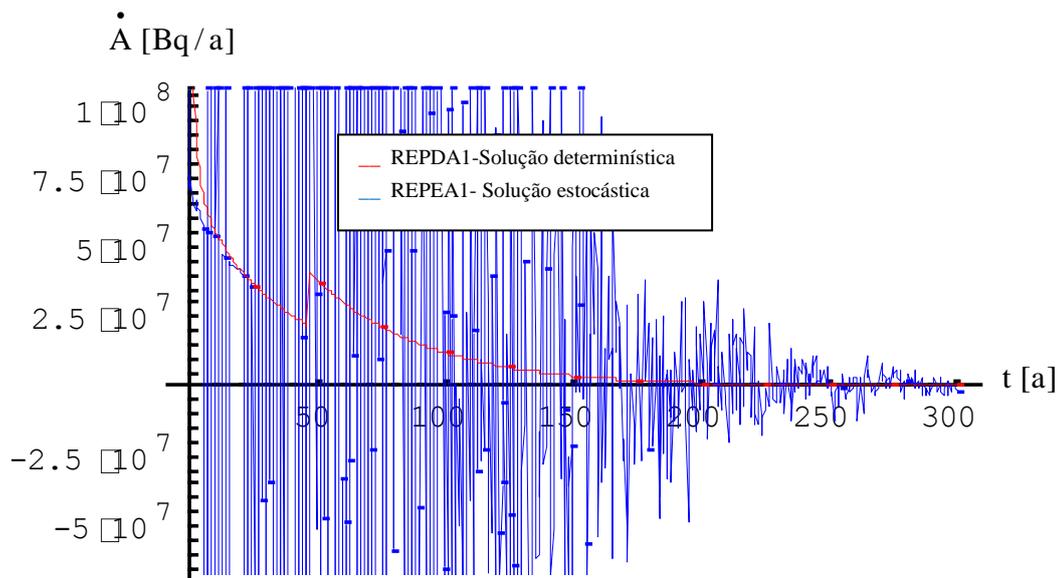
Isto ocorre porque o volume de líquido no interior do repositório, V_w , é menor na modelagem determinística em comparação com a estocástica (vide Fig. 6.23) e a atividade no interior do repositório é igual nos dois modelos (vide Apêndices D e E).

Quando ocorre o transbordamento do repositório na modelagem determinística, observa-se que os valores de C_R são iguais nos modelos determinístico e estocástico. Este resultado é atribuído ao fato de que, no transbordamento, tanto o volume de líquido, V_w , e a atividade, A_R , no interior do repositório, são iguais nos dois modelos.

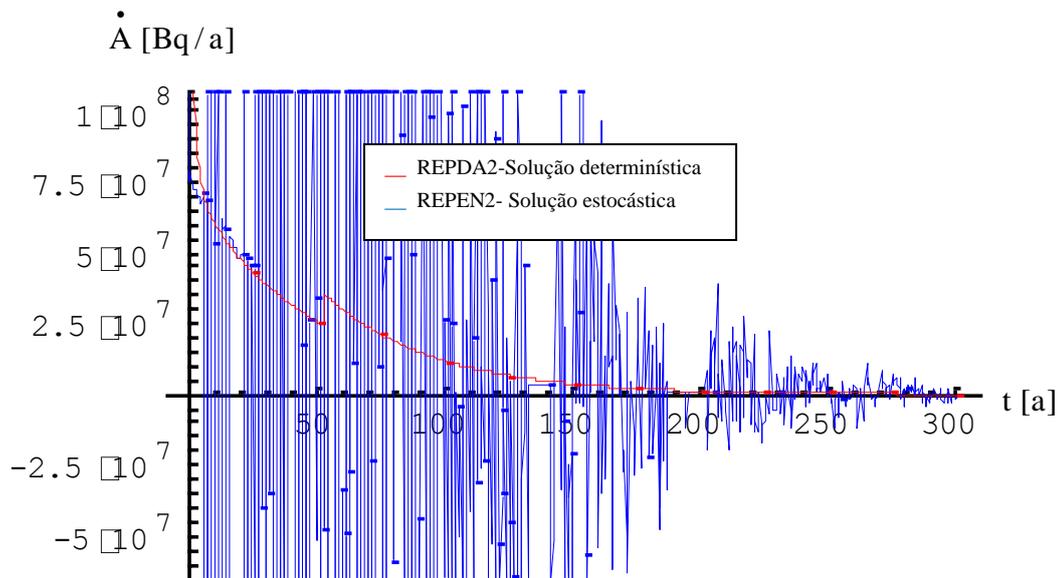
Na Fig. 6.24-(b), observa-se que o valor de C_R , na modelagem estocástica, aumenta significativamente no interior do repositório, no intervalo de tempo entre 130 anos e 140 anos e, posteriormente, ocorre um aumento de menor importância para este parâmetro no intervalo de 190 anos a 200 anos. Estes aumentos são atribuídos à redução do volume de líquido no interior do repositório, V_w , nestes intervalos de tempo, como pode ser constatado na Fig. 6.23-(b). O aumento de C_R é maior no primeiro intervalo devido a uma maior redução de volume de líquido e a um maior valor de atividade no interior do repositório (menor tempo de decaimento do radionuclídeo).

6.5.4 Taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente

Os valores da taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente, $\dot{A}(t)$, obtidos com os programas REPDA1, REPEA1, REPDA2 e REPEN2, são apresentados em forma de gráficos na Fig. 6.25.



(a) Modelos determinístico e estocástico 1



(b) Modelos determinístico e estocástico 2

Figura 6.25 – Taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente

Na seção 6.4.2.7 foi descrita a influência nos valores de \dot{A} quando não são utilizados filtros para eliminar os valores negativos de chuva. Esta estratégia é adequada para se observar o comportamento de \dot{A} .

Observa-se, com o auxílio da Fig. 6.25, que \dot{A} é uma função decrescente com o tempo nos modelos determinísticos 1 e 2, cujo primeiro ponto de máximo ocorre em $t = 0$ (vide Tabelas 6.3, 6.4, 6.5 e 6.6). Posteriormente, um segundo ponto de máximo para \dot{A} ocorre no transbordamento do repositório, ou seja, para instantes de tempo iguais a 47 anos e 53 anos nos modelos determinísticos 1 e 2, respectivamente.

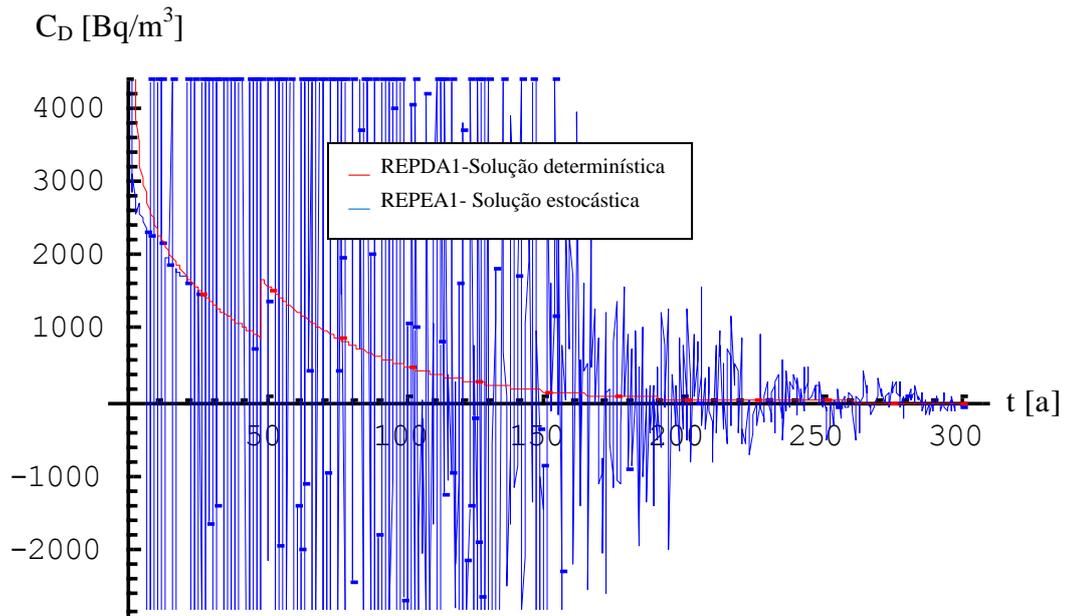
Na modelagem estocástica, \dot{A} é representada por uma função oscilante cujos máximos, dependendo do tipo da chuva, podem estar localizados em qualquer ponto no interior do intervalo de tempo $0 \leq t \leq 300$ anos.

Para a chuva gerada pelos números n_i da Fig. 6.11 e que dá origem aos valores de \dot{A} da Fig. 6.25, observa-se que os valores máximos encontrados para este parâmetro são iguais nos modelos estocásticos 1 e 2. Seu valor é igual a $1,2326 \times 10^{11}$ Bq/a e ocorre em $t = 0$.

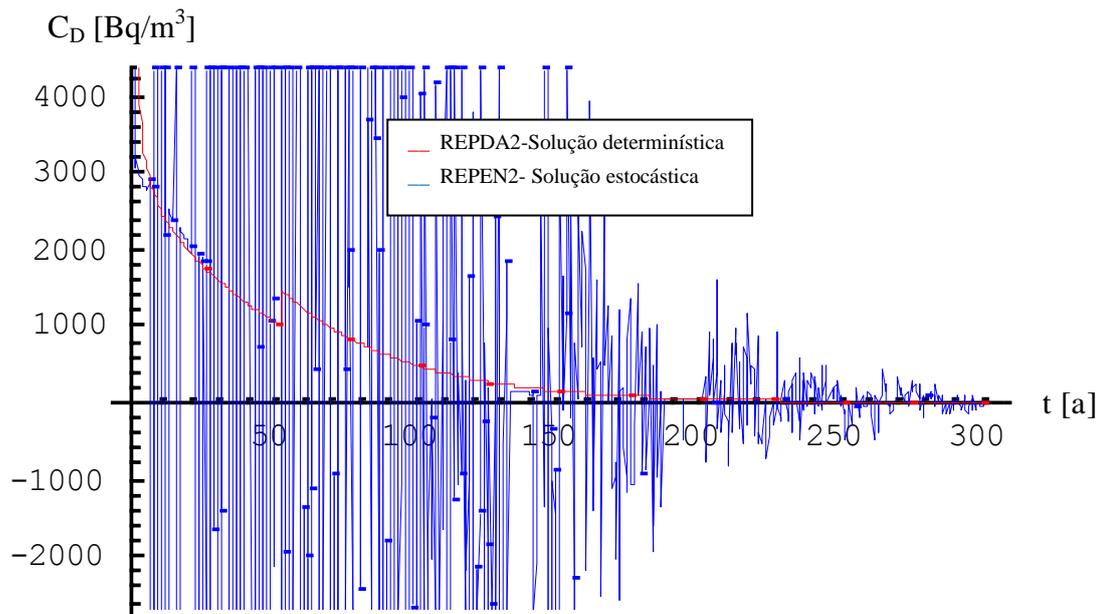
Os valores de \dot{A} tendem a 0 quando o tempo tende a infinito, tanto na metodologia estocástica como na determinística. Isto ocorre devido à redução com o tempo da concentração em atividade no interior do repositório.

6.5.5 Concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero

Utilizando-se os programas de computador REPDA1, REPEA1, REPDA2 e REPEN2, obtêm-se os valores da concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero, C_D , apresentados em forma de gráficos na Fig. 6.26.



(a) Modelos determinístico e estocástico 1



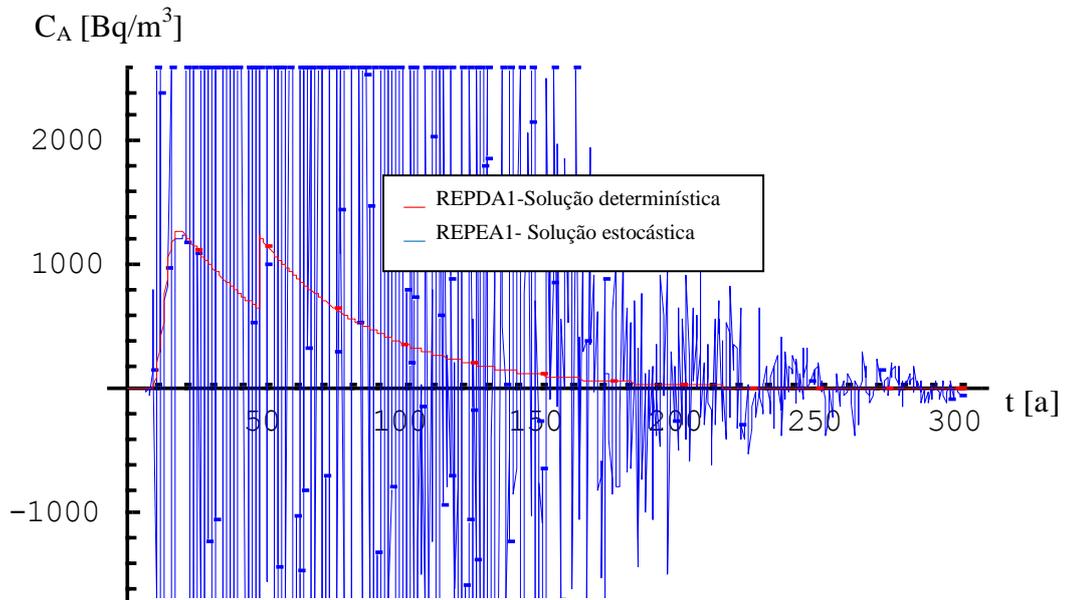
(b) Modelos determinístico e estocástico 2

Figura 6.26 – Concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero

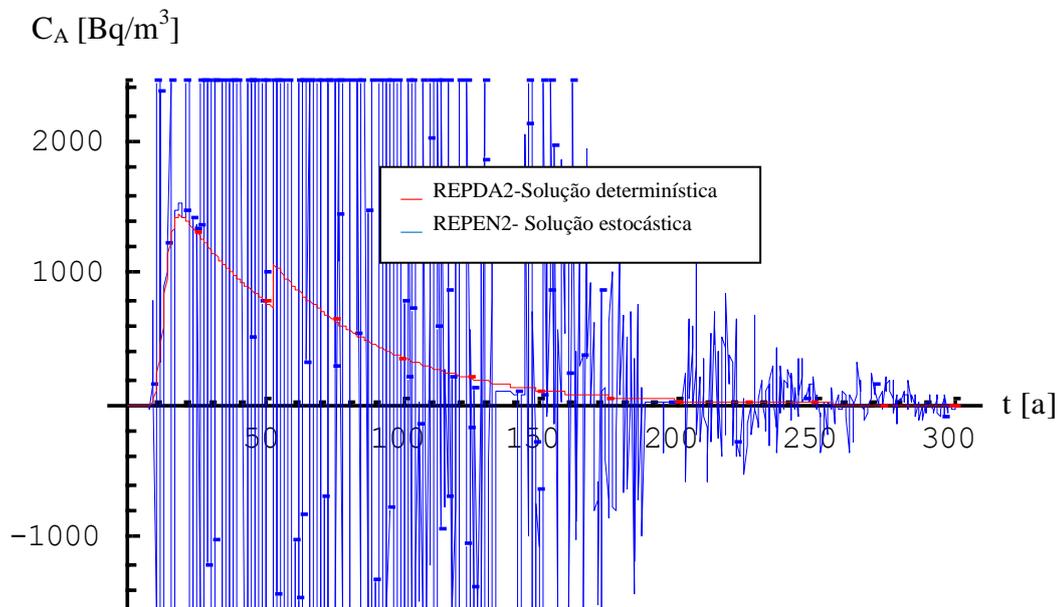
O comportamento de C_D é similar ao de \dot{A} , já que ele é obtido dividindo-se este parâmetro pela vazão volumétrica média de água no aquífero, \dot{Q}_a , que é considerada constante.

6.5.6 Concentração em atividade ao longo do aquífero

Na Fig. 6.27 são mostrados, em forma de gráficos, os valores da concentração em atividade em um ponto do aquífero ($x = 0,5$ m), C_A , obtidos com os programas de computador REPDA1, REPEA1, REPDA2 e REPEN2.



(a) Modelos determinístico e estocástico 1



(b) Modelos determinístico e estocástico 2

Figura 6.27 – Concentração em atividade ao longo do aquífero

O comportamento da concentração em atividade ao longo do aquífero, C_A , na modelagem determinística foi exaustivamente analisado na seção 6.3.2.6.

Para a modelagem estocástica, observa-se com o auxílio da Fig. 6.27, que C_A é uma função oscilante que, dependendo do tipo de chuva considerada, pode atingir seus valores máximos em qualquer ponto no interior do intervalo de tempo $0 \leq t \leq 300$ anos.

De acordo com a Fig. 6.27, observa-se que tanto na modelagem determinística como na estocástica, C_A é uma função que tende a 0, à medida que o tempo tende a infinito. Esta característica pode ser atribuída à concentração em atividade no interior do repositório, C_R , que tem a propriedade de amortecer as flutuações de C_A ao longo do tempo.

6.6 DETERMINAÇÃO DA DISTÂNCIA CRÍTICA DO REPOSITÓRIO UTILIZANDO-SE OS MODELOS DETERMINÍSTICOS E ESTOCÁSTICOS

6.6.1 Geral

Conforme mencionado na seção 1.1, a distância crítica do repositório, x_{crit} , é definida como a distância compreendida entre o ponto de descarga em atividade no aquífero, e um poço cuja água possui uma concentração em atividade capaz de provocar um impacto radiológico, em indivíduos do público, igual ao limite da CNEN.

De acordo com a seção 1.3, o impacto radiológico em um indivíduo do público, devido ao repositório de Abadia de Goiás, foi limitado em termos de dose anual em 20 mSv (CNEN, 1991). Para este limite de dose anual e considerando-se os mesmos caminhos (*pathways*) de dose utilizados no RFAS do repositório de Abadia de Goiás (NUCLEN, 1996), obtém-se para a concentração em atividade crítica no aquífero, C_{crit} , um valor igual a $7,42 \times 10^3$ Bq/m³ (o limite atual de dose efetiva anual preconizado para repositórios de rejeitos radioativos é mostrado na seção 1.3).

Assim, observa-se que determinar a distância crítica do repositório significa determinar o valor de x no aquífero onde o valor máximo de C_A é igual a C_{crit} , ou seja, $C_{A_{max}} = C_{crit}$.

6.6.2 Modelos determinísticos

Utilizando-se o programa de computador REPDA2 (que é mais conservador que o programa REPDA1), obtêm-se os valores máximos de concentração em atividade no aquífero, $C_{A_{max}}$, mostrados na Tabela 6.11.

Tabela 6.11 – Concentração em atividade máxima no aquífero obtida com a modelagem determinística

Distância do poço ao repositório x [m]	Concentração em atividade máxima no ponto x $C_{A_{max}}$ [Bq/m ³]
0,00	$1,0043 \times 10^4$
1,00	$7,8064 \times 10^2$
2,00	$3,2686 \times 10^2$
3,00	$9,2110 \times 10^1$
4,00	$2,6171 \times 10^1$
5,00	7,4752
6,00	2,1427

6.6.3 Modelos estocásticos

A distância crítica do repositório, x_{crit} , é determinada na modelagem estocástica com a utilização do programa de computador REPEN2, que é mais conservador que o REPEN1.

O programa REPEN2 é executado 20 vezes (para a seleção aleatória de 20 tipos diferentes de chuvas) para cada valor de x apresentado na Tabela 6.12, e o maior valor de concentração encontrado, $C_{A_{max}}$, é mostrado nesta tabela. O número 20 é arbitrário,

pois o programa poderia ser executado 50 vezes, 10^3 vezes, 10^6 vezes para cada valor de x . Obviamente que, quanto maior for o número de execuções do programa REPEN2, maior será a probabilidade de se encontrar valores maiores para C_A . Entretanto, esta estratégia não pode ser utilizada indefinidamente e um número de execuções para o programa tem que ser fixado.

Tabela 6.12 – Concentração em atividade máxima ao longo do aquífero obtida com a modelagem estocástica

Distância do poço ao repositório x [m]	Concentração em atividade máxima no ponto x $C_{A_{max}}$ [Bq/m ³]
0,00	$4,9676 \times 10^6$
1,00	$1,2059 \times 10^6$
2,00	$3,3422 \times 10^5$
3,00	$9,4186 \times 10^4$
4,00	$2,6761 \times 10^4$
5,00	$7,6440 \times 10^3$
6,00	$2,1912 \times 10^3$

O número de 20 execuções do programa REPEN2 para cada x é baseado no fato de que estas execuções não são demasiadamente demoradas, e que é mais importante para esta tese o desenvolvimento de uma metodologia estocástica do que propriamente a obtenção de valores definitivos para $C_{A_{max}}$.

Por outro lado, observa-se que, para o repositório de Abadia de Goiás, o principal mecanismo de redução da atividade no interior do repositório é o decaimento radioativo. Assim, fica evidente que os maiores valores de concentração em atividade ao longo do aquífero, C_A , ocorrerão para o caso de chuvas que provoquem o transbordamento precoce do repositório. Dentre os 20 tipos de chuvas escolhidas aleatoriamente para cada valor de x , verificou-se que isso ocorreu pelo menos uma vez. Assim, pode-se afirmar que os valores máximos de $C_{A_{max}}$ apresentados na Tabela 6.12 não devem aumentar significativamente, com o aumento do número de execuções do programa REPEN2.

6.6.4 Comparação entre os modelos determinísticos e estocásticos

Os valores das Tabelas 6.11 e 6.12, juntamente com o valor da concentração em atividade crítica no aquífero, $C_{crit} = 7,42 \times 10^3 \text{ Bq/m}^3$, são mostrados em forma de gráfico monolog na Fig. 6.28.

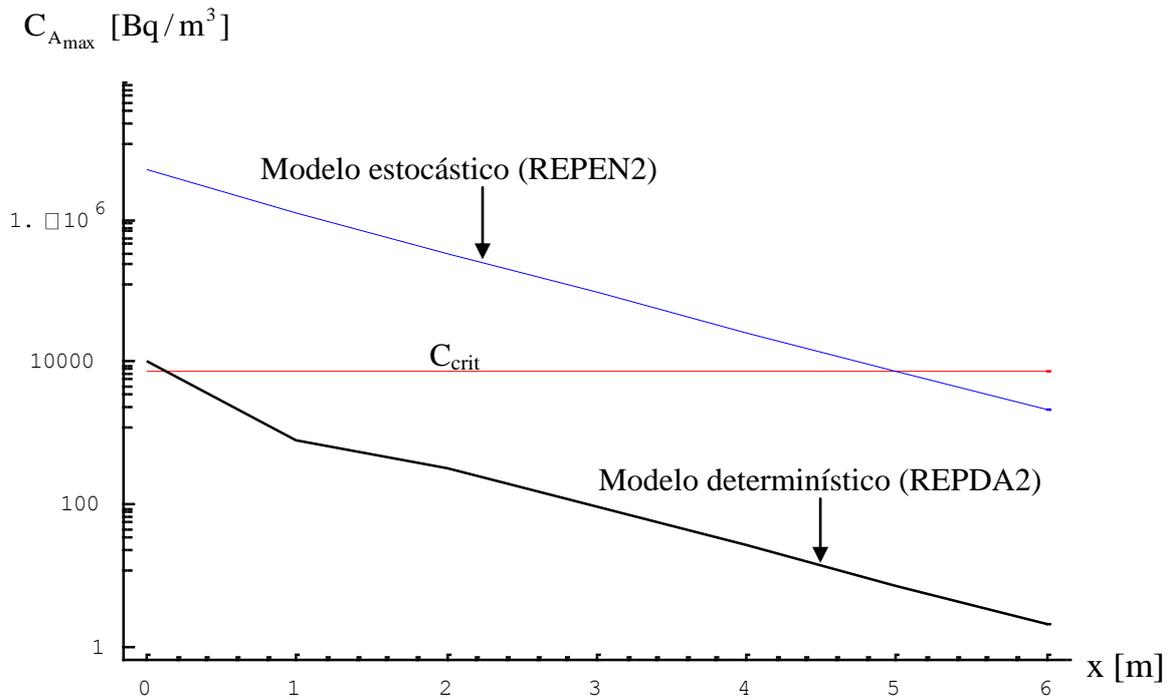


Figura 6.28 – Concentração em atividade máxima ao longo do aquífero

Observa-se com o auxílio da Fig. 6.28 que os valores de C_{Amax} , obtidos com a modelagem determinística (curva preta), são maiores que o valor de C_{crit} (curva vermelha) no intervalo $0 \text{ m} \leq x < 0,1 \text{ m}$. Assim, a distância crítica do repositório de Abadia de Goiás na modelagem determinística é igual a 0,1 m.

Para a modelagem estocástica, observam-se que os valores de C_{Amax} , representados pela curva azul, só são menores que o valor de C_{crit} quando $x \geq 5,1 \text{ m}$. Desta forma, a distância crítica do repositório nesta modelagem é igual a 5,1 m.

Assim, observa-se que para o repositório de Abadia de Goiás, a substituição da metodologia determinística pela estocástica provoca um grande impacto no valor da

distância crítica do repositório. O valor obtido, para este parâmetro, na metodologia estocástica é 51 vezes maior que o obtido na metodologia determinística.

Embora, a mudança de metodologia cause um grande impacto no valor de x_{crit} , este impacto é insignificante para o repositório de Abadia de Goiás, pois a menor distância entre este repositório e a cerca do seu sítio é igual a 100 m.

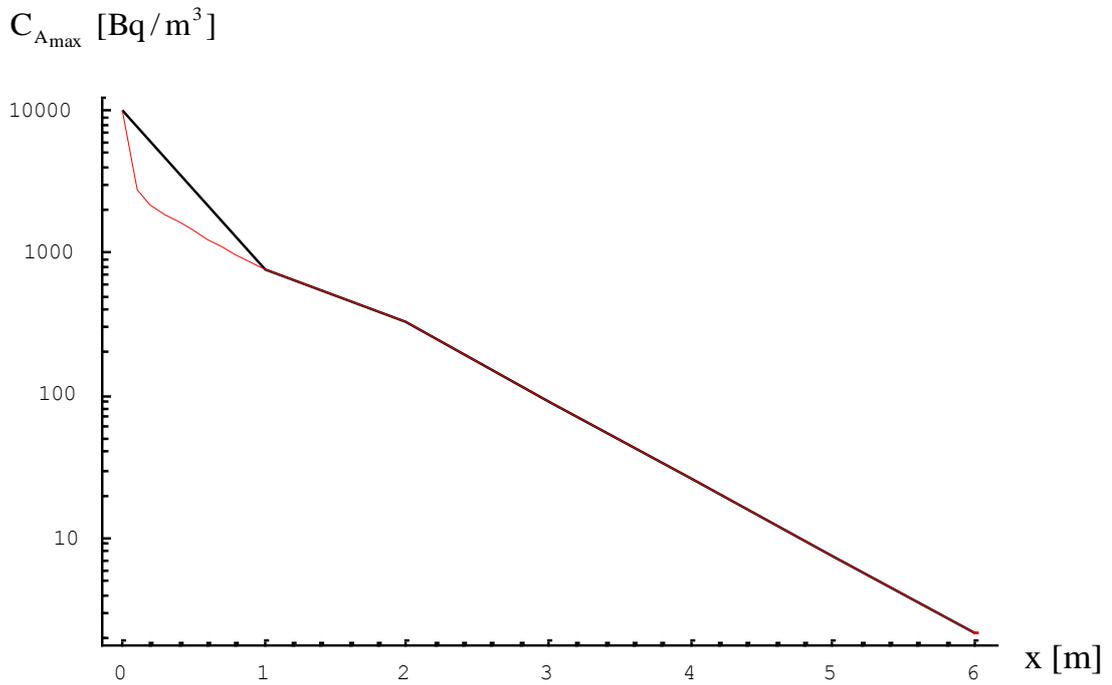
O gráfico da Fig. 6.28 é um gráfico monolog, com abscissa linear e ordenada logarítmica. Observa-se, com o auxílio desta figura, que a curva do modelo determinístico (curva preta) é praticamente uma reta no intervalo $2\text{ m} \leq x < 6\text{ m}$, o que levanta um questionamento sobre o valor desta curva em $x = 1\text{ m}$, ou seja, se este não deveria ser maior para que o formato de reta fosse mantido em todo o intervalo $0\text{ m} \leq x < 6\text{ m}$, como ocorre com a curva do modelo estocástico (curva azul).

Para responder a essa questão, os programas REPDA2 e REPEN2 foram executados uma única vez, para cada valor de x no intervalo $0\text{ m} \leq x \leq 1\text{ m}$, com incrementos Δx iguais a 0,10 m, e os resultados são apresentados na Tabela 6.13.

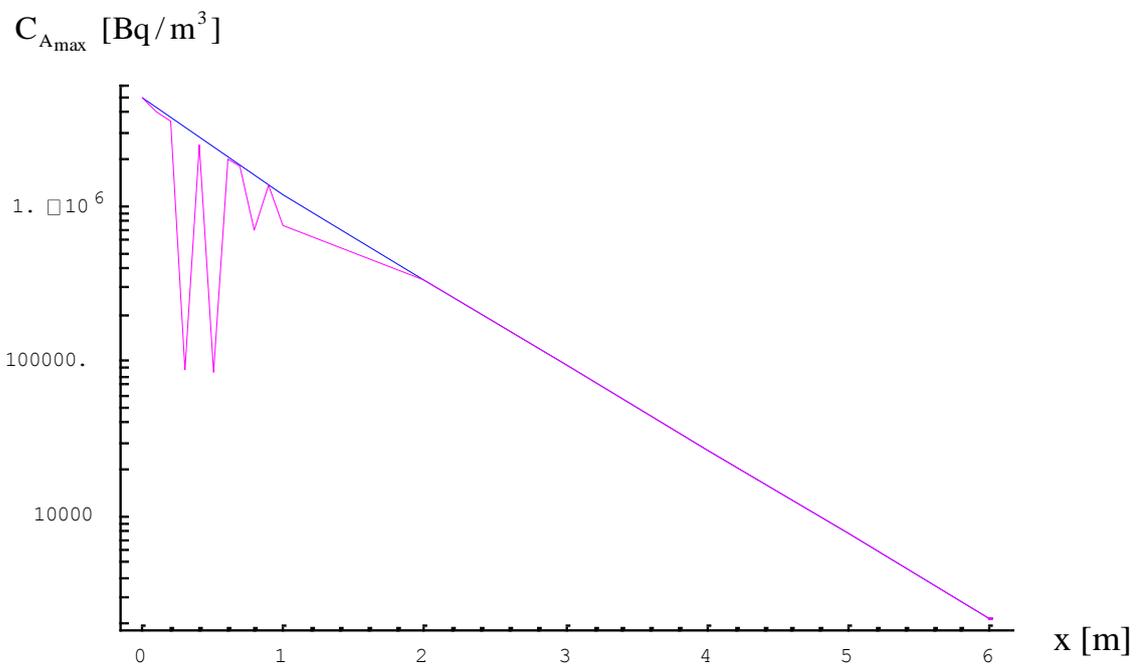
Tabela 6.13 – Concentração em atividade máxima ao longo do aquífero obtida no intervalo $I_x [0, 1]$

Distância entre o poço ao repositório x [m]	Concentração em atividade máxima no ponto x C_{Amax} [Bq/m ³]	
	Modelo determinístico (REPDA2)	Modelo estocástico (REPEN2)
0,00	$1,0043 \times 10^4$	$4,9676 \times 10^6$
0,10	$2,7412 \times 10^3$	$4,0545 \times 10^6$
0,20	$2,2019 \times 10^3$	$3,5056 \times 10^6$
0,30	$1,8829 \times 10^3$	$8,8437 \times 10^4$
0,40	$1,6395 \times 10^3$	$2,5269 \times 10^6$
0,50	$1,4382 \times 10^3$	$8,5533 \times 10^4$
0,60	$1,2666 \times 10^3$	$2,0364 \times 10^6$
0,70	$1,1179 \times 10^3$	$1,7843 \times 10^6$
0,80	$9,8800 \times 10^2$	$7,0019 \times 10^5$
0,90	$8,7376 \times 10^2$	$1,3733 \times 10^6$
1,00	$7,8064 \times 10^2$	$7,4477 \times 10^6$

Com os valores apresentados nas Tabelas 6.11, 6.12 e 6.13 foram traçados os gráficos da Fig. 6.29.



(a) Modelo determinístico (REPDA2)



(b) Modelo estocástico (REPEN2)

Figura 6.29 – Concentração em atividade máxima ao longo do aquífero

Com o auxílio da Fig. 6.29-(a), observa-se que o refinamento na determinação dos valores de $C_{A_{\max}}$, na modelagem determinística e no intervalo $0 \text{ m} \leq x < 1 \text{ m}$, indicou que a solução determinística não pode ser representada por uma reta no intervalo $0 \text{ m} \leq x < 6 \text{ m}$, pois existe uma depressão no valor de $C_{A_{\max}}$, em $x = 1 \text{ m}$.

Este comportamento pode ser melhor explicado trabalhando-se com a Eq. (5.68).

Sejam as funções f_1 e f_2 definidas pelas seguintes equações, respectivamente:

$$f_1 = (0.5) \cdot \text{Exp}\left[\left(\frac{v_{rx}}{2 \cdot D_{rx}}\right) \cdot x\right] \cdot \text{Exp}[-B^* \cdot x] \cdot \text{erfc}\left[\frac{x - A^* \cdot t}{2 \cdot \sqrt{D_{rx} \cdot t}}\right] \quad (6.1)$$

$$f_2 = (0.5) \cdot \text{Exp}\left[\left(\frac{v_{rx}}{2 \cdot D_{rx}}\right) \cdot x\right] \cdot \text{Exp}[B^* \cdot x] \cdot \text{erfc}\left[\frac{x + A^* \cdot t}{2 \cdot \sqrt{D_{rx} \cdot t}}\right] \quad (6.2)$$

Substituindo-se as Eqs. (6.1) e (6.2) na equação (5.68), obtém-se a seguinte expressão:

$$C_A = C_D \cdot f_1 + C_D \cdot f_2 \quad (6.3)$$

Após a inserção das Eqs. (6.1), (6.2) e (6.3) no programa REPDA2, obtêm-se com este programa os valores dos parâmetros apresentados na Tabela 6.14.

Na primeira coluna da Tabela 6.14, da esquerda para a direita, são apresentados os valores da distância entre o repositório e o poço, x .

Os valores da concentração no ponto de descarga no aquífero, C_D , determinados com o auxílio das Eqs. (5.55) e (5.56), são apresentados na segunda coluna da Tabela 6.14.

Já os valores das funções f_1 e f_2 , apresentados respectivamente nas terceira e quarta colunas da Tabela 6.14, são obtidos com a utilização das Eqs. (6.1) e (6.2), respectivamente.

Tabela 6.14 – Parâmetros importantes para a análise de $C_{A_{\max}}$ no modelo determinístico

x [m]	C_D [Bq/m ³]	f_1	f_2	$C_{A_{\max}}$ [Bq/m ³]	t [a]
0	$1,0043 \times 10^4$	$8,3925 \times 10^{-1}$	$1,6076 \times 10^{-1}$	$1,0043 \times 10^4$	0
1	$1,4446 \times 10^3$	$5,4039 \times 10^{-1}$	$3,0579 \times 10^{-8}$	$7,8065 \times 10^2$	53,5
2	$1,2008 \times 10^3$	$2,7019 \times 10^{-1}$	$2,0110 \times 10^{-3}$	$3,2686 \times 10^2$	61,5
3	$6,3615 \times 10^2$	$1,4378 \times 10^{-1}$	$1,0128 \times 10^{-3}$	$9,2110 \times 10^1$	89
4	$3,3701 \times 10^2$	$7,7156 \times 10^{-2}$	$4,9925 \times 10^{-4}$	$2,6171 \times 10^1$	116,5
5	$1,8061 \times 10^2$	$4,1125 \times 10^{-2}$	$2,6388 \times 10^{-4}$	7,4753	143,5
6	$9,7917 \times 10^1$	$2,1737 \times 10^{-2}$	$1,4658 \times 10^{-4}$	2,1428	170

Na quinta coluna da Tabela 6.14 são apresentados os valores máximos da concentração em atividade ao longo do aquífero, $C_{A_{\max}}$, obtidos com a utilização da Eq. (6.3).

Finalmente, são apresentados na última coluna do lado direito da Tabela 6.14, os instantes de tempo, t , em que a concentração em atividade ao longo do aquífero é máxima, para cada valor de x .

Com base nos valores de C_D , f_1 e f_2 apresentados na Tabela 6.14, observa-se que os dois primeiros parâmetros têm maior influência no comportamento de C_A do que o parâmetro f_2 .

Observa-se, com o auxílio da Tabela 6.14, que no intervalo de tempo compreendido entre 0 e 1 ano, ocorrem reduções nos valores de C_D e f_1 iguais a 86% e 35,6%, respectivamente, provocando uma redução no valor de $C_{A_{\max}}$ igual a 152%.

Já no intervalo de tempo compreendido entre 1 ano e 2 anos, a redução nos valores de C_D e f_1 são iguais a respectivamente 16,9% e 50%, reduzindo o valor de $C_{A_{\max}}$ em 75,4%.

Para o intervalo de tempo entre 2 anos e 3 anos, os valores de C_D e f_1 sofreram reduções iguais a 47% e 46,8%, respectivamente, reduzindo o valor de $C_{A_{\max}}$ em aproximadamente 116%.

Quando estes cálculos são realizados para todos os valores de x da Tabela 6.14, observa-se que a maior redução no valor de $C_{A_{\max}}$ ocorre justamente no intervalo $0 \leq x \leq 1$. Assim, pode-se afirmar com segurança que existe realmente uma depressão em $x = 1$ m, na curva de $C_{A_{\max}}$ obtida com o modelo determinístico e apresentada na Fig. 6.28, e que esta depressão pode ser atribuída principalmente à grande redução no valor de C_D nesse intervalo.

É importante observar que os valores do instante de tempo em que C_A é máximo, t , (última coluna do lado direito da Tabela 6.14) aumentam à medida que são incrementados os valores de x .

Relembrando que $\operatorname{erfc}(-x) = 1 - \operatorname{erf}(-x)$, $\operatorname{erf}(-x) = -\operatorname{erf}(x)$ e $\operatorname{erf}(\infty) = 1$, observa-se que a função $\operatorname{erfc}(x)$ aumenta à medida que x se torna cada vez mais negativo e atinge o seu máximo igual a 2, no limite quando $x \rightarrow -\infty$.

Na Eq. (6.3), observa-se que o valor de C_A aumenta com o aumento de f_1 e que este parâmetro também aumenta quando o valor da função $\operatorname{erfc}\left(\frac{x - A^*.t}{2\sqrt{D_{rx}.t}}\right)$ é incrementado

[vide Eq. (6.1)]. Como o valor desta função aumenta à medida que seu argumento

$\frac{x - A^*.t}{2\sqrt{D_{rx}.t}}$ se torna cada vez mais negativo, é evidente que todo aumento de x deve ser

acompanhado de um aumento em t para que esta característica seja mantida.

Com relação à modelagem estocástica, observa-se que a forma aproximadamente retilínea mostrada na Fig. 6.28 para $C_{A_{\max}}$ é confirmada na Fig. 6.29-(b), obtida com a utilização dos valores da Tabela 6.13. As retas apresentadas nestas figuras representam os limites superiores dos valores de C_A , para cada instante de tempo t , na modelagem estocástica.

7. CONCLUSÕES E SUGESTÕES

O objetivo desta tese foi o desenvolvimento da análise de segurança determinística e estocástica, para um repositório próximo à superfície com cripta de concreto, destinado à deposição de rejeitos radioativos de baixo e médio níveis de radiação.

As análises foram realizadas para um cenário de infiltração de água no interior do repositório, considerando-se como parâmetro de referência a concentração crítica em atividade no aquífero, C_{crit} .

Para este cenário de acidente, foi determinada a distância crítica do repositório, x_{crit} , utilizando-se os modelos matemáticos determinísticos e estocásticos, desenvolvidos neste trabalho.

A distância crítica do repositório, x_{crit} , é definida nesta tese como a distância entre o ponto de descarga em atividade no aquífero e um poço capaz de provocar uma dose, em um indivíduo do público, igual ao limite de dose estipulado pela CNEN.

Os modelos matemáticos são desenvolvidos com base na equação de Richards para o fluxo de líquidos em meios porosos e na equação de transporte de soluto neste meio.

Para a realização deste trabalho foram desenvolvidos os modelos matemáticos e os programas de computador, mencionados na Fig. 2.3.

Nos modelos determinísticos 1 (com vazamento do tipo 1) e 2 (com vazamento do tipo 2), apresentados nos Apêndices A e B, as equações foram resolvidas analiticamente com a utilização do cálculo convencional (não-estocástico), e numericamente pelo método de Runge-Kutta de 4ª ordem.

No modelo estocástico 1 (com vazamento do tipo 1), apresentado no Apêndice D, as equações estocásticas foram resolvidas analiticamente com base no cálculo estocástico de Ito e numericamente pelo método de Euler-Maruyama. Já no modelo estocástico 2

(com vazamento do tipo 2), apresentado no Apêndice E, as equações estocásticas foram resolvidas apenas pela via numérica, utilizando-se o método de Euler-Maruyama

É avaliado o impacto no valor da distância crítica do repositório de Abadia de Goiás, considerado como um caso de estudo, quando a metodologia determinística é substituída pela estocástica, considerada mais adequada para modelar adequadamente a chuva como um processo estocástico.

O impacto verificado na distância crítica desse repositório, quando a metodologia determinística é substituída pela estocástica, é o aumento no valor de x_{crit} de 0,1 m para 5,1 m. Embora a mudança de metodologia cause um grande impacto no valor de x_{crit} , este impacto é insignificante para o repositório de Abadia de Goiás, pois a menor distância entre este repositório e a cerca do seu sítio é igual a 100 m.

Este resultado indica que se deve tomar muito cuidado com a utilização de modelos determinísticos no estudo de processos estocásticos, pois os resultados obtidos podem não retratar a realidade do problema.

Os valores obtidos analiticamente (vide Apêndice A) e numericamente (pelo método de Runge-Kutta de 4ª ordem) com o modelo determinístico 1, para H , C_R , \dot{A} , C_D e C_A concordam entre si com um desvio relativo percentual máximo igual a 0,008%, evidenciando uma ótima concordância entre as soluções analítica e numérica.

Já para o modelo determinístico 2, os valores obtidos analiticamente (vide Apêndice B) e numericamente (pelo método de Runge-Kutta de 4ª ordem), para os parâmetros H , C_R , \dot{A} , C_D e C_A concordam entre si com um desvio relativo percentual máximo igual a 0,01%. Assim, uma ótima concordância entre as soluções analítica e numérica é também verificada neste caso.

Os valores obtidos analiticamente (vide Apêndice D) e numericamente (pelo método de Euler-Maruyama) com o modelo estocástico 1, para H , C_R , \dot{A} , C_D e C_A concordam entre si com um desvio relativo percentual máximo igual a 0,7258%. Estes resultados foram obtidos com incrementos de tempo, Δt , iguais a 0,5 a no método de Euler-

Maruyama. Uma melhor concordância entre as soluções analítica e numérica pode ser obtida reduzindo-se os valores de Δt (vide Apêndice F). Entretanto, julgou-se desnecessária a aplicação desta prática, uma vez que este erro não provoca nenhum impacto no valor da distância crítica do repositório, x_{crit} (vide seção 6.4.2.6).

Com relação aos valores obtidos numericamente (pelo método de Euler-Maruyama) com o modelo estocástico 2 (descrito no Apêndice E), para os parâmetros H , C_R , \dot{A} , C_D e C_A , observa-se que estes não puderam ser comparados com os valores obtidos de uma solução analítica, pois a mesma não foi disponibilizada nesta tese. A não inclusão de uma solução analítica para o modelo estocástico 2 tem como objetivo evitar um aumento desnecessário do escopo de trabalho desta tese, já que esta inclusão exigiria que a equação estocástica não-linear de Ito fosse resolvida analiticamente. Julgou-se desnecessária a realização desse trabalho adicional, uma vez que se pode observar, com o auxílio das Tabelas 6.8, 6.9 e 6.10, que o modelo estocástico 2 tem um comportamento e produz valores muito similares ao modelo estocástico 1, na determinação dos parâmetros mencionados anteriormente.

Observa-se que, os valores da atividade no interior do repositório de Abadia de Goiás, A_R , são praticamente iguais nos modelos determinísticos e estocásticos, evidenciando que este parâmetro é mais influenciado pelo decaimento radioativo do que pela fuga de material radioativo pelas fronteiras do repositório, e que o termo estocástico desempenha um papel secundário na equação de balanço de A_R (vide Apêndices D e E).

A presente pesquisa mostra que, a altura de coluna de líquido no interior do repositório, H , obedece a uma equação diferencial determinística ordinária de Riccati no modelo determinístico (vide Eq. 5.26) e a uma equação diferencial estocástica ordinária de Ito no modelo estocástico (vide Eq. 5.72), que são resolvidas nos Apêndices de A a E desta tese.

Verifica-se que, a altura de coluna de líquido no interior do repositório, H , é maior nos modelos determinísticos e estocásticos do tipo 1, do que nos modelos do tipo 2 (vide Fig. 6.23). Isso ocorre porque a fuga de material radioativo é menor nos modelos

do tipo 1. Assim, observa-se que os modelos que têm menores perdas de material radioativo para o meio ambiente produzem os maiores valores de H . Conseqüentemente, o tempo de transbordamento do repositório é menor nesses modelos.

Para as condições do repositório de Abadia de Goiás, observa-se que apenas ocorre um transbordamento do repositório no modelo determinístico, que é mantido ao longo do tempo. Nos modelos determinísticos 1 e 2, os tempos de transbordamentos são iguais a 47 anos e 53 anos, respectivamente. Já nos modelos estocásticos podem ocorrer vários transbordamentos do repositório, conforme mostrado na Fig. 6.23.

Conforme mencionado anteriormente, para o caso do repositório de Abadia de Goiás, o mecanismo mais importante para a redução de atividade no interior do repositório, A_R , é o decaimento radioativo (vide seção 6.3.2.3). Assim, os maiores impactos radiológicos em indivíduos do público ocorrem para transbordamentos precoces do repositório, onde uma grande quantidade de material radioativo pode ser lançada ao aquífero antes que os efeitos do decaimento radioativo possam ser observados.

Com base no item anterior, observa-se que a modelagem estocástica produz maiores valores de x_{crit} do que a modelagem determinística (vide Fig. 6.28).

No tocante à concentração em atividade no interior do repositório, C_R , observa-se que ela é maior nos modelos do tipo 2 do que nos do tipo 1. Isso ocorre porque o volume da fase líquida é menor nos modelos do tipo 2 (menor valor de H na Fig. 6.23) e a atividade no interior do repositório, A_R , é praticamente igual nos dois modelos (vide Fig. 6.4).

Verifica-se nesta pesquisa que, a taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente, \dot{A} , é maior nos modelos do tipo 2. Este resultado já era esperado pois tanto a concentração em atividade no interior do repositório, C_R , como a vazão volumétrica de mistura (água + radionuclídeos) que sai do interior do mesmo, $\sum_i \dot{Q}_i$, são maiores nos modelos do tipo 2 (vide Eq. 5.48).

A concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero, C_D , também é maior nos modelos do tipo 2, pois ela é obtida dividindo-se \dot{A} pela vazão volumétrica média da água no aquífero, \dot{Q}_a , que é considerada constante.

A concentração em atividade ao longo do aquífero, C_A , é maior nos modelos do tipo 2. Este resultado é atribuído ao fato de que nesses modelos, mais material radioativo é lançado ao aquífero, para um mesmo tempo de decaimento radioativo.

Como futuros trabalhos de pesquisa relacionados com esta tese recomendam-se:

- Resolver analiticamente a Eq. (5.72), que é uma equação não-linear de Ito e determinar as probabilidades dos processos estocásticos, envolvidos na análise de infiltração de água no interior de um repositório, utilizando-se a equação de Fokker-Plank. O comportamento da equação não-linear de Ito, utilizada na determinação da altura de coluna de líquido no interior do repositório, H , é mostrado na Fig. 6.17 (solução numérica obtida com o método de Euler-Maruyama). No caso da probabilidade não se pode fazer previsões sem antes resolver a referida equação de Fokker-Plank;
- Realizar estudos sobre modelos estocásticos de infiltração de água no interior de repositórios próximo à superfície, considerando-se a presença de outros radionuclídeos além do ^{137}Cs . Para este radionuclídeo, os valores do coeficiente de retardo, R_d , para as condições do sítio de Abadia de Goiás, e da constante de decaimento radioativo, λ , são iguais a $1,1710 \times 10^4$ e $2,31 \times 10^{-2} \text{ a}^{-1}$, respectivamente. Estes valores fizeram com que os termos estocásticos pudessem ser desprezados na equação de balanço de massa de radionuclídeo no interior do repositório [vide Eq.s (D.55) e (E.32)], simplificando o problema. Esta simplificação pode não ser válida para alguns radionuclídeos;
- Considerar a presença de ruídos estocásticos na equação de transporte de radionuclídeos no aquífero, obtendo-se uma equação diferencial estocástica, que pode ser resolvida por métodos numéricos estocásticos apropriados. Nesta linha de pesquisa, pode-se citar o trabalho de KULASIRI &

VERWOERD (1999) que trata do desenvolvimento de um modelo estocástico computacional para a dispersão de soluto em um meio poroso saturado. Neste trabalho, a velocidade do fluido no meio poroso é modelada como um processo estocástico, obtido pela soma de uma parte determinística, função do tempo e do espaço, com uma parte estocástica representada pelo ruído branco gaussiano. Com esta consideração, a equação diferencial parcial determinística original que governa o transporte de soluto no meio poroso é transformada em uma equação diferencial de Ito, que é resolvida por um método numérico proposto pelos próprios autores.

No tocante à trabalhos de pesquisa envolvendo a modelagem estocástica em geral, pode-se recomendar, além da aplicação em matemática financeira descrita na seção 4.8, a sua aplicação no estudo de fenômenos físicos, químicos, biológicos, etc, envolvendo sistemas microscópicos, onde a teoria determinística não produz bons resultados.

Uma das áreas mais importantes para a aplicação da modelagem estocástica é a microfluídica, que pode ser definida como a ciência e engenharia de sistemas com dimensões micrométricas, na qual o comportamento dos fluídos difere da teoria tradicional para domínios macroscópicos. A microfluídica pode ser explorada para uma variedade de aplicações científicas e tecnológicas e, por esse motivo, há a necessidade de uma maior discussão sobre os efeitos desse escalonamento (CNPEM, 2014). Ela é aplicada às áreas de síntese química, análise molecular, biodefesa, biologia molecular, ótica, tecnologia da informação, microeletrônicos, etc. Porém, encontra-se ainda em um estágio inicial de seu desenvolvimento. As primeiras aplicações desta tecnologia foram em análises, devido a uma série de vantagens, tais como: a utilização de quantidades muito pequenas de amostras e reagentes, a capacidade para realizar separações e detecções com alta resolução e sensibilidade com baixo custo envolvido (WHITESIDES, 2006).

O desenvolvimento de micro sensores de fluxo, microbombas e microválvulas no final dos anos 80 dominou os primeiros estágios da área de microfluídica. Durante este período, as principais plataformas exploradas para a fabricação de microsistemas eram baseadas em vidro, quartzo e silício. No entanto, desde a década de 1990 plataformas de menor custo e fácil acesso estão sendo cada vez mais empregadas em microfluídica,

incluindo polímeros elastoméricos e materiais descartáveis como papel e filmes de transparência (CNPEM, 2014).

Atualmente, sistemas microfluídicos podem ser utilizados em diferentes áreas incluindo química, biologia, medicina, dentre outras. Alguns exemplos de aplicações destes dispositivos incluem determinação de pH, monitoramento de cinética de reações, interações biomoleculares, separações eletroforéticas, imunoenaios, citometria de fluxo, manipulação de células, além de análises proteômicas, metabolômicas, de DNA e várias outras aplicações (CNPEM, 2014).

O uso de tais dispositivos apresenta uma série de vantagens bastante atrativas do ponto de vista econômico e tecnológico. Primeiro, porque o volume de fluídos no interior destes sistemas é muito pequeno (nano litros a micro litros). Isto é especialmente significativo para reagentes caros, ou em situações onde a quantidade de amostra é reduzida. Além disso, várias técnicas de fabricação são relativamente baratas, permitindo a produção em larga escala, bem como a integração de múltiplas etapas químicas em um único dispositivo. Em consequência do tamanho reduzido dos dispositivos, é possível, por exemplo, realizar uma análise química em um intervalo de tempo da ordem de segundos (CNPEM, 2014).

A microfluídica começou a ser desenvolvida no Brasil no início dos anos 2000. Atualmente, já existem alguns grupos de pesquisa dedicados integralmente a esta linha de pesquisa. Neste contexto, foi realizado recentemente, nos dias 24 e 25 de julho de 2014, o IV Workshop em Microfluídica, no campus da Universidade de Campinas em São Paulo (CNPEM, 2014).

Como exemplo de pesquisa publicada nesta área de conhecimento humano, pode-se citar o trabalho de ANDERSON (2013), que trata da modelagem estocástica e simulação de processos microscópicos. O autor estuda os métodos matemáticos analíticos e numéricos que descrevem as interações e a evolução de sistemas físicos complexos modelados por processos microscópicos. São abordados dois tipos de sistemas que se diferenciam no tocante à modelagem utilizada no nível microscópico, ou seja, se são modelados por equações diferenciais estocásticas ou por processos estocásticos microscópicos elementares. As equações obtidas são resolvidas

analiticamente utilizando-se o cálculo estocástico ou numericamente por simulações de Monte Carlo.

Outro exemplo é a cinética de reações químicas que são modeladas utilizando-se equações diferenciais determinísticas. Nesta formulação, utiliza-se implicitamente a hipótese de que a concentração dos reagentes varia de forma contínua e diferenciável (SCOTT, 2013). Para moles de reagentes (i. e. número de moléculas da ordem de 10^{23}), estas hipóteses são perfeitamente justificadas, desde que a mudança em uma ou duas moléculas, em uma população de 10^{23} moléculas é, para qualquer objetivo ou propósito, infinitesimal (SCOTT, 2013). Isso explica o sucesso na aplicação de modelos determinísticos para a maioria dos sistemas macroscópicos. Entretanto, para pequenas quantidades de reagente, a formulação matemática tem que ser mais acurada. Dentro de células vivas, por exemplo, a quantidade de reagentes tende a ser muito pequena, e uma reação que altere a população por uma ou duas moléculas gera uma grande mudança relativa, invalidando a hipótese de diferenciabilidade da concentração dos reagentes (SCOTT, 2013). Além disso, as reações não ocorrem continuamente em um pequeno intervalo de tempo infinitesimal, mas sim em saltos para intervalos de tempo finito. Desta forma, fica evidente a necessidade de aplicação da metodologia estocástica no estudo de fenômenos envolvendo sistemas microscópicos.

REFERÊNCIAS

ABUKHALED, M. I., *Runge-Kutta and Distribution Numerical Methods for Approximate Solution of Stochastic Differential Equations*”, Ph.D. dissertation, Department of Mathematics and Statistics, Texas Tech University, Lubbock, USA, 1995.

AGUIAR, L. A., *Avaliação de Risco de um Repositório Próximo à Superfície na fase Pós-Fechamento em Cenário de Liberação de Radionuclídeos por Infiltração de Água*, Tese de D.Sc., PEN/COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2006.

AGUIAR, L. A., FRUTUOSO E MELO, P. F. and ALVIM, A. C. M., “*Estimation of Mean Time to Failure of a near Surface Radioactive Waste Repository for PWR Power Stations*”, *International Nuclear Atlantic Conference – INAC*, Santos, Brazil, 2007.

AHLFORS, L.V., *Complex Analysis, An Introduction to the Theory of Analytic Functions of one Complex Variable*, Second Edition, International Student Edition, Japan, McGRAW HILL KOGAKUSHA LTDA, 1966.

ALLEN, E., *Derivation of Stochastic Ordinary and Partial Differential Equations, NIMBioS Tutorial – Stochastic Models with Biological Applications*, University of Tennessee, Knoxville, USA, 2011.

ALVES, A.S. & PASSOS, E.M., *Determinação do fluxo de mistura (água + Cs-137) através das paredes laterais do repositório devido à porosidade da mesma*, Relatório Nuclen nº TS3/BN/1170/940009, Rio de Janeiro, Brasil, 1994.

ALVES, A.S. & PASSOS, E.M., *Determinação da altura de coluna de líquido, da concentração de atividade de Cs-137 na fase líquida do repositório, da taxa de liberação de atividade e da concentração inicial deste radionuclídeo no lençol freático*, Relatório Nuclen nº TS3/BN/1170/950016, Rio de Janeiro, Brasil, 1995.

ALVES, A.S. & PASSOS, E.M., *Modelagem Matemática para a Migração de Radionuclídeos em Meios Porosos*, Relatório Eletronuclear nº GAS.T/3/BP1170/030012, Rio de Janeiro, Brasil, 2003.

ALVIM, A. C. M., *Métodos Numéricos em Engenharia Nuclear*, Curitiba, Brasil, Editora Certa, 2007.

AMINI, M.; SOHEILI, A. R. and ALLAHDADI, M., “*Numerical Solution of Stochastic Differential Equations Corresponding to Continuous Contribution*”, *Commun. Korean Math. Soc.*, v. 26, n. 4, pp. 709-720, 2011. Disponível em: <http://www.mathnet.or.kr/mathnet/thesis_file/CKMS-26-4-709-720.pdf>. Acesso em 20 Jun. 2013, 15:30:27.

ANDERSON, A., *Stochastic Modeling and Simulation of Microscopic Processes*, Centre for Mathematical Sciences, Numerical Analysis, Lund, Sweden, Lund University Publications, 2013.

ANEVSKI, D., *Riemann-Stieltjes Integral*, Mathematical Sciences, Lund University, Lund, Sweden, 2012.

ANSI/ANS-2.17 – *Evaluation of Radionuclide Transport in Ground Water for Nuclear Power Sites*, American Nuclear Society - American National Standard Institute, Illinois, USA, 1980.

APPLEBY, J. & WU, H., *Solutions of Stochastic Differential Equations Obeying the Law of the Iterated Logarithm with Applications to Financial Markets*, School of Mathematical Sciences, Dublin City University, 2008. Disponível em: <<http://www.dcu.ie/math/research/preprints/ms0903.pdf>>. Acesso em 06 Jun. 2013, 11:05:42.

ARCHAMBEAU, C., *Stochastic Differential Equations*, University College, Centre for Computational Statistics and Machine Learning, London, UK. Disponível em: <http://www0.cs.ucl.ac.uk/staff/C.Archambeau/SDE_web/figs_files/ca07_SDE_talk.pdf>. Acesso em 02 Mar. 2014, 10:10:22.

ARNOLD, P., *Langevin Equations with Multiplicative Noise: Resolution of time discretization ambiguities for equilibrium systems*, Department of Physics, University of Virginia, Virginia, USA, 1999. Disponível em: <<http://arxiv.org/pdf/hep-ph/9912208.pdf>>. Acesso em 06 Out. 2014, 09:41:10.

BEAME, P. & MACHMOUCHI, W., *Monotone Functions, Monotone Circuits and Communication Complexity, Lecture 11*, 2008. Disponível em: <<http://courses.cs.washington.edu/courses/cse532/08sp/lect11.pdf>>. Acesso em 04 Out. 2014, 11:21:42.

BEAR, J., *Hydraulics of Groundwater*, The First Edition, New York, USA, McGraw-Hill, 1979.

BIRD, R. B.; STEWART, W. E and LIGHTFOOT, E. N., *Transport Phenomena*, The First Edition, Department of Chemical Engineering, University of Wisconsin, Wisconsin, USA, Copyright by John Wiley & Sons, Inc., 1960.

BLACK, F. & SCHOLES, M., “*The Pricing of Options and Corporate Liabilities*”, *The Journal of Political Economy*, v. 81, n. 3, pp. 637-654, May-Jun. 1973.

BRASIL, Lei Federal nº 10.308, de 20.11.2001, *Dispõe sobre a seleção de locais, a construção, o licenciamento, a operação, a fiscalização, os custos, a indenização, a responsabilidade civil e as garantias referentes aos depósitos de rejeitos radioativos, e dá outras providências*. Publicada no D.O.U. de 21.11.2001, seção I, 1ª página.

BRAUMANN, C. A., *Introduction to Stochastic Differential Equations*, Centro de Investigação em Matemática da Universidade de Évora – CIMA-EU, Stochastic Finance 2004 – Autumn School & International Conference, Évora, Portugal, 2004.

BRAUMANN, C. A., “*Introdução às Equações Diferenciais Estocásticas e Aplicações*”, *XIII Congresso Anual da Sociedade Portuguesa de Estatística Ericeira*, Edições SPE, Lisboa, Portugal, 2005.

BRAUN, M., *Equações Diferenciais e suas aplicações*, Rio de Janeiro, Brasil, EDITORA CAMPOS LTDA, 1979.

BUCKINGHAM, E., “*Studies on the movement of soil moisture*”, *Bull 38, USDA, Bureau of Soils*, Washington D. C., USA, 1907.

BURRAGE, K.; LENANE, I. and LYTHER, G., “*Numerical Methods for Second-Order Stochastic Differential Equations*”, *SIAM J.CI. COMPUT*, v. 29, n. 1, pp. 245-264, 2007.

BURRAGE, K.; BURRAGE, P. M. and TIAN, T., *Numerical Methods for Strong Solutions of Stochastic Differential Equations: an Overview*, Advanced Computational Modeling Centre, Department of Mathematics, University of Queensland, Australia.

Disponível em:
<<http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.205.6327&rep=rep1&type=pdf>>. Acesso em 10 Mar. 2014, 11:20:25.

BUTCHER, J. C., “*A History of Runge-Kutta Methods*”, Elsevier - Applied Numerical Mathematics, v. 20, pp. 247 – 260, 1996.

CAPUTO, J. G. & STEPANYANTS, Y. A., “*Front Solutions of Richard’s Equation*”, *Transp. Porous Med.*, v. 74, pp. 1-20, 2008.

CARVALHO, J. C.; CANEPPELE, N.; FIGUEIREDO, C. M., “*Um novo método para resolver a equação de Langevin aplicada à dispersão de poluentes atmosféricos em regime de turbulência gaussiana*”, ACTA SCIENTIAE, v. 5, n.1, pp. 55-63, 2003.

CHURCHIL, R. V., *Variáveis Complexas e suas aplicações*, Tradução de Tadao Yoshioka, , Rio de Janeiro, Brasil, EDITORA MCGRAW - HILL DO BRASIL LTDA, 1978.

CNEN, *Gerência de Rejeitos Radioativos em Instalações Radiativas*, CNEN-NE-6.05, Rio de Janeiro, Brasil, 1985.

CNEN, *Radioproteção e segurança para deposição final dos rejeitos radioativos armazenados em Abadia de Goiás*, Projeto de Instrução Técnica, CNEN-IT-01/91, Rio de Janeiro, Brasil, 1991.

CNEN, *Critérios de Aceitação para Deposição de Rejeitos Radioativos de Baixo e Médio Níveis de Radiação*, CNEN-NE-6.09, Rio de Janeiro, Brasil, 2002.

CNEN, *Licenciamento de Instalações Radiativas*, Projeto de Norma, CNEN-NN-6.02, Rio de Janeiro, Brasil, 2008.

CNEN, *Diretrizes Básicas de Proteção Radiológica*, CNEN-NN-3.01, Rio de Janeiro, Brasil, 2011.

CNPEM, *IV Workshop em Microfluídica*, Unicamp, Campinas, Brasil, 2014.

COGHO, V. E. & BOTHA, J. F., *Modeling Contamination of Ground Water in the Vicinity of a Nuclear Waste Disposal Site*, Institute for Ground Water Studies, University of the Orange Free State, Bloemfontein, Republic of South Africa, 1984.

CORTIS, A. & BERKOWITZ, B., “*Groundwater – Computer Note - Computing “Anomalous” Contaminant Transport in Porous Media: The CTRW MATLAB Toolbox*”, *Ground Water*, v. 43, n. 6, pp. 947-950, 2005.

CYGANOWSKI, S., *Solving Stochastic Differential Equations with Maple*, School of Computing and Mathematics, Goethe Universität, Institut für Mathematik, Frankfurt, German, 1993.

DARCY, H., “*Détermination des lois d’écoulement de l’eau à travers le sable*”, *Les fontaines publiques de la ville de Dijon*, pp. 590-594, Victor Dalmont, Paris, 1856.

DAY, P. R., *Soil Moisture Tension Measurements: Theoretical Interpretation and Practical Application*, University of California, Berkeley, USA. Disponível em: <http://www.clays.org/journal/archive/volume_3/3-1-557.pdf>. Acesso em 20 May. 2014, 17:10:10.

DE LA CRUZ, H. & ZUBELLI, J. P., “*Stabilized Integrators for Stochastic Differential Equations Driven by Small Noises*”, *CNMAC2012, XXXIV Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional*, ISSN 1984-8218, pp. 1336-1342, Águas de Lindóia, Brasil, 17 a 21 Set. 2012.

DIAS, W., *Manual de Controle Radiológico do Meio Ambiente – MCRMA*, ETN, CP/2/1170/000001, rev. 3, Rio de Janeiro, Brasil, 2004.

EVANS, L. C., *An Introduction to Stochastic Differential Equations*, Version 1.2, Department of Mathematics, University of California, American Mathematical Society – AMS, Berkeley, USA, 2013.

FORTUNA, A. O., *Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos – Conceitos Básicos e Aplicações*, Primeira Edição, São Paulo, Brasil, EDUSP – Editora da Universidade de São Paulo, 2000.

FOURIER, J. B. J., *Théorie Analytique de la Chaleur*, F. Didot, Paris, France, 1822.

GALLAS, T., *Stochastic Processes, Ito Calculus and Black-Scholes Formula*, Complex Systems and Statistical Physics Group, School of Physics and Astronomy, University of Manchester, Manchester, UK, 2006. Disponível em: <<http://www.theory.physics.manchester.ac.uk/~galla/diplomacourse.pdf>>. Acesso em 11 Out. 2014, 10:11:30.

GLEESON, P. J., *The Ito/Stratonovich Dilemma*, Department of Mathematics and Statistics, University of Limerick, Limerick, Ireland. Disponível em: <http://www3.ul.ie/gleesonj/Papers/SDEs/AM4062_notes7.pdf>. Acesso em 04 Out. 2014, 14:18:25.

GONTIS, V.; KAULAKYS, B. and RUSECKAS, J., “*Nonlinear Stochastic Differential Equation as the Background of Financial Fluctuations*”, 20th International Conference (ICNF 2009), *Noise and Fluctuations*, Edited by M. Macucci and G. Basso, American Institute of Physics, USA, 2009.

GREEN, W. H. & AMPT, C. A., “*Studies on Soil Physics I. The Flow of Air and Water through Soils*”, *Journal of Agricultural Science IV (Part I)*, USA, 1911.

HAMDI, S.; SCHIESSER, W. E. and GRIFFITHS, G. W., “*Method of Lines, Part I – Basic Concepts*”, *Scholarpedia* 2(7):2859, 2007. Disponível em: <<http://www.pdecomp.net/Scholarpedia/MOLfinal.pdf>>. Acesso em 18 June. 2013, 15:05:23.

HAUGH, M., *Simulating Stochastic Differential Equations*, Monte Carlo Simulation: IEOR E4703, Columbia University, New York, USA, 2004. Disponível em: <http://www.columbia.edu/~mh2078/MCS04/MCS_SDEs.pdf>. Acesso em 22 June. 2013, 14:20:10.

HERZOG, F., *Stability of Stochastic Systems*, Institute for Dynamic Systems and Control, Zurich, Swiss, 2010. Disponível em: <<http://www.idsc.ethz.ch/Courses/stochasticsystems/Stability.pdf>>. Acesso em 30 June.2014, 16:20:15.

HIGHAM, D. J. & KLOEDEN, P. E., *MAPLE and MATLAB for Stochastic Differential Equations in Finance*, Department of Mathematics and Statistics, University of Strathclyde, Glasgow, Scotland, 2001.

HIGHAM, D. J., “*Stochastic Ordinary Differential Equations in Applied and Computational Mathematics*”, *Paper submitted to the IMA Journal of Applied Mathematics*, “2020 Vision of Applied Mathematics”, 2010. Disponível em: <<http://www.strath.ac.uk/media/departments/mathematics/researchreports/2010/7techima.pdf>>. Acesso em 07 May. 2013, 20:13:27.

HIROMOTO, G.; DELLAMANO, J. C.; MARUMO, J. T.; ENDO, L. S.; VICENTE, R. and HIRAYAMA, T., *Introdução à Gerência de Rejeitos Radioativos*, Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Departamento de Rejeitos Radioativos, São Paulo, Brasil, 1999.

HOLMAN, J. P. & WHITE, P. R. S., *Heat Transfer*, Seventh Edition, Metric Editions, Mechanical Engineering Series, London, UK, McGraw-Hill Company, 1992.

HOTTOVY, S., *The Fokker-Planck Equation*, University of Wisconsin, Department of Mathematics, Madison, USA, 2011. Disponível em: <<http://www.math.wisc.edu/~shottovy/NumPDEreport.pdf>>. Acesso em 21 Feb. 2013, 20:05:08.

HUNG, C., *PRESTO-EPA-POP: A Low-Level Radioactive Waste Environmental Transport and Risk Assessment Code*, Methodology Manual, v. 1, Prepared for U. S. Environmental Protection Agency – Office of Radiation Programs, Washington, USA, 2000.

IAEA, *Interim Storage of Radioactive Waste Packages*, Technical Report Series n. 390, Vienna, Austria, 1998a.

IAEA, *The Radiological Accident in Goiânia*, STI/PUB/815, ISBN 92-0-129088-8, Vienna, Austria, 1998b.

IAEA, *Near surface disposal of radioactive waste*, Safety Standard Series n. WS-R-1, Vienna, 1999.

IAEA, *Scientific and technical basis for the near surface disposal of low and intermediate level waste*, Technical Reports Series n. 412, 2002.

IAEA, *Radioactive Waste Management Glossary*, 2003 Edition, Vienna, Austria, 2003.

IAEA, *Safety assessment methodologies for near surface disposal facilities, results of a coordinated research project, v. 1 – Review and enhancement of safety assessment approaches and tools*, Vienna, Austria, 2004a.

IAEA, *Safety assessment methodologies for near surface disposal facilities, results of a coordinated research project, v. 2 – test cases*, Vienna, Austria, 2004b.

IAEA, *Storage of Radioactive Waste*, IAEA Safety Standards for Protecting People and Environment, IAEA Safety Standards Series n. WS-G-6.1, Vienna, Austria, 2008.

IAEA, *Disposal of Radioactive Waste*, IAEA Safety Standards for Protecting People and Environment, IAEA Safety Standards Series n. SSR-5, Specific Safety Requirements, Vienna, Austria, 2011.

ISRAELSEN, O. W., “*The application of hydrodynamics to irrigation and drainage problems*”, *Hilgardia*”, v. 2, pp. 479-528, 1927.

ITO, K., “*On Stochastic Processes (Infinitely Divisible Laws of Probability)*”, Ph.D. Dissertation, Japan, Jouro Math XVIII, 261-301, 1942.

JAEGER, R. G., *Engineering Compendium on Radiation Shielding - Shielding Fundamentals and Methods*, The First Edition, v. 1, Berlin, Germany, Springer Verlag, 1960.

JONES, P. B.; WALKER, G. D.; HARDEN, R. W. and McDANIELS, L. L., *The Development of the Science of Hydrology*, Texas Water Commission, Circular n. 63-03, USA, 1963.

KAVANAGH, K. R.; KELLEY, C. T.; BERGER, R. C.; HALLBERG, J. P. and HOWINGTON, S. E., *Nonsmooth Nonlinearities and Temporal Integration of Richards' Equation*, Department of Mathematics and Center for Research in Scientific Computation, North Carolina State University, North Carolina, USA, 2009.

KELLEY, C. T.; MILLER, C. T. and TOCCI, M. D., *Method of Lines Solution of Richards Equation*, North Carolina State University, Center for Research in Scientific Computation and Department of Mathematics, and Department of Environmental Science and Engineering, North Carolina, USA, 1995.

KLOEDEN, P. E. & PLATEN, E., *Numerical Solution of Stochastic Differential Equations*, Applications of Mathematics – Stochastic Modeling and Applied Probability, New York, USA, Springer Publisher, 1999.

KOCH, D. L. & BRADY, J. F., “*A Non-local Description of Advection-Diffusion with Application to Dispersion in Porous Media*”, *J. Fluid Mech.*, v. 180, pp. 387-403, 1987.

KOLMOGOROV, A. N., *Foudations of the Theory of Probability*, Translation Edited by Nathan Morrison, University of Oregon, New York, USA, Chelsea Publishing Company, 1956.

KREIDER, D. L.; KULLER, R. G.; OSTBERG, D. R. and PERKINS, F. W., *Introdução à Análise Linear, Equações Diferenciais Lineares*, Edição, v. 1, Tradução de Genésio Lima dos Reis, EDITORA AO LIVRO TÉCNICO S/A, Rio de Janeiro, Brasil, 1972.

KULASIRI, D. & VERWOERD, W., *A Stochastic Model for Solute Transport in Porous Media: Mathematical Basis and Computational Solution*, Applied Computing, Mathematics and Statistics Group, Division of Applied Management and Computing, Research Report No: 99/11, ISSN 1174-6696, Lincoln University, Canterbury, New Zealand, 1999.

KUMAR, C. P., *Modeling Unsaturated Flow*, Hard Rock Regional Centre, National Institute of Hydrology, Belgaum, India, 1988.

KUNETSOV, P. I. & STRATONOVICH, R. L., *Eletromagnetic Waves Distribution in Multiwire Systems, Proceedings of 1947-1955, Vychisl. Tsent. Akad., Moscow, SSSR, 1958.*

KURTZ, T. G., *Lectures on Stochastic Analysis*, Department of Mathematics and Statistics, University of Wisconsin, Madison, USA, 2007. Disponível em: <<http://www.math.wisc.edu/~kurtz/735/main735.pdf>>. Acesso em 25 Mar. 2014, 10:30:15.

LEE, D. H. & ABRIOLA, L. M., “*Use of the Richards Equation in Land Surface Parameterizations*”, *Journal of Geophysical Research*, v. 104, n. D22, pp. 27,519-27,526, 1999.

LEE, C. C.; TAN, Y. C.; CHEN, C. H. and YEH, T. C. J., “*Stochastic Series Lumped Rainfall-Runoff Model for a Watershed in Taiwan*”, *Journal of Hydrology - Science Direct – Elsevier*, v. 249, pp. 30-45, 2001.

LONGTIN, A., *Effects of Noise on Nonlinear Dynamics*. Disponível em: <<http://www.springer.com/?SGWID=4-102-45-103417-p3057121>>. Acesso em 20 May. 2014, 15:20:05.

LUO, Y.; ZHIDONG, L.; ZHENG, L.; YANG, S.; OUYANG, Z. and ZHAO, Q., A “*Stochastic Model of Soil Water Regime in the Crop Root Zone*”, *Journal of Hydrology - Science Direct – Elsevier*, v. 335, pp. 89-97, 2007. Disponível em: <http://sourcedb.cas.cn/sourcedb_ignrr_cas/zw/lw/200906/P020090625748233640235.pdf>. Acesso em 26 Jan. 2013, 10:18:25.

LYONS, S. M. J., *Introduction to Stochastic Differential Equations*, School of Informatics, University of Edinburgh, Scotland. Disponível em: <<http://homepages.inf.ed.ac.uk/s0978702/introsde.pdf>>. Acesso em 10 May. 2013, 11:20:25.

MAHONY, C. O., *The Numerical Analysis of Stochastic Differential Equations*. Disponível em: <<http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.117.8043&rep=rep1&type=pdf>>. Acesso em 20 Apr. 2013, 20:06:30.

McCAVITT, M. J., *Guide to the Papers of Norbert Wiener – MC.0022*, Massachusetts Institute of Technology – MIT, Institute Archives and Special Collections – MIT Libraries, Cambridge, USA, 2009.

MERTON, R. C., “*Option Pricing when Underlying Stock Returns are Discontinuous*”, *Journal of Financial Economics*, v. 3, pp. 125-144, 1976.

MISTURINI, R., *Movimento Browniano, Integral de Ito e Introdução às Equações Diferenciais Estocásticas*, dissertação de M.Sc., Instituto de Matemática, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Brasil, 2010.

MONTGOMERY, D. C. & RUNGER, G. C., *Estatística Aplicada e Probabilidade para Engenheiros*, Segunda Edição, Tradução de Verônica Calado, Rio de Janeiro, Brasil, LTC Editora, 1999.

MOVELLAN, J. R., *Tutorial on Stochastic Differential Equations*, MPLab Tutorials Version 06.1, University of California, San Diego, USA, 2011. Disponível em: <<http://mplab.ucsd.edu/tutorials/sde.pdf>>. Acesso em 10 Apr. 2013, 17:30:10.

NACHABE, M. H.; ISLAS, A. L. and ILLANGASEKARE, T. H., *Analytical Solutions for Water Flow and Solute Transport in the Unsaturated Zone*, University of Colorado, Department of Civil, Environmental and Architectural Engineering, Boulder, USA, 1994.

NARAYANAN, R.; ZAKI, M. H. and TAHAR, S., “*Using Stochastic Differential Equation for Assertion Based Verification of Noise in Analog/RF Circuits*”, *Journal of Electronic Testing: Theory and Applications*, v. 26, n. 1, pp. 97-109, 2009.

NUCLEN, *Repositório de Abadia de Goiás*, Relatório Final de Análise de Segurança (RFAS), Rio de Janeiro, Brasil, 1996.

OKSENDAL, B., *Stochastic Differential Equations, An Introduction with Applications*, Fifth Edition, Corrected Printing, New York, USA, Springer Publisher, 2000.

ÖZISIK, M. N., *Finite Difference Methods in Heat Transfer*, Mechanical and Aerospace Engineering Department, North Carolina State University, Boca Raton, USA, CRC Press, 1994.

PACHEPSKY, Y.; TIMLIN, D. and RAWLS, W., “*Generalized Richards’ Equation to Simulate Water Transport in Unsaturated Soils*”, *Journal of Hydrology - Elsevier*, v. 272, pp. 3-13, 2003. Disponível em: <http://arsserv0.tamu.edu/SP2UserFiles/ad_hoc/12755100FullTextPublicationspdf/Publications/timlin/genrichards.pdf>. Acesso em 01 Apr. 2013, 10:50:15.

PARLANGE, J. Y.; BARRY, D. A.; PARLANGE, M. B.; HOGARTH, W. L.; HAVERKAMP, R.; ROSS, P. J.; LING, L.; STEENHUIS, T. S., “*New Approximate Analytical Technique to Solve Richards Equation for Arbitrary Surface Boundary Conditions*”, *Water Resources Research*, v. 33, n. 4, pp. 903-906, 1997.

PARLANGE, J. Y.; HOGARTH, W. L.; BARRY, D. A.; PARLANGE, M. B.; HAVERKAMP, R.; ROSS, P. J.; STEENHUIS, T. S.; DiCARLO, D. A.; KATUL, G., “*Analytical Approximation to the Solutions of Richards Equation with Applications to Infiltration, Ponding and Time Compression Approximation*”, *Advances in Water Resources – Elsevier*, v. 23, pp. 189-194, 1999.

PONTEDEIRO, E. M. B. D., *Avaliação de Modelos de Impacto Ambiental para Deposição de Resíduos Sólidos Contendo Radionuclídeos Naturais em Instalações Minero-Industriais*, Tese de D.Sc., PEM/COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, Brasil, 2006.

RAMAN, K., *A Stochastic Differential Equation Analysis of Cerebrospinal Fluid Dynamics, Fluids and Barriers of the CNS 2011*, Medill IMC Department, Northwestern University, Evanston, USA, 2011.

RANÇON, D., *Utilisation Pratique du Coefficient de Distribution pour la Mesure de la Contamination Radioactive des Mineraux, des Roches, du sol et des eaux Souterraines*, Commissariat à L’Energie Atomique, Departement de Sûreté Nucléaire, Centre d’Etudes Nucleaires de Cadarache, Rapport CEA-R-4274, Paris, France, 1972.

REEVES, M. & DUGUID, J. O., *Water Movement Through Saturated-Unsaturated Porous Media: Finite-Element Galerkin Model*, Oak Ridge National Laboratory, For the U. S. Atomic Energy Commission, Computer and Environmental Science Divisions, UC-32-Mathematics and Computer, ORNL-4927, Tennessee, USA, 1975.

REIß, M., *Stochastic Differential Equations*, Lecture notes for courses given at Humbolt University Berlin and University of Heidelberg, Institute of Applied Mathematics – University of Heidelberg, Heidelberg, German, 2007.

RICHARDS, L. A., *Capillary conduction of liquids through porous mediums*, Ph.D. dissertation, Cornell University, USA, 1931.

RICHARDSON, M., *Stochastic Differential Equations Case Study*, University of Oxford, Mathematical Institute, Oxford, UK, 2009. Disponível em: <<http://people.maths.ox.ac.uk/richardsonm/SDEs.pdf>>. Acesso em 20 Mar. 2013, 20:30:40.

RIECKE, H., *Introduction to Stochastic Processes and Stochastic Differential Equations – Lecture Note Sketches*, Engineering Sciences and Applied Mathematics, University of Bayreuth, Bayreuth, Germany, 2010. Disponível em: <http://people.esam.northwestern.edu/~riecke/Vorlesungen/442/Notes/notes_442.pdf>. Acesso em 12 Out. 2014, 17:07:55.

RILEY, K. F; HOBSON, M. P. and BENCE, S. J., *Mathematical Methods for Physics and Engineering – A comprehensive guide*, Cambridge, UK, Cambridge University Press, 1997.

ROOD, A. S., *FOLAT: A Model for Assessment of Leaching and Transport of Radionuclides in Unsaturated Porous Media*, Final Report of the Code, K-Spar Inc. Scientific Consulting, USA, 2003.

ROSS, P. J., *Fast Solution of Richards' Equation for Flexible Soil Hydraulic Property Description*, CSIRO Land and Water Science, Report n. 39/06, Melbourne, Australia, 2006.

ROSS, S. M., *Introduction to Probability Models*, 9th Edition, Burlington, USA, Academic Press - Elsevier, 2007.

SADEGHI, M.; GHARAMAN, B.; ZIAEI, A. N.; DAVARY, K. and REICHARDT, K., “Additional Scaled Solutions to Richard’s Equation for Infiltration and Drainage”, *Soil and Tillage Research – Elsevier*, v. 119, pp. 60-69, 2012.

SALAMON, P., *On Modeling Contaminant Transport in Complex Porous Media using Random Walk Particle Tracking*”, Ph.D. dissertation, Instituto de Ingeniería del Agua y Medio Ambiente - IIAMA, Universidade Politécnica de Valencia, Valencia, Spain, 2006.

SALAMON, P.; GARCIA, D. F. and HERNÁNDEZ, J. J. G., “A Review and Numerical Assessment of the Random Walk Particle Tracking Method”, *Journal of Contaminant Hydrology - Science Direct - Elsevier*, v. 87, pp. 277-305, 2006.

SAYTO, Y., *Stability Analysis of Numerical Methods for Stochastic System with Additive Noise*. Disponível em: <http://www.shotoku.ac.jp/data/facilities/library/publication/education-keizai08_2_06.pdf>. Acesso em 05 Jun. 2013, 09:20:10.

SAUER, T., *Numerical Solution of Stochastic Differential Equations in Finance*, Chapter 19 of Handbook of Computational Finance, Springer Handbooks of Computational Statistics DOI 10.1007/978-3-642-17254-0_19, Berlin, Germany, Springer-Verlag, 2012.

SAYTO, Y. & MITSUI, T., “Mean-square Stability of Numerical Schemes for Stochastic Differential Systems”, *Vietnam Journal of Mathematics*, v. 30, pp. 551-560, 2002. Disponível em: <http://www.math.ac.vn/publications/vjm/vjm_30/So_DB_02/551-560_Y.%20Saito,%20T.%20Mitsui.pdf>. Acesso em 25 Jun. 2014, 19:30:15.

SCHUSS, Z., *Chapter 4 - Theory and Applications of Stochastic Processes: An Analytical Approach*, Springer Science+Business Media, Applied Mathematical Sciences 170, DOI 10.1007/978-1-4419-1605-1_4. Disponível em: <<http://mitran-lab.amath.unc.edu:8084/redmine/projects/polymerkineticmontecarlo/repository/revision/s/171/entry/biblio/LectureNotes/sde.pdf>>. Acesso em 20 Jun. 2014, 09:20:50.

SCHWARZER, K., *Radionuclidtransport im Boden*, Institut für Nucleare Sicherheitsforschung, Jülich, Bericht n. 1572, Deutschland, 1972.

SCOTT, M., *Applied Stochastic Processes in Science and Engineering*, Department of Applied Mathematics, University of Waterloo, Waterloo, Canada, 2013. Disponível em: <http://www.math.uwaterloo.ca/~mscott/Little_Notes.pdf>. Acesso em 02 Jul. 2014, 11:20:05.

SHOJI, I. & OZAKI, T., *Estimation for Nonlinear Stochastic Differential Equations by a Local Linearization Method*, Tokio, Japan, 1998. Disponível em: <http://www.ism.ac.jp/~ozaki/publications/paper/1998_Shoji_Ozaki_sto_ana_app.pdf>. Acesso em 09 Jan. 2014, 22:17:45.

SIGMAN, K., *Geometric Brownian Motion*, Columbia University, Columbia, USA, 2006. Disponível em: <<http://www.columbia.edu/~ks20/FE-Notes/4700-07-Notes-GBM.pdf>>. Acesso em 15 Jul. 2014, 10:04:45.

SIGMAN, K., *Introduction to Stochastic Integration*, Columbia University, Columbia, USA, 2007. Disponível em: <<http://www.columbia.edu/~ks20/FE-Notes/4700-07-Notes-Ito.pdf>>. Acesso em 20 Jul. 2014, 10:20:25.

SIMMONS, G. F., *Cálculo com Geometria Analítica – Volume I*, Tradução de Seiji Hariki, São Paulo, Brasil, MAKRON Books do Brasil Editora Ltda, 1987.

SIMUNEK, J. & VAN GENUCHTEN, M. T., “*Modeling Nonequilibrium Flow and Transport Processes Using HYDRUS*”, *Vadose Zone Journal - Vadose Zone Modeling*, v. 7, n. 2, pp. 782-797, 2008.

SOONG, T. T., *Random Differential Equations in Science and Engineering*, v. 103 in *Mathematics in Science and Engineering*, New York, USA, Academic Press, 1973.

SRIVASTAVA, R. & JIM YEH, T. C., “*Analytical Solutions for One-Dimensional, Transient Infiltration Toward the Water Table in Homogeneous and Layered Soils*”, *Water Resources Research*, v. 27, n. 5, pp. 753-762, 1991.

STRATONOVICH, R. L., “*On the theory of Optimal Nonlinear Filtering of Random Functions*”, *Teor. Veroyatn. Primen.*, n. 2, pp. 239-242, 1959.

STRATONOVICH, R. L., “*Conditional Markov Processes*”, *Teor. Veroyatn. Primen.*, n. 2, pp. 172-195, 1960.

STROOCK, D. W., *Introduction to Markov Processes*, Department of Mathematics, Massachusetts Institute of Technology – MIT, Printed in Germany, Berlin, Germany, Springer Publisher, 2005.

TANKOV, P., *Financial Modeling with Lévy Processes*, Centre de Mathématiques – Ecole Polytechnique – CMAP, Paris, France. Disponível em: <<http://www.impan.pl/CZM/tankov.pdf>>. Acesso em 18 Jul. 2014, 15:19:05.

TOMÉ, T. & DE OLIVEIRA, M. J., *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade*, São Paulo, Brasil, Edusp – Editora da Universidade de São Paulo, 2001.

UHLENBECK, G. E. & ORNSTEIN, R. U., “*On the Theory of the Brownian Motion*”, *Physical Review* – v. 36, Holland, 1930. Disponível em: <<http://fraden.brandeis.edu/courses/phys39/simulations/Uhlenbeck%20Brownian%20Motion%20Phys%20Rev%201930.pdf>>. Acesso em 07 Sep. 2014, 10:20:15.

VALLE, K. N. F., *Métodos Numéricos de Euler e Runge-Kuta*, Monografia apresentada ao Programa de Pós-graduação em Matemática para Professores com Ênfase em Cálculo da UFMG, como parte dos requisitos à obtenção do título de Especialista em Educação Matemática, Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG), Belo Horizonte, Brasil, 2012.

VAN GENUCHTEN, M. T., *Calculating the Unsaturated Hydraulic Conductivity with a New Closed-Form Analytical Model*, 78-WR-08, Water Resources Program, Department of Civil Engineering, Princeton University, Princeton, New Jersey, USA, 1978.

VASCONCELLOS, C. A. B & AMORIM, J. C. C., “*Numerical Simulation of Unsaturated Flow in Porous Media Using a Mass-Conservative Model*”, 16th Brazilian Congress of Mechanical Engineering, Proceedings of COBEM 2001, Fluid Mechanics, v. 8, p. 148, Brazil, 2001.

WIO, H. S. & TORAL, R., “*Effect of non-Gaussian Noise Sources in a Noise-Induced Transition*”, *Elsevier - Science Direct*, *Physica D*, v. 193, pp. 161-168, 2004.

YUAN, R. & AO, P., *Beyond Itô vs. Stratonovich*, Department of Computer Science and Engineering, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai, China, 2012.

ZARADNY, H., *Groundwater Flow in Saturated and Unsaturated Soil*, Edited by R. B. Zeidler, Brookfields, USA, Distributed by A. A. Balkema Publishers, 1993.

ZITKOVIC, G., *Introduction to Stochastic Process – Lecture Notes*, Department of Mathematic, The University of Texas, Austin, USA, 2010.

APÊNDICE A

A.1. MODELO DETERMINÍSTICO 1 (Solução Analítica)

A.1.1 GERAL

Este apêndice trata do desenvolvimento do modelo determinístico 1, com solução analítica e vazamento do tipo 1 (vazamento de material radioativo pela base e teto do repositório).

A.1.2 HIPÓTESES

As hipóteses deste modelo são:

- 1) Considera-se que a função degradação do teto do repositório seja constante, assim, $F_d(t) = F_d$;
- 2) Despreza-se a vazão volumétrica da fase líquida (radionuclídeo + água) que sai através das paredes laterais do repositório ($\dot{Q}_3 = 0$);
- 3) Considera-se que no instante da falha do repositório, t_f , a altura de coluna de líquido no interior do mesmo é igual a $H(t_f)$.

A.1.3 ALTURA DE COLUNA DE LÍQUIDO NO INTERIOR DO REPOSITÓRIO

A altura de coluna de líquido no interior do repositório, H , é representada pela Eq. (5.26), ou seja:

$$\frac{dH}{dt} + a.H^2 + b.H + c(t) = 0 \quad (\text{A.1})$$

onde:

$$a = \frac{K_c \cdot (b_1 + b_2)}{n \cdot A \cdot L}, [m^{-1} \cdot a^{-1}];$$

$$b = \frac{K_c}{n \cdot E}, [a^{-1}];$$

$$c(t) = \frac{1}{n} [K_c - F_d(t) \cdot (\dot{p} + \dot{i}_r - \dot{e} - \dot{r})], [m/a];$$

A = área interna da base do repositório, [m²];

b₁ = largura da base do repositório, [m];

b₂ = comprimento da base do repositório, [m];

E = espessura da base do repositório, [m];

\dot{e} = taxa de evapotranspiração, [m/a];

F_d(t) = função degradação do teto do repositório (0 ≤ F_d(t) ≤ 1);

\dot{i}_r = taxa de irrigação do repositório, [m/a];

K_c = condutividade hidráulica do concreto, [m/a];

L = espessura das paredes do repositório, [m];

n = porosidade da região interna do repositório;

\dot{p} = taxa de precipitação pluviométrica, [m/a];

\dot{r} = escoamento de água tangente à superfície do terreno (*surface runoff*), [m/a];

Utilizando-se as hipóteses (1) e (2) observa-se que F_d(t) = F_d e $\dot{Q}_3 = 0$. Com base no Capítulo 5 observa-se que a Eq. (A.1) pode ser simplificada dando origem à seguinte equação:

$$\frac{dH}{dt} + b \cdot H = -c \tag{A.2}$$

onde:

$$b = \frac{K_c}{n \cdot E}$$

$$c = \frac{1}{n} [K_c - F_d \cdot (\dot{p} + \dot{i}_r - \dot{e} - \dot{r})]$$

A Eq. (A.2) é uma equação diferencial ordinária linear homogênea de primeira ordem e do primeiro grau. Ambos os membros da Eq. (A.2) podem ser multiplicados pelo fator $e^{b.t}$, assim:

$$\left(\frac{dH}{dt} + b.H\right).e^{b.t} = -c.e^{b.t} \quad (\text{A.3})$$

A Eq. (A.3) pode ser colocada na forma:

$$\frac{d}{dt}(H.e^{b.t}) = -c.e^{b.t} \quad (\text{A.4})$$

Utilizando-se o símbolo de integral nos dois membros da Eq. (A.4) obtém-se:

$$\int \frac{d}{dt}(H.e^{b.t}) = - \int c.e^{b.t} + C_1 \quad (\text{A.5})$$

onde C_1 é a constante de integração.

Resolvendo-se as integrais da Eq. (A.5) obtém-se:

$$H.e^{b.t} = - \left(\frac{c}{b}\right).e^{b.t} + C_1 \quad (\text{A.6})$$

Da hipótese (3) observa-se que quando $t = t_f$, então $H = H(t_f)$. Utilizando-se estas expressões na Eq. (A.6) obtém-se a seguinte equação para C_1 :

$$C_1 = [H(t_f) + \left(\frac{c}{b}\right)].e^{b.t_f} \quad (\text{A.7})$$

Substituindo-se a Eq. (A.7) na Eq. (A.6) obtém-se:

$$H = [H(t_f) + \left(\frac{c}{b}\right)].e^{-b.(t-t_f)} - \left(\frac{c}{b}\right) \quad (\text{A.8})$$

A.1.4 DETERMINAÇÃO DO INSTANTE DE TEMPO EM QUE SE INICIA O TRANSBORDAMENTO DO REPOSITÓRIO

O instante de tempo a partir do qual ocorre o transbordamento (*overflow*) do repositório, t_t , pode ser determinado com o auxílio da Eq. (A.8), substituindo-se nesta equação a expressão $H = H_r$, para $t = t_t$. Assim, obtém-se a seguinte equação:

$$t_t = t_f - \left(\frac{1}{b}\right) \cdot \ln \left[\frac{H_r + \left(\frac{c}{b}\right)}{H(t_f) + \left(\frac{c}{b}\right)} \right] \quad (\text{A.9})$$

A.1.5 MASSA DE RADIONUCLÍDEO NA FASE LÍQUIDA NO REPOSITÓRIO

A.1.5.1 Geral

A massa de radionuclídeo na fase líquida no repositório, M_{rw} , deve ser determinada considerando-se as situações de não-transbordamento e transbordamento do repositório.

A.1.5.2 Situação em que não ocorre o transbordamento do repositório

A massa de radionuclídeo na fase líquida, M_{rw} , pode ser determinada utilizando-se a Eq. (5.43), que é aqui reproduzida:

$$\frac{dM_{rw}}{dt} = - \left[\lambda + \left(\frac{\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3}{n \cdot A \cdot R_d \cdot H} \right) \right] \cdot M_{rw} \quad (\text{A.10})$$

onde R_d é o coeficiente de retardo definido na Eq. (5.28).

Utilizando-se a hipótese (2) observa-se que $\dot{Q}_3 = 0$. Substituindo-se esta expressão na Eq. (A.10) obtém-se:

$$\frac{dM_{rw}}{dt} = - \left[\lambda + \left(\frac{\dot{Q}_2}{n.A.R_d.H} \right) \right]. M_{rw} \quad (A.11)$$

A vazão volumétrica da fase líquida (água + radionuclídeos) que sai pela base do repositório, \dot{Q}_2 , é representada pela Eq. (5.24), ou seja:

$$\dot{Q}_2 = K_c . A . \left(\frac{H+E}{E} \right) \quad (A.12)$$

Substituindo-se a Eq. (A.12) na Eq. (A.11) obtém-se:

$$\frac{dM_{rw}}{dt} = - \left[\lambda + \frac{K_c}{n.R_d.E} + \frac{K_c}{n.R_d.H} \right]. M_{rw} \quad (A.13)$$

ou

$$\frac{dM_{rw}}{M_{rw}} = - \left[\lambda + \frac{K_c}{n.R_d.E} + \frac{K_c}{n.R_d.H} \right]. dt \quad (A.14)$$

Integrando-se os dois membros da Eq. (A.14) desde um tempo de falha t_f até um tempo t arbitrário, obtém-se:

$$\ln \left[\frac{M_{rw}}{M_{rw}(t_f)} \right] = - \left[\lambda + \frac{K_c}{n.R_d.E} \right]. (t - t_f) - \left(\frac{K_c}{n.R_d} \right) \cdot \int_{t_f}^t \frac{d\tau}{H} \quad (A.15)$$

É necessário resolver a última integral do membro direito da Eq. (A.15). Definindo-se os parâmetros $\alpha_1 = H(t_f) + \left(\frac{c}{b} \right)$ e $\alpha_2 = \left(\frac{c}{b} \right)$ observa-se que a Eq. (A.8) pode ser colocada na seguinte forma:

$$H = \alpha_1 \cdot e^{-b \cdot (\tau - t_f)} - \alpha_2 \quad (\text{A.16})$$

Com base nas Eqs. (A.15) e (A.16) observa-se que:

$$\int_{t_f}^t \frac{d\tau}{H} = \int_{t_f}^t \frac{d\tau}{\alpha_1 \cdot (e^{-b \cdot (\tau - t_f)}) - \alpha_2} \quad (\text{A.17})$$

Multiplicando-se o numerador e o denominador da Eq. (A.17) pela expressão $b \cdot \alpha_2 \cdot e^{b \cdot (\tau - t_f)}$, obtém-se:

$$\int_{t_f}^t \frac{d\tau}{H} = \left(\frac{1}{b \cdot \alpha_2} \right) \cdot \int_{t_f}^t \frac{b \cdot \alpha_2 \cdot e^{b \cdot (\tau - t_f)} \cdot d\tau}{\alpha_1 - \alpha_2 \cdot e^{b \cdot (\tau - t_f)}} \quad (\text{A.18})$$

Considerando-se a mudança de variável $u = \alpha_1 - \alpha_2 \cdot e^{b \cdot (\tau - t_f)}$, observa-se que $du = -b \cdot \alpha_2 \cdot e^{b \cdot (\tau - t_f)} \cdot d\tau$. Substituindo-se estas expressões na Eq. (A.18) obtém-se:

$$\int_{t_f}^t \frac{d\tau}{H} = - \left(\frac{1}{b \cdot \alpha_2} \right) \cdot \int_{u(t_f)}^{u(t)} \frac{d\xi}{\xi} \quad (\text{A.19})$$

Resolvendo-se a integral do membro direito da Eq. (A.19) e aplicando-se os limites de integração observa-se que:

$$\int_{t_f}^t \frac{d\tau}{H} = - \left(\frac{1}{b \cdot \alpha_2} \right) \cdot \ln \left[\frac{\alpha_1 - \alpha_2 \cdot e^{b \cdot (t - t_f)}}{\alpha_1 - \alpha_2} \right] \quad (\text{A.20})$$

Substituindo-se a Eq. (A.20) na Eq. (A.15) obtém-se a seguinte equação:

$$\ln \left[\frac{M_{rw}}{M_{rw}(t_f)} \right] = - \left[\lambda + \frac{K_c}{n \cdot R_d \cdot E} \right] \cdot (t - t_f) + \left(\frac{K_c}{n \cdot R_d \cdot b \cdot \alpha_2} \right) \cdot \ln \left[\frac{\alpha_1 - \alpha_2 \cdot e^{b \cdot (t - t_f)}}{\alpha_1 - \alpha_2} \right] \quad (\text{A.21})$$

Substituindo-se na Eq. (A.21) as expressões $\alpha_1 = H(t_f) + \left(\frac{c}{b}\right)$ e $\alpha_2 = \left(\frac{c}{b}\right)$, obtém-se:

$$\ln\left[\frac{M_{rw}}{M_{rw}(t_f)}\right] = -\left[\lambda + \frac{K_c}{n.R_d.E}\right].(t - t_f) + \left(\frac{K_c}{n.R_d.c}\right). \ln\left[\left|1 + \left(\frac{c}{b.H(t_f)}\right).(1 - e^{b.(t-t_f)})\right|\right] \quad (A.22)$$

Substituindo-se na Eq. (A.22) as expressões $\beta_1 = \left(\lambda + \frac{K_c}{n.R_d.E}\right)$, $\beta_2 = \left(\frac{K_c}{n.R_d.c}\right)$ e $\beta_3 = \left(\frac{c}{b.H(t_f)}\right)$, obtém-se:

$$\ln\left[\frac{M_{rw}}{M_{rw}(t_f)}\right] = -\beta_1.(t - t_f) + \beta_2. \ln\left[\left|1 + \beta_3.(1 - e^{b.(t-t_f)})\right|\right] \quad (A.23)$$

A Eq. (A.23) pode ser colocada na forma mais compacta:

$$M_{rw} = M_{rw}(t_f) \{ (e^{-\beta_1.(t-t_f)}) . [1 + \beta_3.(1 - e^{b.(t-t_f)})] \}^{\beta_2} \quad (A.24)$$

A massa de radionuclídeo que poderia entrar em equilíbrio com a fase líquida no repositório, no instante da falha do mesmo, é representada pela Eq. (5.42), ou seja:

$$M_{rw}(t_f) = \frac{M_0}{R_d} . e^{-\lambda.t_f} \quad (A.25)$$

onde M_0 é a massa de um determinado radionuclídeo no interior do repositório no instante $t = 0$.

Substituindo-se a Eq. (A.25) na Eq. (A.24) obtém-se a seguinte equação:

$$M_{rw} = \left(\frac{M_0}{R_d}\right) . \{ (e^{-[\beta_1.(t-t_f) + \lambda.t_f]}) . [1 + \beta_3.(1 - e^{b.(t-t_f)})] \}^{\beta_2} \quad \forall t \in [t_f, t_1] \quad (A.26)$$

A.1.5.3 Quando ocorre o transbordamento do repositório

A altura de coluna de líquido no interior do repositório, H , atinge seu valor máximo igual a H_r . A massa de radionuclídeo no interior do repositório é governada pela Eq. (5.44), ou seja:

$$\frac{dM_{rw}}{dt} = - \left[\lambda + \left(\frac{\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3 + \dot{Q}_4}{R_d \cdot n \cdot A \cdot H_r} \right) \right] \cdot M_{rw} \quad (\text{A.27})$$

onde \dot{Q}_4 é a vazão volumétrica de mistura (água + radionuclídeo) que sai pelo teto do repositório durante o transbordamento do mesmo.

Substituindo-se a Eq. (5.27) na Eq. (A.27) obtém-se:

$$\frac{dM_{rw}}{M_{rw}(t)} = - \left[\lambda + \left(\frac{(1-f_m) \cdot (\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3) + f_m \cdot \dot{Q}_1}{R_d \cdot n \cdot A \cdot H_r} \right) \right] \cdot dt \quad (\text{A.28})$$

onde f_m ($0 < f_m < 1$) é o fator de mistura que corrige a atividade do líquido que sai pelo teto do repositório durante o seu transbordamento.

É importante observar que após o transbordamento do repositório todos os termos entre colchetes na Eq. (A.28) são constantes.

Integrando-se ambos os membros da Eq. (A.28) desde um tempo de transbordamento “ t_i ” até um tempo “ t ” qualquer, obtém-se:

$$M_{rw} = M_{rw}(t_i) \cdot e^{-C_1^* \cdot (t-t_i)} \quad (\text{A.29})$$

onde $C_1^* = \left[\lambda + \left(\frac{(1-f_m) \cdot (\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3) + f_m \cdot \dot{Q}_1}{R_d \cdot n \cdot A \cdot H_r} \right) \right] \Bigg|_{TR}$ e o símbolo “TR” indica que as vazões

\dot{Q}_1 , \dot{Q}_2 e \dot{Q}_3 são determinadas para o transbordamento do repositório, quando $H = H_r$.

Da hipótese (2) observa-se que $\dot{Q}_3 = 0$. Assim, neste caso:

$$C_1^* = \left[\lambda + \frac{(1-f_m) \cdot \dot{Q}_2 + f_m \cdot \dot{Q}_1}{R_d \cdot n \cdot A \cdot H_r} \right] \Bigg|_{TR}$$

O símbolo \dot{Q}_1 representa a vazão volumétrica de água que entra pelo teto do repositório, durante a falha do mesmo. Esta vazão é representada pela Eq. (5.3), ou seja:

$$\dot{Q}_1 = F_d \cdot A \cdot (\dot{p} + \dot{i}_r - \dot{e} - \dot{r}). \quad (A.30)$$

A vazão volumétrica \dot{Q}_2 é determinada utilizando-se a Eq. (A.12), fazendo-se $H = H_r$.

A massa de radionuclídeo, no interior do repositório, no instante do transbordamento do mesmo, $M_{rw}(t)$, pode ser determinada utilizando-se $t = t_t$ na Eq. (A.26). Assim, obtém-se:

$$M_{rw}(t_t) = \left(\frac{M_0}{R_d} \right) \cdot \{ (e^{-[\beta_1 \cdot (t_t - t_r) + \lambda \cdot t_r]}) \cdot [1 + \beta_3 \cdot (1 - e^{b \cdot (t_t - t_r)})] \}^{\beta_2} \quad (A.31)$$

Substituindo-se a Eq. (A.31) na Eq. (A.29) obtém-se:

$$M_{rw} = \left(\frac{M_0}{R_d} \right) \cdot \{ (e^{-[\beta_1 \cdot (t - t_r) + \lambda \cdot t_r + C_1^* \cdot (t - t_t)]}) \cdot [1 + \beta_3 \cdot (1 - e^{b \cdot (t - t_r)})] \}^{\beta_2} \quad \forall t \in [t_t, \infty) \quad (A.32)$$

A.1.6 CONCENTRAÇÃO EM ATIVIDADE DE RADIONUCLÍDEO NA FASE LÍQUIDA NO REPOSITÓRIO

A.1.6.1 Geral

A concentração em atividade na fase líquida no repositório, C_R , é definida como a razão entre a atividade desta fase e o volume da mesma.

A.1.6.2 Situação em que não ocorre o transbordamento do repositório

A concentração em atividade na fase líquida no repositório, C_R , é determinada utilizando-se a Eq. (5.45), ou seja:

$$C_R = \left(\frac{A_0}{M_0}\right) \cdot \left(\frac{M_{rw}}{V_w}\right) \quad (\text{A.33})$$

onde:

A_0 = Atividade de um determinado radionuclídeo no interior do repositório no instante $t = 0$, [Bq];

M_0 = Massa de um determinado radionuclídeo no interior do repositório no instante $t = 0$, [kg];

Substituindo-se a expressão $V_w = n.A.H$ juntamente com a Eq. (A.26) na Eq. (A.33) obtém-se:

$$C_R = \left(\frac{A_0}{n.R_d.A.H}\right) \cdot \left\{ \left(e^{-[\beta_1 \cdot (t-t_f) + \lambda \cdot t_f]} \right) \cdot \left[1 + \beta_3 \cdot (1 - e^{b \cdot (t-t_f)}) \right]^{\beta_2} \right\} \quad \forall t \in [t_f, t_1] \quad (\text{A.34})$$

Substituindo-se a Eq. (A.16) na Eq. (A.34) obtém-se a seguinte equação:

$$C_R = \left(\frac{A_0}{n.R_d.A}\right) \cdot \left\{ \frac{\left(e^{-[\beta_1 \cdot (t-t_f) + \lambda \cdot t_f]} \right) \cdot \left[1 + \beta_3 \cdot (1 - e^{b \cdot (t-t_f)}) \right]^{\beta_2}}{\alpha_1 \cdot (e^{-b \cdot (t-t_f)}) - \alpha_2} \right\} \quad \forall t \in [t_f, t_1] \quad (\text{A.35})$$

A.1.6.3 Quando ocorre o transbordamento do repositório

Deve-se substituir na Eq. (A.33), a expressão $V_w = n.A.H_r$ juntamente com a Eq. (A.32). Assim, obtém-se:

$$C_R = \left(\frac{A_0}{n.R_d.A.H_r} \right) \cdot \{ (e^{-[\beta_1 \cdot (t_i - t_r) + \lambda \cdot t_r + C_1^* \cdot (t - t_i)]}) \cdot [1 + \beta_3 \cdot (1 - e^{b \cdot (t_i - t_r)})] \}^{\beta_2} \quad \forall t \in [t_i, \infty)$$

(A.36)

A.1.7 TAXA DE LIBERAÇÃO EM ATIVIDADE DO REPOSITÓRIO PARA O MEIO AMBIENTE

A.1.7.1 Geral

A taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente, \dot{A} , é obtida multiplicando-se a concentração em atividade da mistura (água + radionuclídeos), no interior do repositório, pela vazão volumétrica de mistura que sai do mesmo.

A.1.7.2 Situação em que não ocorre o transbordamento do repositório

A taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente, \dot{A} , pode ser determinada pela Eq. (5.49), ou seja:

$$\dot{A} = C_R \cdot (\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3)$$

(A.37)

No presente caso $\dot{Q}_3 = 0$ (hipótese (2)) e a Eq. (A.37) dá origem à seguinte equação:

$$\dot{A} = C_R \cdot \dot{Q}_2$$

(A.38)

Substituindo-se as Eqs. (A.12) e (A.35) na Eq. (A.38) obtém-se a taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente, \dot{A} , ou seja:

$$\dot{A} = \left(\frac{A_0 \cdot K_c}{n \cdot R_d \cdot E} \right) \cdot \left[1 + \frac{E}{\alpha_1 \cdot (e^{-b \cdot (t-t_f)}) - \alpha_2} \right] \cdot \{ (e^{-[\beta_1 \cdot (t-t_f) + \lambda \cdot t_f]}) \cdot [1 + \beta_3 \cdot (1 - e^{b \cdot (t-t_f)})] \}^{\beta_2}$$

$$\forall t \in [t_f, t_1] \quad (\text{A.39})$$

A.1.7.3 Quando ocorre o transbordamento do repositório

A taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente, \dot{A} , é determinada pela Eq. (5.51), ou seja:

$$\dot{A} = C_R \cdot [(1 - f_m) \cdot (\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3) + f_m \cdot \dot{Q}_1] \quad (\text{A.40})$$

Da hipótese (2) observa-se que $\dot{Q}_3 = 0$. Assim, a Eq. (A.40) assume uma forma mais simplificada:

$$\dot{A} = C_R \cdot [(1 - f_m) \cdot \dot{Q}_2 + f_m \cdot \dot{Q}_1] \quad (\text{A.41})$$

Substituindo-se as Eqs. (A.12), (A.30) e (A.36) na Eq. (A.41), obtém-se a expressão para a taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente, \dot{A} , ou seja:

$$\dot{A} = \left(\frac{A_0}{n \cdot R_d \cdot H_r} \right) \cdot \{ [e^{-[\beta_1 \cdot (t_1-t_f) + \lambda \cdot t_f + C_1^* \cdot (t-t_1)]}] \cdot [1 + \beta_3 \cdot (1 - e^{b \cdot (t_1-t_f)})] \}^{\beta_2} \cdot$$

$$[(1 - f_m) \cdot K_c \cdot \left(\frac{H_r + E}{E} \right) + f_m \cdot F_d \cdot (\dot{q} + \dot{i}_r - \dot{e} - \dot{r})]$$

$$\forall t \in [t_1, \infty)$$

$$(\text{A.42})$$

A.1.8 CONCENTRAÇÃO EM ATIVIDADE NO PONTO DE DESCARGA NO AQUÍFERO

A.1.8.1 Situação em que não ocorre o transbordamento do repositório

A concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero, C_D , pode ser determinada utilizando-se a Eq. (5.55):

$$C_D = \frac{C_R \cdot [\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3]}{b_a \cdot H_a \cdot v_a} \quad (\text{A.43})$$

Da hipótese (2) observa-se que $\dot{Q}_3 = 0$. Assim, a Eq. (A.43) se reduz à seguinte equação:

$$C_D = \frac{C_R \cdot \dot{Q}_2}{b_a \cdot H_a \cdot v_a} \quad (\text{A.44})$$

Substituindo-se as Eqs. (A.12) e (A.35) na Eq. (A.44) obtém-se:

$$C_D = \left(\frac{A_0 \cdot K_c}{n \cdot R_d \cdot b_a \cdot H_a \cdot v_a} \right) \cdot \psi_1 \cdot \psi_2 \quad \forall t \in [t_f, t_i] \quad (\text{A.45})$$

onde:

$$\psi_1 = \left(\frac{\alpha_1 \cdot (e^{-b \cdot (t-t_f)}) - \alpha_2 + E}{E} \right)$$

$$\psi_2 = \frac{(e^{-[\beta_1 \cdot (t-t_f) + \lambda \cdot t_f]}) \cdot [1 + \beta_3 \cdot (1 - e^{b \cdot (t-t_f)})]}{\alpha_1 \cdot (e^{-b \cdot (t-t_f)}) - \alpha_2} \Big]^{B_2}$$

A.1.8.2 Quando ocorre o transbordamento do repositório

A concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero, C_D , pode ser determinada utilizando-se a Eq. (5.56):

$$C_D = \frac{C_R \cdot [(1 - f_m) \cdot (\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3) + f_m \cdot \dot{Q}_1]}{b_a \cdot H_a \cdot v_a} \quad (\text{A.46})$$

De acordo com a hipótese 2, $\dot{Q}_3 = 0$, então a Eq. (A.46) se reduz a:

$$C_D = \frac{C_R \cdot [(1 - f_m) \cdot \dot{Q}_2 + f_m \cdot \dot{Q}_1]}{b_a \cdot H_a \cdot v_a} \quad (\text{A.47})$$

Substituindo-se as Eqs. (A.12), (A.30) e (A.36) na Eq. (A.47), obtém-se:

$$C_D = C_2^* \cdot \{ (e^{-[\beta_1 \cdot (t_1 - t_f) + \lambda \cdot t_f + C_1^* \cdot (t - t_1)]}) \cdot [1 + \beta_3 \cdot (1 - e^{b \cdot (t_1 - t_f)})] \}^{\beta_2} \quad \forall t \in [t_1, \infty) \quad (\text{A.48})$$

onde:

$$C_2^* = \left(\frac{A_0}{n \cdot R_d \cdot H_r \cdot b_a \cdot H_a \cdot v_a} \right) \cdot [f_m \cdot F_d \cdot (\dot{q} + \dot{i}_r - \dot{e} - \dot{r}) + (1 - f_m) \cdot K_c \cdot \left(\frac{H_r + E}{E} \right)]$$

A.1.9 CONCENTRAÇÃO EM ATIVIDADE AO LONGO DO AQUÍFERO

A.1.9.1 Situação em que não ocorre o transbordamento do repositório

A concentração em atividade ao longo do aquífero, C_A , pode ser determinada utilizando-se a Eq. (5.68):

$$C_A = (0.5).C_D.\text{Exp}\left[\left(\frac{v_{rx}}{2.D_{rx}}\right).x\right].\text{Exp}[-B^*.x].\text{erfd}\left[\frac{x - A^*.t}{2.\sqrt{D_{rx}.t}}\right] +$$

$$(0.5).C_D.\text{Exp}\left[\left(\frac{v_{rx}}{2.D_{rx}}\right).x\right].\text{Exp}[B^*.x].\text{erfd}\left[\frac{x + A^*.t}{2.\sqrt{D_{rx}.t}}\right]$$
(A.49)

onde C_D é determinado pela Eq. (A.45).

A.1.9.2 Quando ocorre o transbordamento do repositório

A concentração em atividade ao longo do aquífero, C_A , pode ser determinada utilizando-se a Eq. (A.49), porém C_D tem que ser determinado utilizando-se a Eq. (A.48).

APÊNDICE B

B.1. MODELO DETERMINÍSTICO 2 (Solução Analítica)

B.1.1 GERAL

Este apêndice trata do desenvolvimento do modelo determinístico 2, com solução analítica e vazamento do tipo 2 (vazamento de material radioativo pela base, paredes laterais e teto do repositório).

B.1.2 HIPÓTESES

São utilizadas as seguintes hipóteses neste modelo:

- 1) Considera-se que a função degradação do teto do repositório é constante, assim, $F_d(t) = F_d$;
- 2) Considera-se que no instante da falha do repositório, t_f , a altura de coluna de líquido no interior do mesmo é igual a $H(t_f)$;
- 3) A altura de coluna de líquido no interior do repositório, H , é uma função real e não-decrescente.

B.1.3 ALTURA DE COLUNA DE LÍQUIDO NO INTERIOR DO REPOSITÓRIO

Na Eq. (5.26) foi mostrado que a altura de coluna de líquido no interior do repositório, H , pode ser representada pela seguinte equação:

$$\frac{dH}{dt} + a.H^2 + b.H + c(t) = 0 \quad (B.1)$$

onde:

$$a = \frac{K_c \cdot (b_1 + b_2)}{n \cdot A \cdot L}, [m^{-1} \cdot a^{-1}];$$

$$b = \frac{K_c}{n \cdot E}, [a^{-1}];$$

$$c(t) = \frac{1}{n} [K_c - F_d(t) \cdot (\dot{p} + \dot{i}_r - \dot{e} - \dot{r})], [m/a];$$

A = área interna da base ou do teto do repositório, [m²];

b₁ = largura da base do repositório, [m];

b₂ = comprimento da base do repositório, [m];

E = espessura da base do repositório, [m];

\dot{e} = taxa de evapotranspiração, [m/a];

F_d(t) = função degradação do teto do repositório (0 ≤ F_d(t) ≤ 1);

\dot{i}_r = taxa de irrigação no repositório, [m/a];

K_c = condutividade hidráulica do concreto, [m/a];

L = espessura das paredes do repositório, [m];

n = porosidade da região interna do repositório;

\dot{p} = taxa de precipitação pluviométrica, [m/a];

\dot{r} = vazão de água tangente à superfície do terreno (*surface runoff*), [m/a];

Utilizando-se a hipótese (1) observa-se que F_d(t) = F_d. Substituindo-se esta expressão na Eq. (B.1) obtém-se:

$$\frac{dH}{dt} + a \cdot H^2 + b \cdot H + c = 0 \quad (B.2)$$

onde:

$$c = \frac{1}{n} [K_c - F_d \cdot (\dot{p} + \dot{i}_r - \dot{e} - \dot{r})]$$

Esta equação é denominada Equação de Riccati com coeficientes constantes (KREIDER et al., 1972).

Da Eq. (B.2) observa-se que toda constante que satisfaça esta equação tem que satisfazer a equação do segundo grau associada à mesma, ou seja, se " h_p " é uma constante, solução da Eq. (B.2), então é válida a seguinte equação:

$$a.h_p^2 + b.h_p + c = 0 \quad (B.3)$$

As soluções da Eq. (B.3) podem ser representadas pela equação:

$$h_p = \frac{-b \pm \sqrt{\Delta}}{2.a} \quad (B.4)$$

onde $\Delta = b^2 - 4.a.c$.

De acordo com KREIDER et al. (1972), a equação de Riccati com coeficientes constantes pode ser reduzida a uma equação diferencial linear de primeira ordem, fazendo-se a seguinte mudança de variável:

$$H = h_p + \frac{1}{h} \quad (B.5)$$

onde h é uma função associada à H .

Substituindo-se a Eq. (B.5) na Eq. (B.2), obtém-se a seguinte equação:

$$\frac{1}{h^2} \cdot \left(a - \frac{dh}{dt} \right) + \frac{1}{h} \cdot (2.a.h_p + b) + (a.h_p^2 + b.h_p + c) = 0 \quad (B.6)$$

Observa-se que o último termo do membro esquerdo da Eq. (B.6) é igual a zero, pois o mesmo é igual à Eq. (B.3).

Logo a Eq. (B.6) pode ser colocada na forma:

$$\frac{dh}{dt} - (2.a.h_p + b).h - a = 0 \quad (\text{B.7})$$

Como h_p pode ser qualquer solução particular, com a utilização da hipótese (3) observa-se que H deve ser uma função não-decrescente. Consequentemente, h deve ser uma função não-crescente [vide Eq. (B.5)] e deve-se escolher $h_p = h_{p_1} = \frac{-b - \sqrt{\Delta}}{2.a}$. Substituindo-se esta expressão na Eq. (B.6), obtém-se a seguinte equação:

$$\frac{dh}{dt} + \sqrt{\Delta}.h - a = 0 \quad (\text{B.8})$$

Na tentativa de se resolver a Eq. (B.8), devem-se considerar 3 casos que serão analisados a seguir.

Inicialmente seja β , definido pela expressão $\beta = \sqrt{|\Delta|}$.

B.1.3.1 Caso em que $\Delta > 0$

Para o caso em que $\Delta > 0$, então $\sqrt{\Delta} = \sqrt{|\Delta|} = \beta$. Substituindo-se esta expressão na Eq. (B.8), obtém-se a seguinte equação:

$$\frac{dh}{dt} + \beta.h - a = 0 \quad (\text{B.9})$$

Segundo KREIDER et al. (1972), a solução da Eq. (B.9) pode ser representada como:

$$h = C_1.e^{-\beta.t} + \left(\frac{a}{\beta}\right) \quad (\text{B.10})$$

onde C_1 é uma constante arbitrária.

Substituindo-se a Eq. (B.10) na Eq. (B.5) e lembrando que $h_p = h_{p_1} = \frac{-b - \sqrt{\Delta}}{2a}$,

obtem-se a seguinte equação:

$$H = h_{p_1} + [C_1 \cdot e^{-\beta \cdot t} + \left(\frac{a}{\beta}\right)]^{-1} \quad (\text{B.11})$$

onde β já foi definido anteriormente.

Da hipótese (2) observa-se que para $t = t_f$, $H = H(t_f)$ então $C_1 = \left[-\left(\frac{a}{\beta}\right) + \frac{1}{H(t_f) - h_{p_1}}\right] \cdot e^{\beta \cdot t_f}$. Substituindo-se esta expressão na Eq. (B.11), obtém-se a

seguinte equação:

$$H = \frac{h_{p_1} \cdot \left\{ \left[-\left(\frac{a}{\beta}\right) + \frac{1}{H(t_f) - h_{p_1}}\right] \cdot e^{-\beta \cdot (t - t_f)} + \left(\frac{a}{\beta}\right) \right\} + 1}{\left\{ \left[-\left(\frac{a}{\beta}\right) + \frac{1}{H(t_f) - h_{p_1}}\right] \cdot e^{-\beta \cdot (t - t_f)} + \left(\frac{a}{\beta}\right) \right\}} \quad (\text{B.12})$$

B.1.3.2 Caso em que $\Delta=0$

Para o caso em que $\Delta=0$, então a Eq. (B.8) se reduz à seguinte equação:

$$\frac{dh}{dt} = a \quad (\text{B.13})$$

Integrando-se os dois membros da Eq. (B.13), obtém-se a seguinte equação:

$$h = a \cdot t + C_2 \quad (\text{B.14})$$

onde C_2 também é uma constante arbitrária.

Substituindo-se a Eq. (B.14) na Eq. (B.5), para $h_p = h_{p_1} = -\frac{b}{2.a}$, obtém-se a seguinte equação:

$$H = h_{p_1} + [a.t + C_2]^{-1} \quad (B.15)$$

Mas para $t = t_f$ observa-se que $H = H(t_f)$. Desta maneira obtém-se a expressão $C_2 = \frac{a.(h_{p_1} - H(t_f)).t_f + 1}{H(t_f) - h_{p_1}}$. Substituindo-se esta expressão na Eq. (B.15), obtém-se a seguinte equação:

$$H = \frac{a.h_{p_1}.(H(t_f) - h_{p_1}).(t - t_f) + H(t_f)}{a.(H(t_f) - h_{p_1}).(t - t_f) + 1} \quad (B.16)$$

B.1.3.3 Caso em que $\Delta < 0$

Para o caso em que $\Delta < 0$ e lembrando que $\beta = \sqrt{|\Delta|}$, então a Eq. (B.8) assume a seguinte forma:

$$\frac{dh}{dt} + i.\beta.h - a = 0 \quad (B.17)$$

onde $i = \sqrt{-1}$.

Com o auxílio de CHURCHIL (1978) e AHLFORS (1966), pode-se mostrar que a solução da Eq. (B.17) é da seguinte forma:

$$h = C_3.e^{-i.\beta.t} - \left(\frac{a}{\beta}\right)i \quad (B.18)$$

Segundo BRAUN (1979) é válida a seguinte equação:

$$e^{-i\beta.t} = [\cos(\beta.t) - i.\text{sen}(\beta.t)] \quad (\text{B.19})$$

Substituindo-se a Eq. (B.19) na Eq. (B.18), obtém-se a equação:

$$h = [C_3.\cos(\beta.t) - i.(C_3.\text{sen}(\beta.t) + (\frac{a}{\beta}))] \quad (\text{B.20})$$

Substituindo-se a Eq. (B.20) na Eq. (B.5) e lembrando que $h_p = h_{p1} = \frac{-b - \beta.i}{2.a}$

obtém-se a seguinte equação:

$$H = h_{p1} + \{[C_3.\cos(\beta.t) - i.(C_3.\text{sen}(\beta.t) + (\frac{a}{\beta}))]\}^{-1} \quad (\text{B.21})$$

A hipótese (2) indica que para $t = t_f$, $H = H(t_f)$, então se obtém a expressão

$$C_3 = \frac{[H(t_f) - h_{p1}].(\frac{a}{\beta}).i - 1}{(H(t_f) - h_{p1}).(\cos(\beta.t_f) - i.\text{sen}(\beta.t_f))}. \text{ Substituindo-se esta expressão na equação}$$

(B.21), então se obtém a seguinte equação:

$$H = \frac{h_{p1} . [(\xi_1 + \eta_1) + i.(\xi_2 + \eta_2)]}{\eta_1 + i.\eta_2} \quad (\text{B.22})$$

onde:

$$\xi_1 = \left(\frac{H(t_f) - h_{p1}}{h_{p1}}\right) . \cos(\beta.t_f);$$

$$\eta_1 = \cos(\beta.t) + \left(\frac{a}{\beta}\right) . [H(t_f) - h_{p1}] . [\text{sen}(\beta.t) - \text{sen}(\beta.t_f)];$$

$$\xi_2 = -\left(\frac{H(t_f) - h_{p1}}{h_{p1}}\right) . \text{sen}(\beta.t_f);$$

$$\eta_2 = -\text{sen}(\beta.t) + \left(\frac{a}{\beta}\right) . [H(t_f) - h_{p1}] . [\cos(\beta.t) - \cos(\beta.t_f)];$$

$$i = \sqrt{-1} .$$

As equações de H obtidas neste apêndice são apresentadas na Tabela B.1.

De acordo com a hipótese (3), a altura de coluna de líquido no interior do repositório, H, é uma função real e não-decrescente. Com o auxílio da Tabela B.1, observa-se que a única equação de H que atende a esta hipótese é a Eq. (B.12), e, portanto, será a única equação utilizada doravante neste apêndice para a altura de coluna H.

Tabela B.1 - Equações para a altura de coluna de líquido H

Δ	h_{p1}	H	Eqs.
$\Delta > 0$	$\frac{-b-\beta}{2a}$	$H = \frac{h_{p1} \cdot \left\{ \left[-\left(\frac{a}{\beta}\right) + \frac{1}{H(t_f) - h_{p1}} \right] \cdot e^{-\beta \cdot (t - t_f)} + \left(\frac{a}{\beta}\right) \right\} + 1}{\left\{ \left[-\left(\frac{a}{\beta}\right) + \frac{1}{H(t_f) - h_{p1}} \right] \cdot e^{-\beta \cdot (t - t_f)} + \left(\frac{a}{\beta}\right) \right\}}$	B.12
$\Delta = 0$	$-\frac{b}{2a}$	$H = \frac{a \cdot h_{p1} \cdot (H(t_f) - h_{p1}) \cdot (t - t_f) + H(t_f)}{a \cdot (H(t_f) - h_{p1}) \cdot (t - t_f) + 1}$	B.16
$\Delta < 0$	$\frac{-b-\beta \cdot i}{2a}$	$H = \frac{h_{p1} \cdot [(\xi_1 + \eta_1) + i \cdot (\xi_2 + \eta_2)]}{\eta_1 + \eta_2}$	B.22

B.1.4 DETERMINAÇÃO DO INSTANTE DE TEMPO EM QUE SE INICIA O TRANSBORDAMENTO DO REPOSITÓRIO

O instante de tempo a partir do qual ocorre o transbordamento (*overflow*) do repositório, t_t , pode ser determinado com o auxílio da Eq. (B.12), substituindo-se nesta equação $H = H_t$ e $t = t_t$. Assim, obtém-se a seguinte equação:

$$t_t = t_f + \left(\frac{1}{\beta}\right) \cdot \ln \left\{ \frac{(H_r - h_{p1}) \cdot \left[-\left(\frac{a}{\beta}\right) + \frac{1}{H(t_f) - h_{p1}} \right]}{-(H_r - h_{p1}) \cdot \left(\frac{a}{\beta}\right) + 1} \right\} \quad (\text{B.23})$$

B.1.5 MASSA DE RADIONUCLÍDEO NA FASE LÍQUIDA NO REPOSITÓRIO

B.1.5.1 Geral

A massa de radionuclídeo na fase líquida no repositório, M_{rw} , deve ser determinada considerando-se as situações de não-transbordamento e transbordamento do repositório.

B.1.5.2 Situação em que não ocorre o transbordamento do repositório

A massa de radionuclídeo na fase líquida no repositório pode ser determinada utilizando-se a Eq. (5.43), ou seja:

$$\frac{dM_{rw}}{dt} = - \left[\lambda + \left(\frac{\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3}{n \cdot R_d \cdot A \cdot H} \right) \right] \cdot M_{rw} \quad (\text{B.24})$$

A vazão volumétrica da fase líquida (água + radionuclídeo) que sai através da base do repositório, \dot{Q}_2 , pode ser determinada pela Eq. (5.24):

$$\dot{Q}_2 = K_c \cdot A \cdot \left(\frac{H + E}{E} \right) \quad (\text{B.25})$$

A vazão volumétrica da fase líquida (radionuclídeo + água) que sai através das paredes laterais do repositório, \dot{Q}_3 , é representada pela Eq. (5.25):

$$\dot{Q}_3 = K_c \cdot \left(\frac{H^2}{L}\right) \cdot (b_1 + b_2) \quad (\text{B.26})$$

Substituindo-se as Eqs. (B.25) e (B.26) na Eq. (B.24) obtém-se:

$$\frac{dM_{rw}}{dt} = - \left\{ \lambda + \frac{1}{n.R_d.A} \left[\left(\frac{K_c.A}{E}\right) + \left(\frac{K_c.A}{H}\right) + \left(\frac{K_c.(b_1 + b_2).H}{L}\right) \right] \right\} \cdot M_{rw} \quad (\text{B.27})$$

A Eq. (B.27) pode ser colocada na seguinte forma:

$$\int_{t_f}^t \frac{dM_{rw}}{M_{rw}} = - \int_{t_f}^t \left\{ \lambda + \frac{1}{n.R_d.A} \left[\left(\frac{K_c.A}{E}\right) + \left(\frac{K_c.A}{H}\right) + \left(\frac{K_c.(b_1 + b_2).H}{L}\right) \right] \right\} \cdot d\tau \quad (\text{B.28})$$

onde t_f representa o tempo de falha e t é um instante de tempo qualquer.

Resolvendo-se as integrais da Eq. (B.28) obtém-se a seguinte equação:

$$M_{rw} = M_{rw}(t_f) \cdot e^{-[\lambda.(t-t_f) + \frac{1}{n.R_d.A} \cdot \sum_{i=1}^3 I_i(t)]} \quad (\text{B.29})$$

onde:

$$I_1 = \int_{t_f}^t \left(\frac{K_c.A}{E}\right) \cdot d\tau; \quad I_2 = \int_{t_f}^t \left(\frac{K_c.A}{H}\right) \cdot d\tau; \quad I_3 = \int_{t_f}^t \left(\frac{K_c.(b_1 + b_2).H}{L}\right) \cdot d\tau$$

As equações para I_1 , I_2 e I_3 , obtidas no Apêndice C, são apresentadas na Tabela B.2.

Na Tabela B.2 os símbolos a_1 , a_2 , a_3 e a_4 representam as expressões:

$$a_1 = - \left(\frac{a}{\beta}\right) + \frac{1}{H(t_f) - h_{p1}}, \quad a_2 = \left(\frac{a}{\beta}\right), \quad a_3 = h_{p1} \cdot \left[- \left(\frac{a}{\beta}\right) + \frac{1}{H(t_f) - h_{p1}} \right] \quad e$$

$$a_4 = [1 + h_{p1} \cdot \left(\frac{a}{\beta}\right)].$$

Tabela B.2 - Equações para I_i

i	I_i (*)
1	$I_1 = \frac{K_c \cdot A \cdot (t - t_f)}{E}$
2	$I_2 = \frac{K_c \cdot A}{\beta} \left[-\frac{a_1}{a_3} \cdot \ln\left(\frac{a_3 \cdot e^{-\beta \cdot (t - t_f)} + a_4}{a_3 + a_4}\right) + \frac{a_2}{a_4} \cdot \ln\left(\frac{a_3 + a_4 \cdot e^{\beta \cdot (t - t_f)}}{a_3 + a_4}\right) \right]$
3	$I_3 = \frac{K_c \cdot (b_1 + b_2)}{\beta \cdot L} \cdot \left[-\frac{a_3}{a_1} \cdot \ln\left(\frac{a_1 \cdot e^{-\beta \cdot (t - t_f)} + a_2}{a_1 + a_2}\right) + \frac{a_4}{a_2} \cdot \ln\left(\frac{a_1 + a_2 \cdot e^{\beta \cdot (t - t_f)}}{a_1 + a_2}\right) \right]$

(*) – Os significados de todos esses símbolos são mostrados no Apêndice C

A massa de radionuclídeo que poderia entrar em equilíbrio com a fase líquida no repositório, no instante da falha do mesmo, é representada pela Eq. (5.42), ou seja:

$$M_{rw}(t_f) = \frac{M_0}{R_d} \cdot e^{-\lambda \cdot t_f} \quad (\text{B.30})$$

onde M_0 e R_d representam respectivamente a massa de um determinado radionuclídeo em $t = 0$ e o coeficiente de retardo, no interior do repositório.

Substituindo-se a Eq. (B.30) na Eq. (B.29), obtém-se a equação:

$$M_{rw} = \left(\frac{M_0}{R_d}\right) \cdot e^{-[\lambda \cdot t + \frac{1}{n \cdot R_d \cdot A} \sum_{i=1}^3 I_i]} \quad \forall t \in [t_f, t_1] \quad (\text{B.31})$$

B.1.5.3 Quando ocorre o transbordamento do repositório

A massa de radionuclídeo na fase líquida no repositório pode ser determinada pela Eq. (5.44), ou seja:

$$\frac{dM_{rw}}{dt} = - \left[\lambda + \frac{\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3 + \dot{Q}_4}{n.R_d.A.H_r} \right].M_{rw} \quad (B.32)$$

O símbolo \dot{Q}_4 representa a vazão volumétrica de mistura (água + radionuclídeos) que sai pelo teto do repositório, durante o transbordamento do mesmo. Esta vazão é representada pela Eq. (5.27), ou seja:

$$\dot{Q}_4 = f_m \cdot [\dot{Q}_1 - (\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3)] \quad (B.33)$$

onde f_m ($0 < f_m < 1$) é o fator de mistura que corrige a atividade do líquido que sai pelo teto do repositório durante o seu transbordamento.

Da Eq. (B.33) observa-se que:

$$\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3 + \dot{Q}_4 = (1 - f_m) \cdot (\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3) + f_m \cdot \dot{Q}_1 \quad (B.34)$$

Substituindo-se a Eq. (B.34) na Eq. (B.32) obtém-se:

$$\frac{dM_{rw}}{dt} = - \left[\lambda + \frac{(1 - f_m) \cdot (\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3) + f_m \cdot \dot{Q}_1}{n.R_d.A.H_r} \right].M_{rw} \quad (B.35)$$

No transbordamento do repositório, todos os termos entre colchetes na Eq. (B.35) são constantes. Assim, integrando-se ambos os lados da Eq. (B.35) desde um tempo de transbordamento t_t até um tempo t qualquer, obtém-se:

$$M_{rw} = M_{rw}(t_t) \cdot e^{-C_1^* \cdot (t - t_t)} \quad \forall t \in [t_t, \infty) \quad (B.36)$$

onde $C_1^* = \left[\lambda + \frac{(1 - f_m) \cdot (\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3) + f_m \cdot \dot{Q}_1}{R_d \cdot n \cdot A \cdot H_r} \right] \Bigg|_{TR}$ e o símbolo “TR” indica que as vazões

\dot{Q}_1 , \dot{Q}_2 e \dot{Q}_3 são determinadas para o transbordamento do repositório.

O símbolo \dot{Q}_1 representa a vazão volumétrica de água que entra pelo teto do repositório, durante a falha do mesmo. Esta vazão é representada pela Eq. (5.3), ou seja:

$$\dot{Q}_1 = F_d \cdot A \cdot (\dot{p} + \dot{i}_r - \dot{e} - \dot{r}) \quad (\text{B.37})$$

As vazões \dot{Q}_2 e \dot{Q}_3 são determinadas utilizando-se respectivamente as Eqs. (B.25) e (B.26) deste apêndice, fazendo-se $H = H_r$.

O valor de $M_{rw}(t_t)$ pode ser obtido, substituindo-se $t = t_t$ na Eq. (B.31), ou seja;

$$M_{rw}(t_t) = \left(\frac{M_0}{R_d}\right) \cdot e^{-[\lambda \cdot t_t + \frac{1}{n \cdot R_d \cdot A} \cdot \sum_{i=1}^3 I_i(t_t)]} \quad (\text{B.38})$$

Substituindo-se a Eq. (B.38) na Eq. (B.36), obtém-se a seguinte equação:

$$M_{rw} = \left(\frac{M_0}{R_d}\right) \cdot e^{-[\lambda \cdot t + \frac{1}{n \cdot R_d \cdot A} \cdot \sum_{i=1}^3 I_i(t) + C_1^* \cdot (t - t_t)]} \quad \forall t \in [t_t, \infty) \quad (\text{B.39})$$

B.1.6 CONCENTRAÇÃO EM ATIVIDADE DE RADIONUCLÍDEO NA FASE LÍQUIDA NO REPOSITÓRIO

B.1.6.1 Geral

A concentração em atividade na fase líquida no repositório, C_R , é definida como a razão entre a atividade desta fase e o volume da mesma.

B.1.6.2 Situação em que não ocorre o transbordamento do repositório

A concentração em atividade na fase líquida no repositório, C_R , é determinada utilizando-se a Eq. (5.45), ou seja:

$$C_R = \left(\frac{A_0}{M_0}\right) \cdot \left(\frac{M_{rw}}{V_w}\right) \quad (\text{B.40})$$

onde A_0 é a atividade de um determinado radionuclídeo no interior do repositório no instante $t = 0$, M_0 é a massa de um determinado radionuclídeo no interior do repositório no instante $t = 0$ e $V_w = n.A.H$ é o volume de líquido no interior do repositório no instante de tempo t .

Substituindo-se a expressão para V_w e a Eq. (B.31) na Eq. (B.40), obtém-se:

$$C_R = \left(\frac{A_0}{n.R_d.A}\right) \cdot \left[\frac{e^{-[\lambda.t + \frac{1}{n.R_d.A} \sum_{i=1}^3 I_i]}}{H}\right] \quad \forall t \in [t_f, t_t] \quad (\text{B.41})$$

B.1.6.3 Quando ocorre o transbordamento do repositório

Deve-se substituir na Eq. (B.40), a expressão $V_w = n.A.H_r$, juntamente com a Eq. (B.39). Assim, obtém-se:

$$C_R = \left(\frac{A_0}{n.R_d.A.H_r}\right) \cdot e^{-[\lambda.t + \frac{1}{n.R_d.A} \sum_{i=1}^3 I_i(t) + C_1^* \cdot (t-t_t)]} \quad \forall t \in [t_t, \infty] \quad (\text{B.42})$$

B.1.7 TAXA DE LIBERAÇÃO EM ATIVIDADE DO REPOSITÓRIO PARA O MEIO AMBIENTE

B.1.7.1 Geral

A taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente, \dot{A} , é obtida multiplicando-se a concentração em atividade da mistura (água + radionuclídeos), no interior do repositório, pela vazão volumétrica de mistura que sai do mesmo.

B.1.7.2 Situação em que não ocorre o transbordamento do repositório

A taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente, \dot{A} , pode ser determinada pela Eq. (5.49), ou seja:

$$\dot{A} = C_R \cdot (\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3) \quad (\text{B.43})$$

Substituindo-se as Eqs. (B.25), (B.26) e (B.41) na Eq. (B.43) obtém-se a seguinte equação:

$$\dot{A} = \alpha_3 \cdot \phi_1 \cdot \left[\frac{e^{-(\lambda \cdot t + \frac{1}{n \cdot R_d \cdot A} \cdot \sum_{i=1}^3 I_i)}}{H} \right] \quad \forall t \in [t_f, t_t] \quad (\text{B.44})$$

onde:

$$\alpha_3 = \frac{A_0 \cdot K_c}{n \cdot R_d \cdot A}$$

$$\phi_1 = \left(\frac{A}{E} \right) \cdot [H + E] + \left(\frac{b_1 + b_2}{L} \right) \cdot [H^2]$$

B.1.7.3 Quando ocorre o transbordamento do repositório

A taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente, \dot{A} , é determinada pela Eq. (5.51), ou seja:

$$\dot{A} = C_R \cdot [(1 - f_m) \cdot (\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3) + f_m \cdot \dot{Q}_1] \quad (\text{B.45})$$

Substituindo-se as Eqs. (B.25), (B.26) e (B.42) na Eq. (B.45), lembrando que neste caso $H = H_r$ e utilizando-se a hipótese (1), obtém-se:

$$\dot{A} = [\alpha_4 \cdot \phi_1(t_1) + \alpha_5] \cdot e^{-[\lambda \cdot t_1 + \frac{1}{n \cdot R_d \cdot A} \sum_{i=1}^3 I_i(t_1) + C_1^* \cdot (t - t_1)]} \quad \forall t \in [t_1, \infty) \quad (\text{B.46})$$

onde:

$$\alpha_4 = \frac{(1 - f_m) \cdot K_c}{n \cdot R_d \cdot A \cdot H_r};$$

$$\alpha_5 = \left(\frac{f_m \cdot F_d \cdot A_0}{n \cdot R_d \cdot H_r} \right) \cdot (\dot{q} + \dot{i}_r - \dot{e} - \dot{r});$$

$$\phi_1(t_1) = \left(\frac{A}{E} \right) \cdot [H_r + E] + \left(\frac{b_1 + b_2}{L} \right) \cdot [H_r^2].$$

B.1.8 CONCENTRAÇÃO EM ATIVIDADE NO PONTO DE DESCARGA NO AQUÍFERO

B.1.8.1 Situação em que não ocorre o transbordamento do repositório

A concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero, C_D , pode ser determinada utilizando-se a Eq. (5.55):

$$C_D = \frac{C_R \cdot (\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3)}{b_a \cdot H_a \cdot v_a} \quad (\text{B.47})$$

Substituindo-se as Eqs. (B.25), (B.26) na Eq. (B.41) obtém-se:

$$C_D = \alpha_6 \cdot \phi_1 \cdot \left[\frac{e^{-\left(\lambda \cdot t + \frac{1}{n \cdot R_d \cdot A} \cdot \sum_{i=1}^3 I_i\right)}}{H} \right] \quad \forall t \in [t_f, t_t] \quad (B.48)$$

onde:

$$\alpha_6 = \frac{\alpha_3}{b_a \cdot H_a \cdot v_a}$$

B.1.8.2 Quando ocorre o transbordamento do repositório

A concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero, C_D , pode ser determinada utilizando-se a Eq. (5.56):

$$C_D = \frac{C_R \cdot [(1 - f_m) \cdot (\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3) + f_m \cdot \dot{Q}_1]}{b_a \cdot H_a \cdot v_a} \quad (B.49)$$

Substituindo-se as Eqs. (B.25), (B.26) e (B.42) na Eq. (B.49), obtém-se:

$$C_D = \alpha_7 \cdot [\alpha_4 \cdot \phi_1(t_t) + \alpha_5] \cdot e^{-\left[\lambda \cdot t_t + \frac{1}{n \cdot R_d \cdot A} \cdot \sum_{i=1}^3 I_i(t_t) + C_1^* \cdot (t - t_t)\right]} \quad \forall t \in [t_t, \infty) \quad (B.50)$$

onde:

$$\alpha_7 = \left(\frac{1}{b_a \cdot H_a \cdot v_a} \right)$$

B.1.9 CONCENTRAÇÃO EM ATIVIDADE AO LONGO DO AQUÍFERO

B.1.9.1 Situação em que não ocorre o transbordamento do repositório

A concentração em atividade ao longo do aquífero, C_A , pode ser determinada utilizando-se a Eq. (5.68):

$$C_A = (0.5).C_D \cdot \text{Exp}\left[\left(\frac{v_{rx}}{2.D_{rx}}\right).x\right] \cdot \text{Exp}[-B^*.x] \cdot \text{erfd}\left[\frac{x - A^*.t}{2.\sqrt{D_{rx}.t}}\right] + (0.5).C_D \cdot \text{Exp}\left[\left(\frac{v_{rx}}{2.D_{rx}}\right).x\right] \cdot \text{Exp}[B^*.x] \cdot \text{erfd}\left[\frac{x + A^*.t}{2.\sqrt{D_{rx}.t}}\right] \quad (\text{B.51})$$

onde C_D é determinado pela Eq. (B.48).

B.1.9.2 Quando ocorre o transbordamento do repositório

A concentração em atividade ao longo do aquífero, C_A , pode ser determinada utilizando-se a Eq. (B.51), porém C_D tem que ser determinado utilizando-se a Eq. (B.50).

APÊNDICE C

C.1. DETERMINAÇÃO DAS INTEGRAIS I_1 , I_2 E I_3 OBTIDAS NO APÊNDICE B PARA O MODELO DETERMINÍSTICO 2

C.1.1 CÁLCULO DE I_1

No Apêndice B foi mostrado que a integral I_1 pode ser representada como:

$$I_1 = \int_{t_f}^t \frac{K_c \cdot A \cdot d\tau}{E} \quad (C.1)$$

onde:

A = área interna do teto ou da base do repositório, [m²];

E = espessura da base do repositório, [m];

K_c = condutividade hidráulica do concreto, [m/a];

t = instante de tempo, [a];

t_f = tempo de falha, [a].

Como os parâmetros K_c , A e E são constantes, a integral da Eq. (C.1) pode ser resolvida facilmente dando origem à seguinte equação:

$$I_1 = \frac{K_c \cdot A \cdot (t - t_f)}{E} \quad (C.2)$$

C.1.2 CÁLCULO DE I_2

A integral I_2 é mostrada no Apêndice B e pode ser representada como:

$$I_2 = \int_{t_f}^t \frac{K_c \cdot A \cdot d\tau}{H} \quad (C.3)$$

onde:

H = altura de coluna de líquido no interior do repositório, [m].

A altura de coluna de líquido no interior do repositório, H, para o modelo determinístico 2, foi obtida no Apêndice B. Ela pode ser representada pela seguinte equação:

$$H = \frac{h_{p1} \cdot \left\{ \left[-\left(\frac{a}{\beta}\right) + \frac{1}{H(t_f) - h_{p1}} \right] \cdot e^{-\beta \cdot (t - t_f)} + \left(\frac{a}{\beta}\right) \right\} + 1}{\left\{ \left[-\left(\frac{a}{\beta}\right) + \frac{1}{H(t_f) - h_{p1}} \right] \cdot e^{-\beta \cdot (t - t_f)} + \left(\frac{a}{\beta}\right) \right\}} \quad (C.4)$$

onde:

$$a = \frac{K_c \cdot (b_1 + b_2)}{n \cdot A \cdot L};$$

$$b = \frac{K_c \cdot A}{n \cdot A \cdot E};$$

$$c = -\frac{1}{f_r} [K_c - F_d \cdot (\dot{p} + \dot{i}_r - \dot{e} - r)];$$

$$\Delta = b^2 - 4 \cdot a \cdot c;$$

$$\beta = \sqrt{|\Delta|};$$

$$i = \sqrt{-1};$$

$$h_{p1} (\Delta > 0) = \frac{-b - \beta}{2 \cdot a};$$

b_1 = largura da base do repositório, [m];

b_2 = comprimento da base do repositório, [m];

\dot{e} = taxa de evapotranspiração, [m/a];

F_d = fator de degradação do teto do repositório ($0 \leq F_d \leq 1$);

n = porosidade da região interna do repositório;

$H(t_f)$ = altura de coluna de líquido no instante da falha do repositório, [m];

\dot{i}_r = taxa de irrigação no repositório, [m/a];

L = espessura das paredes do repositório, [m];

\dot{p} = taxa de precipitação pluviométrica, [m/a];

\dot{r} = vazão de água tangente à superfície do terreno (*surface runoff*), [m/a].

Substituindo-se a Eq. (C.4) na Eq. (C.3) obtém-se:

$$I_2 = K_c \cdot A \cdot \int_{t_f}^t \left\{ \frac{\left[-\left(\frac{a}{\beta}\right) + \frac{1}{H(t_f) - h_{p1}} \right] \cdot e^{-\beta \cdot (\tau - t_f)} + \left(\frac{a}{\beta}\right)}{h_{p1} \cdot \left[-\left(\frac{a}{\beta}\right) + \frac{1}{H(t_f) - h_{p1}} \right] \cdot e^{-\beta \cdot (\tau - t_f)} + \left(\frac{a}{\beta}\right) + 1} \right\} \cdot d\tau \quad (C.5)$$

A Eq. (C.5) pode ser colocada em uma forma mais compacta, ou seja:

$$I_2 = K_c \cdot A \cdot \int_{t_f}^t \left\{ \frac{(a_1 \cdot e^{-\beta \cdot (\tau - t_f)} + a_2)}{a_3 \cdot e^{-\beta \cdot (\tau - t_f)} + a_4} \right\} \cdot d\tau \quad (C.6)$$

onde:

$$a_1 = -\left(\frac{a}{\beta}\right) + \frac{1}{H(t_f) - h_{p1}}$$

$$a_2 = \left(\frac{a}{\beta}\right)$$

$$a_3 = h_{p1} \cdot \left[-\left(\frac{a}{\beta}\right) + \frac{1}{H(t_f) - h_{p1}} \right]$$

$$a_4 = \left[1 + h_{p1} \cdot \left(\frac{a}{\beta}\right) \right]$$

A Eq. (C.6) pode ser desmembrada como a soma de duas integrais, da seguinte maneira:

$$I_2 = K_c \cdot A \cdot \left\{ \int_{t_f}^t \left[\frac{(a_1 \cdot e^{-\beta \cdot (\tau - t_f)})}{a_3 \cdot e^{-\beta \cdot (\tau - t_f)} + a_4} \right] \cdot d\tau + \int_{t_f}^t \left[\frac{a_2}{a_3 \cdot e^{-\beta \cdot (\tau - t_f)} + a_4} \right] \cdot d\tau \right\} \quad (C.7)$$

Denominando-se $I_2^\bullet = \int_{t_f}^t \left[\frac{a_1 \cdot e^{-\beta \cdot (\tau - t_f)}}{a_3 \cdot e^{-\beta \cdot (\tau - t_f)} + a_4} \right] \cdot d\tau$, observa-se que esta integral pode ser resolvida fazendo-se a mudança de variável $u = a_3 \cdot e^{-\beta \cdot (\tau - t_f)} + a_4$, onde $du = -\beta \cdot a_3 \cdot e^{-\beta \cdot (\tau - t_f)} \cdot d\tau$. Assim observa-se que é válida a seguinte equação:

$$I_2^\bullet = \frac{a_1}{\beta \cdot a_3} \cdot \int_{t_f}^t \frac{\beta \cdot a_3 \cdot e^{-\beta \cdot (\tau - t_f)} \cdot d\tau}{a_3 \cdot e^{-\beta \cdot (\tau - t_f)} + a_4} \quad (C.8)$$

Substituindo-se u e du na Eq. (C.8) e resolvendo-se a integral obtém-se a seguinte equação:

$$I_2^\bullet = -\frac{a_1}{\beta \cdot a_3} \cdot \ln[a_3 \cdot e^{-\beta \cdot (\tau - t_f)} + a_4]_{t_f}^t \quad (C.9)$$

Aplicando-se os limites de integração à Eq. (C.9), obtém-se a equação:

$$I_2^\bullet = -\frac{a_1}{\beta \cdot a_3} \cdot \ln\left[\frac{a_3 \cdot e^{-\beta \cdot (t - t_f)} + a_4}{a_3 + a_4}\right] \quad (C.10)$$

De maneira análoga seja $I_2^{\bullet\bullet} = \int_{t_f}^t \frac{a_2 \cdot d\tau}{a_3 \cdot e^{-\beta \cdot (\tau - t_f)} + a_4}$. Multiplicando-se tanto o numerador como o denominador de $I_2^{\bullet\bullet}$ por $e^{\beta \cdot (\tau - t_f)}$, obtém-se a seguinte equação:

$$I_2^{\bullet\bullet} = \int_{t_f}^t \left[\frac{a_2 \cdot e^{\beta \cdot (\tau - t_f)}}{a_3 + a_4 \cdot e^{\beta \cdot (\tau - t_f)}} \right] \cdot d\tau \quad (C.11)$$

Fazendo-se a mudança de variável $u = a_3 + a_4 \cdot e^{\beta \cdot (\tau - t_f)}$, então $du = \beta \cdot a_4 \cdot e^{\beta \cdot (\tau - t_f)} \cdot d\tau$.

Substituindo-se estas expressões na Eq. (C.11) e resolvendo-a obtém-se:

$$I_2^{\bullet\bullet} = \frac{a_2}{\beta \cdot a_4} \cdot \ln[a_3 + a_4 \cdot e^{\beta \cdot (\tau - t_f)}]_{t_f}^t \quad (C.12)$$

Substituindo-se os limites de integração na Eq. (C.12), observa-se que:

$$I_2^{**} = \frac{a_2}{\beta \cdot a_4} \cdot \ln\left[\frac{a_3 + a_4 \cdot e^{\beta \cdot (t - t_f)}}{a_3 + a_4}\right] \quad (C.13)$$

Substituindo-se as Eqs. (C.10) e (C.13), na Eq. (C.7), obtém-se:

$$I_2 = \frac{K_c \cdot A}{\beta} \left[-\frac{a_1}{a_3} \cdot \ln\left(\frac{a_3 \cdot e^{-\beta \cdot (t - t_f)} + a_4}{a_3 + a_4}\right) + \frac{a_2}{a_4} \cdot \ln\left(\frac{a_3 + a_4 \cdot e^{\beta \cdot (t - t_f)}}{a_3 + a_4}\right) \right] \quad (C.14)$$

C.1.2 CÁLCULO DE I_3

Segundo o Apêndice B, a integral I_3 é representada pela equação:

$$I_3 = \int_{t_f}^t \frac{K_c \cdot (b_1 + b_2) \cdot H \cdot d\tau}{L} \quad (C.15)$$

onde:

H = altura de coluna de líquido no interior do repositório, [m].

Substituindo-se a Eq. (C.4) na Eq. (C.15) obtém-se:

$$I_3 = \frac{K_c \cdot (b_1 + b_2)}{L} \cdot \int_{t_f}^t \left\{ \frac{h_{p1} \cdot \left\{ \left[-\left(\frac{a}{\beta}\right) + \frac{1}{H(t_f) - h_{p1}} \right] \cdot e^{-\beta \cdot (\tau - t_f)} + \left(\frac{a}{\beta}\right) \right\} + 1}{\left\{ \left[-\left(\frac{a}{\beta}\right) + \frac{1}{H(t_f) - h_{p1}} \right] \cdot e^{-\beta \cdot (\tau - t_f)} + \left(\frac{a}{\beta}\right) \right\}} \right\} \cdot d\tau \quad (C.16)$$

A Eq. (C.16) pode ser colocada na seguinte forma compacta:

$$I_3 = \frac{K_c \cdot (b_1 + b_2)}{L} \cdot \int_{t_f}^t \left[\frac{(a_3 \cdot e^{-\beta \cdot (\tau - t_f)} + a_4)}{a_1 \cdot e^{-\beta \cdot (\tau - t_f)} + a_2} \right] \cdot d\tau \quad (C.17)$$

onde a_1 , a_2 , a_3 e a_4 já foram definidos na Eq. (C.6).

A integral da Eq. (C.17) pode ser decomposta nas integrais $I_3^\bullet = \int_{t_f}^t \left[\frac{a_3 \cdot e^{-\beta \cdot (\tau - t_f)}}{a_1 \cdot e^{-\beta \cdot (\tau - t_f)} + a_2} \right] \cdot d\tau$ e $I_3^{**} = \int_{t_f}^t \left[\frac{a_4 \cdot d\tau}{a_1 \cdot e^{-\beta \cdot (\tau - t_f)} + a_2} \right]$. O numerador e o denominador

da integral I_3^{**} podem ser multiplicados pela função $e^{\beta \cdot (\tau - t_f)}$, dando origem à expressão

$$I_3^{**} = \int_{t_f}^t \left[\frac{a_4 \cdot e^{\beta \cdot (\tau - t_f)}}{a_1 + a_2 \cdot e^{\beta \cdot (\tau - t_f)}} \right] \cdot d\tau .$$

Entretanto, deve-se observar que I_3^\bullet é semelhante a I_2^\bullet , e I_3^{**} a I_2^{**} . Assim, obtém-se:

$$I_3^\bullet = -\frac{a_3}{\beta \cdot a_1} \cdot \ln\left(\frac{a_1 \cdot e^{-\beta \cdot (t - t_f)} + a_2}{a_1 + a_2}\right) \quad (C.18)$$

$$I_3^{**} = \frac{a_4}{\beta \cdot a_2} \cdot \ln\left(\frac{a_1 + a_2 \cdot e^{\beta \cdot (t - t_f)}}{a_1 + a_2}\right) \quad (C.19)$$

Substituindo-se as Eqs. (C.18) e (C.19) na Eq. (C.17), chega-se a:

$$I_3 = \frac{K_c \cdot (b_1 + b_2)}{\beta \cdot L} \cdot \left[-\frac{a_3}{a_1} \cdot \ln\left(\frac{a_1 \cdot e^{-\beta \cdot (t - t_f)} + a_2}{a_1 + a_2}\right) + \frac{a_4}{a_2} \cdot \ln\left(\frac{a_1 + a_2 \cdot e^{\beta \cdot (t - t_f)}}{a_1 + a_2}\right) \right] \quad (C.20)$$

As expressões obtidas para as integrais I_1 , I_2 e I_3 são apresentadas na Tabela C.1.

Tabela C.1 – Resumo das equações para I_i

i	$I_i(t)$
1	$I_1(t) = \frac{K_c \cdot A \cdot (t - t_f)}{E}$
2	$I_2(t) = \frac{K_c \cdot A}{\beta} \left[-\frac{a_1}{a_3} \cdot \ln\left(\frac{a_3 \cdot e^{-\beta \cdot (t - t_f)} + a_4}{a_3 + a_4}\right) + \frac{a_2}{a_4} \cdot \ln\left(\frac{a_3 + a_4 \cdot e^{\beta \cdot (t - t_f)}}{a_3 + a_4}\right) \right]$
3	$I_3 = \frac{K_c \cdot (b_1 + b_2)}{\beta \cdot L} \cdot \left[-\frac{a_3}{a_1} \cdot \ln\left(\frac{a_1 \cdot e^{-\beta \cdot (t - t_f)} + a_2}{a_1 + a_2}\right) + \frac{a_4}{a_2} \cdot \ln\left(\frac{a_1 + a_2 \cdot e^{\beta \cdot (t - t_f)}}{a_1 + a_2}\right) \right]$

APÊNDICE D

D.1. MODELO ESTOCÁSTICO 1 (Solução Analítica)

D.1.1 GERAL

Neste apêndice é desenvolvido o modelo estocástico 1, com solução analítica e vazamento do tipo 1 (vazamento de material radioativo pela base e pelo teto do repositório).

D.1.2 HIPÓTESES

As hipóteses deste modelo são:

- 1) Considera-se que a função degradação do teto do repositório é constante, ou seja, $F_d(t) = F_d$;
- 2) Despreza-se a vazão volumétrica da fase líquida (radionuclídeo + água) que sai através das paredes laterais do repositório ($\dot{Q}_3 = 0$);
- 3) Considera-se que no instante da falha do repositório, t_f , a altura de coluna de líquido no interior do mesmo é igual a $H(t_f)$.

D.1.3 ALTURA DE COLUNA DE LÍQUIDO NO INTERIOR DO REPOSITÓRIO

D.1.3.1 Situação em que não ocorre o transbordamento do repositório

A altura de coluna de líquido no interior do repositório, X_i , é representada pela Eq. (5.72), ou seja:

$$dX_t = -[a.X_t^2 + b.X_t + c(t)].dt + \left(\frac{F_d(t)}{n}\right).dW_t \quad (D.1)$$

onde:

$$a = \frac{K_c.(b_1 + b_2)}{n.A.L}, [m^{-1}.a^{-1}];$$

$$b = \frac{K_c}{n.E}, [a^{-1}];$$

$$c(t) = \frac{1}{n}[K_c - F_d(t).(p_m + i_r - e - r)], [m/a];$$

A = área interna da base do repositório, [m²];

b₁ = largura da base do repositório, [m];

b₂ = comprimento da base do repositório, [m];

E = espessura da base do repositório, [m];

\dot{e} = taxa de evapotranspiração, [m/a];

F_d(t) = função degradação do teto do repositório (0 ≤ F_d(t) ≤ 1);

\dot{i}_r = taxa de irrigação no repositório, [m/a];

K_c = condutividade hidráulica do concreto, [m/a];

L = espessura das paredes do repositório, [m];

n = porosidade interna do repositório;

\dot{p}_m = taxa de precipitação pluviométrica média, [m/a];

\dot{r} = taxa de escoamento de água tangente à superfície do terreno (*surface runoff*), [m/a];

W_t = processo de Wiener ou movimento browniano padrão (EVANS, 2013), [m].

Utilizando-se as hipóteses (1) e (2) observa-se que F_d(t) = F_d e $\dot{Q}_3 = 0$. Com base no Capítulo 5 observa-se que a Eq. (D.1) pode ser simplificada dando origem à seguinte equação:

$$dX_t = -[b.X_t + c].dt + \left(\frac{F_d}{n}\right).dW_t \quad (D.2)$$

onde:

$$c = \frac{1}{n} [K_c - F_d \cdot (\dot{p}_m + \dot{i}_r - \dot{e} - \dot{r})]$$

A modelagem estocástica tem um grau de complexidade maior do que a determinística para o problema tratado nesta tese, devido aos conceitos e às ferramentas matemáticas envolvidas. Adicionalmente, sob o ponto de vista da engenharia é sempre recomendável a simplificação dos modelos matemáticos, desde que esta simplificação não altere significativamente os resultados obtidos com o modelo modificado.

Simplificar o modelo matemático no presente estudo significa desprezar, sempre que possível, os termos estocásticos que aparecem nas equações diferenciais obtidas da equação de Richards e da equação de transporte de soluto no meio poroso. A estratégia utilizada aqui é tentar maximizar a importância do termo estocástico, na equação diferencial em questão, e mesmo assim provar que ele pode ser descartado.

Com este objetivo, pode-se definir o número adimensional, N_{W_t} , como a razão entre o termo estocástico e o termo determinístico na Eq. (D.2), ou seja:

$$N_{W_t} = \left| \frac{\frac{F_d \cdot \Delta W_t}{n}}{-[b \cdot X_t + c] \cdot \Delta t} \right| \quad (D.3)$$

Será utilizado neste trabalho a condição: número adimensional < 1% para a eliminação do(s) termo(s) estocástico(s) em uma equação diferencial estocástica, partindo da premissa de que esse é um erro pequeno para a altura de coluna e a massa de radionuclídeo no interior do repositório.

O processo de Wiener, W_t , pode ser representado pela Eq. (4.11), que é aqui reproduzida como:

$$\Delta W_t = \sqrt{\Delta t} \cdot n_t \quad (D.4)$$

onde os n_t são número extraídos aleatoriamente de uma distribuição normal padrão, $N(0,1)$.

As unidades de ΔW_t e n_t na Eq. (D.4) são m e $m.(a)^{-0.5}$ [vide unidades da Eq. (D.2)], respectivamente.

Substituindo-se a Eq. (D.4) na Eq. (D.3) obtém-se a seguinte equação:

$$N_{w_t} = \left| \frac{F_d \cdot n_t}{-[b \cdot X_t + c] \cdot n \cdot \sqrt{\Delta t}} \right| \quad (D.5)$$

Substituindo-se as expressões $b = \frac{K_c}{n \cdot E}$ e $c = \frac{1}{n} [K_c - F_d \cdot (\dot{p}_m + \dot{i}_r - \dot{e} - \dot{r})]$ na Eq. (D.5), observa-se que:

$$N_{w_t} = \left| \frac{F_d \cdot n_t}{\left\{ \left(\frac{K_c}{E} \right) \cdot X_t + [K_c - F_d \cdot (\dot{p}_m + \dot{i}_r - \dot{e} - \dot{r})] \right\} \cdot \sqrt{\Delta t}} \right| \quad (D.6)$$

Na Tabela 6.1 são apresentados os valores de alguns parâmetros da Eq. (D.6) para o repositório de Abadia de Goiás, tais como: $\dot{e} = 1,4570 \text{ m/a}$; $E = 0,2 \text{ m}$; $F_d = 0,10$; $\dot{i}_r = 0$; $K_c = 3,15 \times 10^{-4} \text{ m/a}$; $\dot{p}_m = 1,5920 \text{ m/a}$ e $\dot{r} = 0$.

Para maximizar o valor de N_{w_t} , deve-se utilizar na Eq. (D.6) o valor máximo de n_t e os valores mínimos de X_t e Δt .

No caso de uma distribuição normal padrão e considerando-se a dispersão de $\pm 3\sigma$ (equivalendo a uma probabilidade de 99,7%), obtém-se um valor extremo de n_t igual a $\pm 3m.(a)^{-0.5}$.

Da Eq. (D.6), observa-se que quanto menor for o valor de Δt , maior será o valor de N_{w_t} e, conseqüente, maior será a importância do termo estocástico em relação ao termo determinístico.

Nesta tese, todos os resultados apresentados na seção 6.4 foram obtidos com os programas com modelagem estocástica (REPEA1, REPEN1 e REPEN2), utilizando-se um valor de Δt igual a $0,5 a$.

Assim, qualquer valor de Δt inferior a $0,5 a$ fará com que esta análise do número adimensional N_{w_t} seja conservadora. Devido a isso, foi escolhido um valor de Δt igual $10^{-2} a$.

O parâmetro X_t representa a altura de coluna de líquido na Eq. (D.6). Seu valor mínimo é 10^{-4} m (altura de coluna no instante da falha do repositório). Observa-se que não existe uma justificativa plausível para a utilização deste valor. Entretanto, deve-se utilizar um número muito pequeno, pois no instante da falha do repositório não existe água em seu interior. Porém, este número tem que ser maior do que 0, para que possa ser justificada a presença de um volume de água no interior do repositório e, conseqüentemente, a existência de uma concentração em massa ou em atividade em seu interior, no instante da falha do mesmo. Verifica-se, com o auxílio das Tabelas de 6.8 a 6.10, que este valor inicial de X_t tem pouca influência na determinação dos valores da altura de coluna de líquido no interior do repositório.

Adicionalmente, deve-se observar que pequenos valores de altura de coluna de líquido produzem valores muito baixos de concentração em atividade no aquífero, como mostrado nas Tabelas de 6.3, 6.4, 6.5, 6.6, 6.8, 6.9 a 6.10. De acordo com estas tabelas, os valores de concentração em atividade no aquífero são significativos apenas para alturas de coluna de líquido a partir de 1,21 m.

Assim, utilizando-se na Eq. (D.6) os valores $n_t = 3 \text{ m} \cdot (a)^{-0,5}$, $X_t = 1,21$ m (valor que maximiza N_{w_t}), $\Delta t = 10^{-2} a$, juntamente com os valores dos demais parâmetros obtidos da Tabela 6.1, obtém-se o valor $N_{w_t} = 265,86$. Este resultado mostra que o termo

estocástico não pode ser excluído da Eq. (D.2), pois sua contribuição no valor de X_t , calculado por esta equação, pode chegar a 99,6%.

Como n_t é um número escolhido aleatoriamente em uma distribuição normal padrão, então ele pode assumir qualquer valor no intervalo de $\pm 3\sigma$ (intervalo de $-3 \text{ m.(a)}^{-0,5}$ a $3 \text{ m.(a)}^{-0,5}$). Assim, se n_t for um número suficientemente pequeno, o termo determinístico será mais importante do que o termo estocástico, evidenciando que ele também não pode ser excluído da Eq. (D.2).

Desta maneira, fica evidente que a Eq. (D.2) não pode ser simplificada e assim, ela deve ser resolvida tal como está em sua forma original.

A Eq. (D.2) é uma equação diferencial estocástica linear de Ito (OKSENDAL, 2000; BRAUMANN, 2004; EVANS, 2013) sujeita à condição de valor inicial $X_{t_0} = H(t_f)$, para $t = t_0$. Ela pode ser resolvida analiticamente utilizando-se a solução geral representada pela Eq. (4.14), aqui reproduzida por comodidade, ou seja:

$$X_t = \Phi_{t,t_0} \cdot (X_{t_0} + \int_{t_0}^t [\alpha_2(s) - \beta_1(s) \cdot \beta_2(s)] \cdot \Phi_{s,t_0}^{-1} \cdot ds + \int_{t_0}^t \beta_2(s) \cdot \Phi_{s,t_0}^{-1} \cdot dW_s) \quad (D.7)$$

onde W_s é o processo estocástico de Wiener ou movimento browniano padrão (MBP) e

$$\Phi_{t,t_0} = \text{Exp} \left\{ \int_{t_0}^t \left[\alpha_1(s) - \frac{1}{2} (\beta_1(s))^2 \right] \cdot ds + \int_{t_0}^t \beta_1(s) \cdot dW_s \right\} \quad (D.8)$$

sendo a função Φ_{s,t_0}^{-1} representada pela equação:

$$\Phi_{s,t_0}^{-1} = \frac{1}{\Phi_{s,t_0}} \quad (D.9)$$

As integrais que aparecem nos membros direitos das Eqs. (D.7) e (D.8) são integrais de Riemann-Stieltjes (ANEVSKI, 2012) e de Ito (MISTURINI, 2010; SAUER, 2012), respectivamente.

A Eq. (D.7) representa a solução geral da forma linear da equação diferencial estocástica escalar de Ito, ou seja:

$$dX_t = [\alpha_1(t).X_t + \alpha_2(t)].dt + [\beta_1(t).X_t + \beta_2(t)].dW_t \quad (D.10)$$

A Eq. (D.2) é um caso particular da Eq. (D.10) quando $\alpha_1(t) = -b$, $\alpha_2(t) = -c$, $\beta_1(t) = 0$ e $\beta_2(t) = (\frac{F_d}{n})$. Substituindo-se estas expressões na Eq. (D.8) obtém-se:

$$\Phi_{t,t_0} = \text{Exp}[-b.(t - t_0)] \quad (D.11)$$

Substituindo-se a Eq. (D.11) na Eq. (D.9) observa-se que:

$$\Phi_{s,t_0}^{-1} = \text{Exp}[b.(t - t_0)] \quad (D.12)$$

Substituindo-se as Eqs. (D.11) e (D.12) na Eq. (D.7), juntamente com as expressões para $\alpha_1(t)$, $\alpha_2(t)$, $\beta_1(t)$ e $\beta_2(t)$, obtém-se a equação:

$$X_t = e^{-b.(t-t_0)} \{ X_{t_0} - (\frac{c}{b}).e^{b.(t-t_0)} + (\frac{c}{b}) + (\frac{F_d}{n}). \int_{t_0}^t e^{b.(s-t_0)} dW_s \} \quad (D.13)$$

que pode ser colocada na seguinte forma equivalente:

$$X_t = \{ [X_{t_0} + (\frac{c}{b})].e^{-b.(t-t_0)} - (\frac{c}{b}) \} + (\frac{F_d}{n}).e^{-b.(t-t_0)}. \int_{t_0}^t e^{b.(s-t_0)} dW_s \quad (D.14)$$

É importante frisar [vide hipótese (3)] que na Eq. (D.14) o tempo t_0 se refere ao instante de tempo em que ocorre a falha do repositório, representado pelo símbolo t_f e

X_{t_0} a altura de coluna de líquido no interior do repositório no instante desta falha, representado pelo símbolo $H(t_f)$. Assim, a Eq. (D.14) pode ser colocada na forma:

$$X_t = \left\{ \left[H(t_f) + \left(\frac{c}{b} \right) \right] e^{-b \cdot (t-t_f)} - \left(\frac{c}{b} \right) \right\} + \left(\frac{F_d}{n} \right) e^{-b \cdot (t-t_f)} \cdot \int_{t_f}^t e^{b \cdot (s-t_f)} dW_s \quad (D.15)$$

O termo que aparece entre chaves na Eq. (D.15) representa a parte determinística da altura de coluna de líquido no interior do repositório. Observa-se que, coerentemente, este termo é idêntico à Eq. (A.8), obtida no Apêndice A como solução da parte determinística da Eq. (D.2).

O outro termo do membro direito da Eq. (D.15) representa a parte estocástica da mesma.

A integral de Ito que aparece no membro direito da Eq. (D.15) pode ser resolvida da maneira descrita a seguir (MISTURINI, 2010; SAUER, 2012).

Seja um intervalo de tempo $[0, T]$ definido como:

$$0 \leq t_1 \leq t_2 \leq t_3 \dots \leq T$$

Para este intervalo, observa-se que a integral de Ito para um processo estocástico $X(t)$ pode ser representada como (MISTURINI, 2010; SAUER, 2012):

$$\int_0^T X(s) dW_s = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \sum_{i=1}^N X(t_{i-1}) \Delta W_i \right\} \quad (D.16)$$

onde $N = \frac{T}{\Delta t}$, $\Delta t = t_i - t_{i-1}$ e $\Delta W_i = n_i \cdot \sqrt{\Delta t}$.

Conforme mencionado anteriormente, os n_i são números extraídos aleatoriamente de uma distribuição normal padrão (distribuição normal com média 0 e variância 1), que é representada pelo símbolo $N(0,1)$.

Para subintervalos de tempo $\Delta t = \frac{T}{N}$, com comprimentos iguais entre si e com um valor de N suficientemente grande, observa-se que o limite quando $N \rightarrow \infty$ pode ser suprimido da Eq. (D.16). Assim:

$$\int_0^T X(s).dW_s = \sum_{i=1}^N X(t_{i-1}).n_i.\sqrt{\Delta t} \quad (D.17)$$

Para outro intervalo de tempo definido como:

$$t_f = t_0 \leq t_1 \leq t_2 \leq t_3 \dots \leq t \leq t_t \leq T$$

onde t_t é o tempo de transbordamento do repositório, observa-se que a Eq. (D.17) pode ser utilizada para um número de subintervalos $N_t = \frac{(t - t_f)}{\Delta t}$, de comprimentos iguais entre si. Assim, a Eq. (D.17) assume a seguinte forma:

$$\int_{t_f}^t X(s).dW_s = \sum_{i=1}^{N_t} X(t_{i-1}).n_i.\sqrt{\Delta t} \quad (D.18)$$

Deve-se observar que, na Eq. (D.18) quando $i = 1$ então $t = t_f$, e que o valor de N_t varia com o instante de tempo t considerado.

Substituindo-se a Eq. (D.18) na Eq. (D.15) e lembrando que neste caso $X(t) = e^{b.(t-t_f)}$, obtém-se a seguinte equação:

$$X_t = \left\{ [H(t_f) + \left(\frac{c}{b}\right)].e^{-b.(t-t_f)} - \left(\frac{c}{b}\right) \right\} + \left(\frac{F_d}{n}\right).(e^{-b.(t-t_f)}). \left(\sum_{i=1}^{N_t} e^{b.(t_{i-1})}.n_i \right).(\sqrt{\Delta t}) \quad (D.19)$$

O somatório que aparece no membro direito da Eq. (D.19) pode ser colocado na forma expandida como:

$$\sum_{i=1}^{N_t} e^{b \cdot (t_{i-1})} \cdot n_i = e^{b \cdot t_0} \cdot n_1 + e^{b \cdot t_1} \cdot n_2 + \dots + e^{b \cdot (t_{N_t-1})} \cdot n_{N_t} \quad (D.20)$$

Substituindo-se a expressão $N_t = \frac{(t - t_f)}{\Delta t}$ na Eq. (D.20) e lembrando que $t_0 = t_f$,

obtem-se a equação:

$$\sum_{i=1}^{N_t} e^{b \cdot (t_{i-1})} \cdot n_i = e^{b \cdot t_f} \cdot [n_1 + n_2 \cdot e^{b \cdot \Delta t} + n_3 \cdot e^{b \cdot 2\Delta t} + \dots + n_{N_t} \cdot e^{b \cdot (N_t-1) \cdot \Delta t}] \quad (D.21)$$

que pode ser colocada na forma compacta:

$$\sum_{i=1}^{N_t} e^{b \cdot (t_{i-1})} \cdot n_i = e^{b \cdot t_f} \cdot \sum_{i=1}^{N_t} n_i \cdot e^{b \cdot (i-1) \cdot \Delta t} \quad (D.22)$$

Substituindo-se a Eq. (D.22) na Eq. (D.19) obtém-se:

$$X_t = \left\{ \left[H(t_f) + \left(\frac{c}{b} \right) \right] \cdot e^{-b \cdot (t-t_f)} - \left(\frac{c}{b} \right) \right\} + \left(\frac{F_d}{n} \right) \cdot (e^{-b \cdot (t-2 \cdot t_f)}) \cdot (\sqrt{\Delta t}) \cdot \left(\sum_{i=1}^{N_t} n_i \cdot e^{b \cdot (i-1) \cdot \Delta t} \right) \quad (D.23)$$

$$\forall t \in [t_f, t_t]$$

D.1.3.2 Quando ocorre o transbordamento do repositório

A altura de coluna de líquido no interior do repositório, X_t , é representada pela Eq. (5.73), ou seja:

$$dX_t = \left(\frac{F_d(t)}{n} \right) \cdot dW_t \quad (D.24)$$

A Eq. (D.24) pode ser colocada na seguinte forma integral:

$$\int_{X_{t_t}}^{X_t} dX_t = \int_{t_t}^t \left(\frac{F_d(t)}{n} \right) \cdot dW_t \quad (D.25)$$

onde t_t é o tempo no qual ocorre o transbordamento do repositório e X_{t_t} é a altura de coluna correspondente, igual à altura interna do repositório, H_r .

Da hipótese (1) observa que $F_d(t) = F_d$. Assim, substituindo-se as expressões $F_d(t) = F_d$ e $X_{t_t} = H_r$ na Eq. (D.25), obtém-se:

$$X_t = H_r + \left(\frac{F_d}{n} \right) \int_{t_t}^t dW_t \quad (D.26)$$

A integral que aparece no membro direito da Eq. (D.26) é uma integral de Ito do processo estocástico de Wiener, que pode ser resolvida de maneira análoga ao caso anterior.

Assim, considerando-se o seguinte intervalo de tempo:

$$t_t \leq t_{t+1} \leq t_{t+2} \leq t_{t+3} \dots \leq t \leq T$$

observa-se que a Eq. (D.22) pode ser utilizada para um número de subintervalos

$N_t = \frac{(t - t_t)}{\Delta t}$, de comprimentos iguais entre si e com um valor de N_t suficientemente

grande. Desta maneira, a integral de Ito da Eq. (D.26) pode ser representada como:

$$\int_{t_t}^t dW_t = \sum_{i=1}^{N_t} n_i \cdot \sqrt{\Delta t} \quad (D.27)$$

Substituindo-se a Eq. (D.27) na Eq. (D.26) obtém-se a seguinte equação:

$$X_t = H_r + \left(\frac{F_d}{n} \right) \cdot \sum_{i=1}^{N_t} n_i \cdot \sqrt{\Delta t} \quad \forall t \in [t_t, \infty) \quad (D.28)$$

D.1.4 DETERMINAÇÃO DO INSTANTE DE TEMPO MÉDIO EM QUE SE INICIA O TRANSBORDAMENTO DO REPOSITÓRIO

O instante de tempo médio em que se inicia o transbordamento do repositório pode ser determinado tanto sob o ponto de vista matemático como sob o ponto de vista físico.

Sob o ponto de vista matemático, deve-se primeiramente obter a esperança matemática ou média para os dois membros da Eq. (D.23), no instante de tempo τ .

Assim:

$$E(X_t) = E\left(\left\{[H(t_f) + \left(\frac{c}{b}\right)].e^{-b.(t-t_f)} - \left(\frac{c}{b}\right)\right\} + \left(\frac{F_d}{n}\right).(e^{-b.(t-2.t_f)}).(\sqrt{\Delta t}).\left(\sum_{i=1}^{N_t} n_i .e^{b.(i-1).\Delta t}\right)\right) \quad (D.29)$$

Se X_i são variáveis aleatórias e c_i são constantes, então a média da variável aleatória Y , representada pela equação (MONTGOMERY & RUNGER, 1999):

$$Y = c_1.X_1 + c_2.X_2 + \dots + c_n.X_n \quad (D.30)$$

é igual a:

$$E(Y) = c_1.E(X_1) + c_2.E(X_2) + \dots + c_n.E(X_n) \quad (D.31)$$

A parte estocástica da Eq. (D.29), representada pelo segundo termo do membro direito desta equação, é um processo estocástico, que no instante de tempo τ , é uma variável aleatória. Já a parte determinística da Eq. (D.29), representada pelo primeiro termo de seu membro direito, pode ser considerada um tipo particular de variável aleatória, que é constante no referido instante de tempo τ .

Com base nas Eqs. (D.29) e (D.31), observa-se que a média do membro direito da Eq. (D.29) pode ser desmembrada na soma das médias do termo determinístico e do termo estocástico desta equação. Assim:

$$E(X_t) = E\left(\left\{[H(t_f) + \left(\frac{C}{b}\right)]e^{-b \cdot (t-t_f)} - \left(\frac{C}{b}\right)\right\}\right) + E\left(\left(\frac{F_d}{n}\right) \cdot (e^{-b \cdot (t-2t_f)}) \cdot (\sqrt{\Delta t}) \cdot \left(\sum_{i=1}^{N_t} n_i \cdot e^{b \cdot (i-1) \cdot \Delta t}\right)\right) \quad (D.32)$$

A média da parte determinística da Eq. (D.32) é igual a ela mesma, uma vez que este termo só possui um valor no instante de tempo τ . Assim,

$$E\left(\left\{[H(t_f) + \left(\frac{C}{b}\right)]e^{-b \cdot (t-t_f)} - \left(\frac{C}{b}\right)\right\}\right) = \left\{[H(t_f) + \left(\frac{C}{b}\right)]e^{-b \cdot (t-t_f)} - \left(\frac{C}{b}\right)\right\} \quad (D.33)$$

Os termos $\left(\frac{F_d}{n}\right)$, $e^{-b \cdot (t-2t_f)}$, $\sqrt{\Delta t}$ e $\sum_{i=1}^{N_t} n_i \cdot e^{b \cdot (i-1) \cdot \Delta t}$, que compõem a parte estocástica da Eq. (D.32), são independentes entre si. Desta maneira, a média obtida para a parte estocástica da Eq. (D.32), no instante de tempo τ , pode ser desmembrada como um produto das médias individuais de cada termo, ou seja:

$$E\left(\left(\frac{F_d}{n}\right) \cdot (e^{-b \cdot (t-2t_f)}) \cdot (\sqrt{\Delta t}) \cdot \left(\sum_{i=1}^{N_t} n_i \cdot e^{b \cdot (i-1) \cdot \Delta t}\right)\right) = E\left(\frac{F_d}{n}\right) \cdot E(e^{-b \cdot (t-2t_f)}) \cdot E(\sqrt{\Delta t}) \cdot E\left(\sum_{i=1}^{N_t} n_i \cdot e^{b \cdot (i-1) \cdot \Delta t}\right) \quad (D.34)$$

Como os termos $\left(\frac{F_d}{n}\right)$, $e^{-b \cdot (t-2t_f)}$ e $\sqrt{\Delta t}$ são determinísticos, suas médias no instante de tempo τ são iguais aos seus próprios valores. Assim, $E\left(\left(\frac{F_d}{n}\right)\right) = \left(\frac{F_d}{n}\right)$, $E(e^{-b \cdot (t-2t_f)}) = e^{-b \cdot (t-2t_f)}$ e $E(\sqrt{\Delta t}) = \sqrt{\Delta t}$.

Substituindo-se estas expressões na Eq. (D.34), obtém-se:

$$E\left(\left(\frac{F_d}{n}\right) \cdot (e^{-b \cdot (t-2t_f)}) \cdot (\sqrt{\Delta t}) \cdot \left(\sum_{i=1}^{N_t} n_i \cdot e^{b \cdot (i-1) \cdot \Delta t}\right)\right) = \left(\frac{F_d}{n}\right) \cdot (e^{-b \cdot (t-2t_f)}) \cdot (\sqrt{\Delta t}) \cdot E\left(\sum_{i=1}^{N_t} n_i \cdot e^{b \cdot (i-1) \cdot \Delta t}\right) \quad (D.35)$$

Já o termo $\sum_{i=1}^{N_t} n_i \cdot e^{b \cdot (i-1) \cdot \Delta t}$ depende do parâmetro n_i , cujos valores são obtidos por escolhas aleatórias a partir de uma distribuição normal padrão, $N(0,1)$. Assim, observa-se que se forem feitas N escolhas aleatórias para o instante de tempo τ , então:

$$E\left(\sum_{i=1}^{N_t} n_i \cdot e^{b \cdot (i-1) \cdot \Delta t}\right) = \frac{{}^1\left(\sum_{i=1}^{N_t} n_i \cdot e^{b \cdot (i-1) \cdot \Delta t}\right) + {}^2\left(\sum_{i=1}^{N_t} n_i \cdot e^{b \cdot (i-1) \cdot \Delta t}\right) + \dots + {}^N\left(\sum_{i=1}^{N_t} n_i \cdot e^{b \cdot (i-1) \cdot \Delta t}\right)}{N} \quad (D.36)$$

ou na forma aberta equivalente:

$$E\left(\sum_{i=1}^{N_t} n_i \cdot e^{b \cdot (i-1) \cdot \Delta t}\right) = \frac{({}^1 n_1 + e^{b \cdot \Delta t} \cdot {}^1 n_2 + \dots + e^{b \cdot (N_t-1) \cdot \Delta t} \cdot {}^1 n_{N_t})}{N} + \frac{({}^2 n_1 + e^{b \cdot \Delta t} \cdot {}^2 n_2 + \dots + e^{b \cdot (N_t-1) \cdot \Delta t} \cdot {}^2 n_{N_t})}{N} + \dots + \frac{({}^N n_1 + e^{b \cdot \Delta t} \cdot {}^N n_2 + \dots + e^{b \cdot (N_t-1) \cdot \Delta t} \cdot {}^N n_{N_t})}{N} \quad (D.37)$$

que equivale ainda a:

$$E\left(\sum_{i=1}^{N_t} n_i \cdot e^{b \cdot (i-1) \cdot \Delta t}\right) = \left(\frac{{}^1 n_1 + {}^2 n_1 + \dots + {}^N n_1}{N}\right) + e^{b \cdot \Delta t} \cdot \left(\frac{{}^1 n_2 + {}^2 n_2 + \dots + {}^N n_2}{N}\right) + \dots + e^{b \cdot (N_t-1) \cdot \Delta t} \cdot \left(\frac{{}^1 n_{N_t} + {}^2 n_{N_t} + \dots + {}^N n_{N_t}}{N}\right) \quad (D.38)$$

ou

$$E\left(\sum_{i=1}^{N_t} n_i \cdot e^{b \cdot (i-1) \cdot \Delta t}\right) = \sum_{i=1}^{N_t} e^{b \cdot (i-1) \cdot \Delta t} \cdot E(n_i) \quad (D.39)$$

Mas, por outro lado, como a função n_i obedece a uma distribuição normal padrão, $N(0,1)$, então sua média no instante de tempo τ é igual a 0 (zero), ou seja, $E(n_i) = 0$. Substituindo-se esta expressão na Eq. (D.39), obtém-se:

$$E\left(\sum_{i=1}^{N_i} n_i \cdot e^{b \cdot (i-1) \cdot \Delta t}\right) = 0 \quad (D.40)$$

Substituindo-se a Eq. (D.40) na Eq. (D.35), juntamente com as expressões $E\left(\frac{F_d}{n}\right) = \left(\frac{F_d}{n}\right)$, $E(e^{-b \cdot (t-2 \cdot t_f)}) = e^{-b \cdot (t-2 \cdot t_f)}$ e $E(\sqrt{\Delta t}) = \sqrt{\Delta t}$, obtém-se:

$$E\left(\left(\frac{F_d}{n}\right) \cdot (e^{-b \cdot (t-2 \cdot t_f)}) \cdot (\sqrt{\Delta t}) \cdot \left(\sum_{i=1}^{N_i} n_i \cdot e^{b \cdot (i-1) \cdot \Delta t}\right)\right) = 0 \quad (D.41)$$

Substituindo-se as Eqs. (D.33) e (D.41) na Eq. (D.29) obtém-se:

$$E(X_t) = \left\{ \left[H(t_f) + \left(\frac{c}{b}\right) \right] \cdot e^{-b \cdot (t-t_f)} - \left(\frac{c}{b}\right) \right\} \quad (D.42)$$

A Eq. (D.42) mostra que a média, em um instante de tempo τ , da solução estocástica da Eq. (D.2) é igual à solução da parte determinística desta mesma equação. Este resultado está coerente com a abordagem apresentada em ALLEN (2011).

Assim, para o cálculo do instante de tempo médio em que se inicia o transbordamento do repositório, t_t , no modelo estocástico, pode-se utilizar a Eq. (A.9), desenvolvida para o modelo determinístico, ou seja:

$$t_t = t_f - \left(\frac{1}{b}\right) \cdot \ln \left[\frac{H_r + \left(\frac{c}{b}\right)}{H(t_f) + \left(\frac{c}{b}\right)} \right] \quad (D.43)$$

Este mesmo resultado pode ser obtido de uma maneira bem mais simples raciocinando sob o ponto de vista físico.

Na seção 4.10.3 foi mencionado que, para $i = 1, 2, 3, \dots$, a variação do processo de Wiener, $\Delta W_i = W_{t_i} - W_{t_{i-1}}$, em um intervalo de tempo, $\Delta t_i = t_i - t_{i-1}$, pode ser representada como $\Delta W_i = \sqrt{\Delta t_i} \cdot n_i$, onde os n_i são números escolhidos aleatoriamente de uma distribuição normal padrão, $N(0,1)$.

Na Fig. D.1 é apresentado o gráfico de uma curva (de uma família de curvas) que mostra o comportamento do processo de Wiener, $W(t)$, com o tempo, para Δt_i constante e igual a Δt .

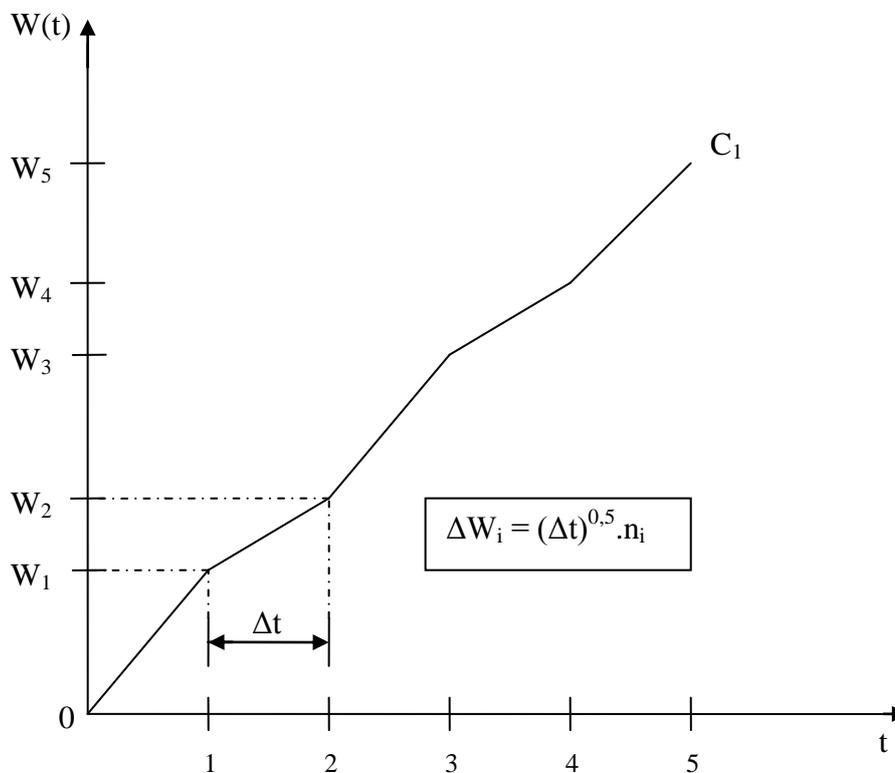


Figura D.1 – Representação de uma curva que obedece ao processo de Wiener

De acordo com a explicação anterior e com a Fig. D.1, o valor de $W(1)$ é obtido pela equação $W(1) = W(0) + (\sqrt{\Delta t}) \cdot n_1$, onde por definição $W(0) = 0$. De maneira análoga, o valor de $W(2)$ é obtido como $W(2) = W(1) + (\sqrt{\Delta t}) \cdot n_2$, e assim sucessivamente. Como os valores de n_i são números obtidos aleatoriamente de uma distribuição normal padrão (vide Fig. D.2), então significa que para cada número n_i escolhido aleatoriamente, existe a mesma probabilidade de ser escolhido o seu simétrico

- n_i (a probabilidade de sair o número 2, por exemplo, é igual à probabilidade de sair o seu simétrico -2, e assim por diante, como pode ser visto na Fig. D.2).

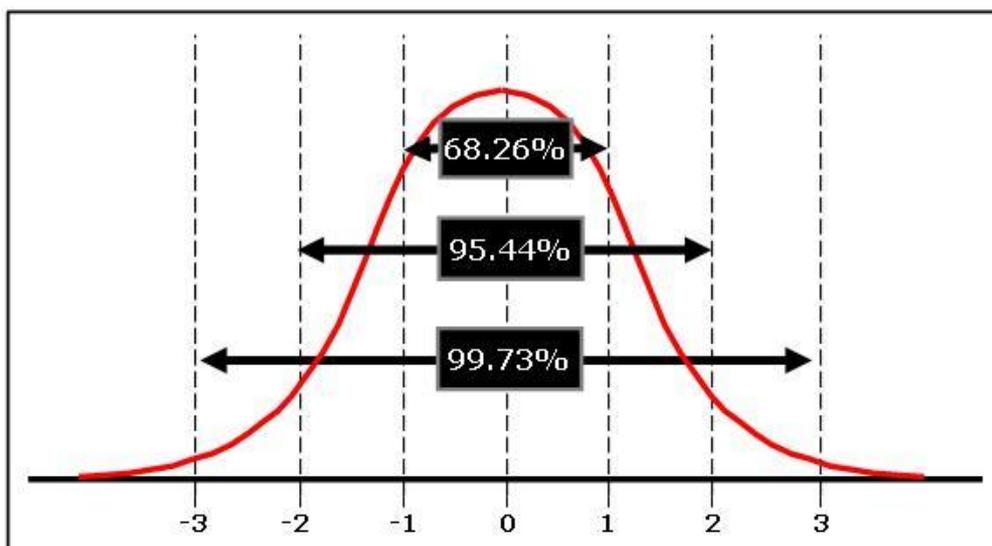


Figura D.2 – Distribuição normal padrão

Desta forma, pode-se afirmar que se o processo de Wiener for representado por um número suficientemente grande de curvas, então, para toda curva que obedecer ao processo de Wiener existirá outra, simétrica à anterior, que também obedecerá a este processo estocástico, conforme mostrado na Fig. D.3.

Assim, na determinação da média do processo de Wiener, cada curva que representa este processo é anulada pela curva simétrica equivalente, fazendo com que esta média seja nula. Com esta argumentação, se justifica a validade da Eq. (D.41) e a utilização da Eq. (D.42) para a representação da média do processo estocástico X_t . Consequentemente, a Eq. (D.43) pode ser utilizada para a determinação do instante de tempo médio em que se inicia o transbordamento do repositório no modelo estocástico.

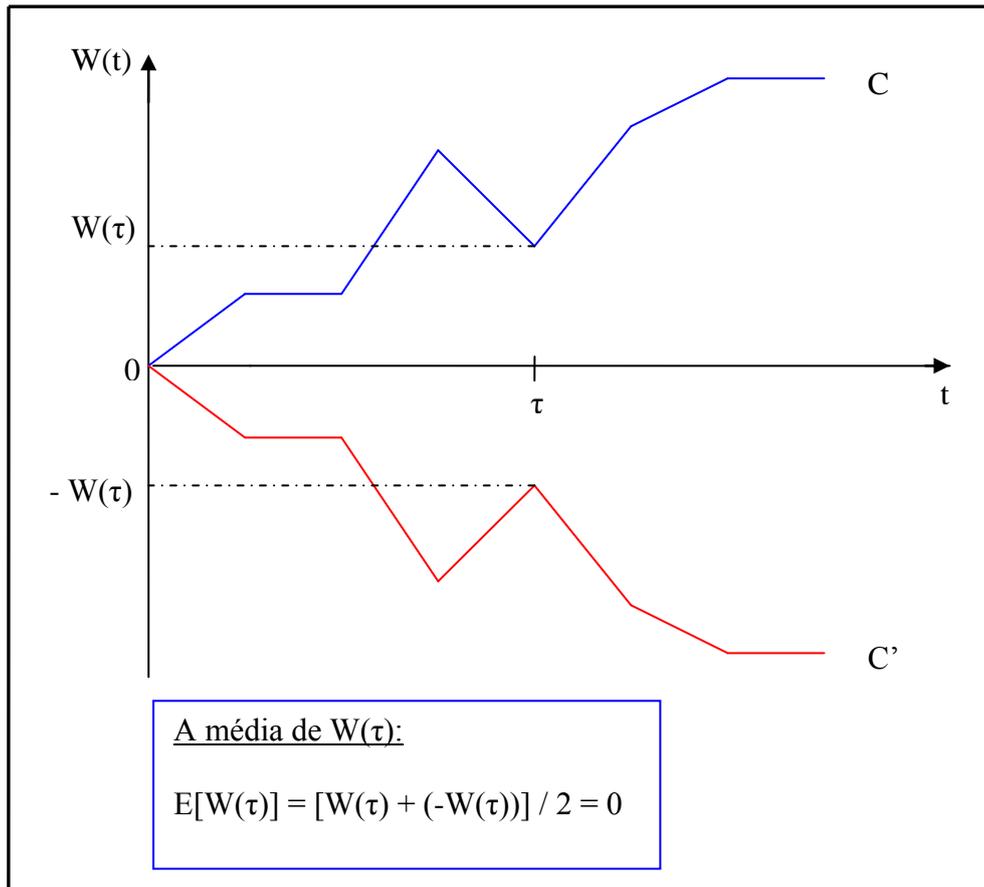


Figura D.3 – A curva C e a sua curva simétrica C'

D.1.5 MASSA DE RADIONUCLÍDEO NA FASE LÍQUIDA NO REPOSITÓRIO

D.1.5.1 Geral

A massa de radionuclídeo na fase líquida no repositório, M_{rw} , deve ser determinada considerando-se as situações de não-transbordamento e transbordamento do repositório.

D.1.5.2 Situação em que não ocorre o transbordamento do repositório

A massa de radionuclídeo na fase líquida no repositório, M_{rw} , pode ser determinada utilizando-se a Eq. (5.43), que é aqui repetida por comodidade:

$$\frac{dM_{rw}}{dt} = - \left[\lambda + \left(\frac{\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3}{n.A.R_d.H} \right) \right] M_{rw} \quad (D.44)$$

onde R_d é o coeficiente de retardo definido na Eq. (5.28).

Utilizando-se a hipótese (2) observa-se que $\dot{Q}_3 = 0$. Substituindo-se esta expressão na Eq. (D.44) obtém-se:

$$\frac{dM_{rw}}{dt} = - \left[\lambda + \left(\frac{\dot{Q}_2}{n.A.R_d.H} \right) \right] M_{rw} \quad (D.45)$$

A vazão volumétrica da fase líquida (água + radionuclídeos) que sai pela base do repositório, \dot{Q}_2 , é representada pela Eq. (5.24), ou seja:

$$\dot{Q}_2 = K_c . A . \left(\frac{H+E}{E} \right) \quad (D.46)$$

Substituindo-se a Eq. (D.46) na Eq. (D.45) obtém-se:

$$\frac{dM_{rw}}{dt} = - \left[\lambda + \frac{K_c}{n.R_d.E} + \frac{K_c}{n.R_d.H} \right] M_{rw} \quad (D.47)$$

Conforme mostrado na Eq. (5.74), a altura de coluna de líquido no modelo estocástico é representada como:

$$H = \bar{H} + \Delta H \quad (D.48)$$

onde:

\bar{H} = parte determinística, [m];

ΔH = parte estocástica, [m].

Definindo-se o ruído colorido não-gaussiano 1, ε_1 , pela equação:

$$\varepsilon_1 = \frac{1}{H} - \frac{1}{\bar{H}} \quad (\text{D.49})$$

observa-se que:

$$\frac{1}{H} = \varepsilon_1 + \frac{1}{\bar{H}} \quad (\text{D.50})$$

Substituindo-se a Eq. (D.50) na Eq. (D.47) obtém-se a seguinte equação:

$$\frac{dM_{rw}}{dt} = - \left[\lambda + \frac{K_c}{n.R_d.E} + \frac{K_c}{n.R_d.\bar{H}} \right] M_{rw} - \left(\frac{K_c}{n.R_d} \right) M_{rw} \cdot \varepsilon_1 \quad (\text{D.51})$$

Em analogia com o ruído branco gaussiano, o ruído colorido não-gaussiano 1, ε_1 , pode ser representado pela expressão:

$$\varepsilon_1 = \frac{dW_{1t}}{dt} \quad (\text{D.52})$$

onde W_{1t} é um processo estocástico compatível com a definição de ε_1 pelas Eqs. (D.49) e (D.52) e está na unidade $m^{-1}.a$.

Substituindo-se a Eq. (D.52) na Eq. (D.51) obtém-se:

$$\frac{dM_{rw}}{dt} = - \left[\lambda + \frac{K_c}{n.R_d.E} + \frac{K_c}{n.R_d.\bar{H}} \right] M_{rw} - \left(\frac{K_c}{n.R_d} \right) M_{rw} \cdot \frac{dW_{1t}}{dt} \quad (\text{D.53})$$

ou

$$dM_{rw} = - \left[\lambda + \frac{K_c}{n.R_d.E} + \frac{K_c}{n.R_d.\bar{H}} \right] M_{rw} \cdot dt - \left(\frac{K_c}{n.R_d} \right) M_{rw} \cdot dW_{1t} \quad (\text{D.54})$$

Utilizando-se a simbologia do cálculo estocástico (OKSENDAL, 2000) observa-se que:

$$dX_t = - \left[\lambda + \frac{K_c}{n.R_d.E} + \frac{K_c}{n.R_d.H} \right].X_t.dt - \left(\frac{K_c}{n.R_d} \right).X_t.dW_{1t} \quad (D.55)$$

A altura de coluna determinística, \bar{H} , que aparece na Eq. (D.55) é determinada com a utilização da Eq. (A.8).

A importância do termo estocástico na Eq. (D.55) pode ser avaliada utilizando-se o número adimensional, $N_{w_{1t}}$, definido pela seguinte equação:

$$N_{w_{1t}} = \left| \frac{\left(\frac{K_c}{n.R_d} \right). \Delta W_{1t}}{\left[\lambda + \frac{K_c}{n.R_d.E} + \frac{K_c}{n.R_d.H} \right]. \Delta t} \right| \quad (D.56)$$

Dividindo-se o numerador e o denominador da Eq. (D.56) pela expressão $\left(\frac{K_c}{n.R_d} \right)$, obtém-se:

$$N_{w_{1t}} = \left| \frac{\Delta W_{1t}}{\left[\frac{\lambda.n.R_d}{K_c} + \frac{1}{E} + \frac{1}{H} \right]. \Delta t} \right| \quad (D.57)$$

Substituindo-se a Eq. (D.49) na Eq. (D.52) obtém-se a seguinte equação:

$$\Delta W_{1t} = \left[\frac{1}{H} - \frac{1}{\bar{H}} \right]. \Delta t \quad (D.58)$$

Substituindo-se a Eq. (D.58) na Eq. (D.57) observa-se que:

$$N_{w_{1t}} = \left| \frac{\left[\frac{1}{H} - \frac{1}{\bar{H}} \right]}{\left[\frac{\lambda.n.R_d}{K_c} + \frac{1}{E} + \frac{1}{H} \right]} \right| \quad (D.59)$$

O coeficiente de retardo, R_d , é definido na Eq. (5.28) pela expressão $R_d = 1 + \frac{\rho \cdot k_d}{n}$, onde k_d , n e ρ representam respectivamente o coeficiente de distribuição, a porosidade e a massa específica do meio.

Se em vez da massa específica do meio (sólido + líquido), ρ , for mais conveniente se utilizar a massa específica do sólido (sem líquido), ρ_s , então a expressão anterior poderá ser substituída pela expressão equivalente, $R_d = 1 + \rho_s \cdot k_d \left(\frac{1-n}{n}\right)$ (ALVES & PASSOS, 2003). Assim, substituindo-se nesta expressão os valores $k_d = 0,463 \text{ m}^3/\text{kg}$; $n = 0,10$ e $\rho_s = 2,81 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$, apresentados na Tabela 6.1, obtém-se $R_d = 11710,27$.

Substituindo-se estes valores de n e R_d na Eq. (D.59), juntamente com os valores $E = 0,2 \text{ m}$; $K_c = 3,15 \times 10^{-4} \text{ m/a}$; $\Delta t = 10^{-2} \text{ a}$ e $\lambda = 2,31 \times 10^{-2} \text{ a}^{-1}$, apresentados na Tabela 6.1, obtém-se a equação:

$$N_{w_{it}} = \left| \frac{\left[\frac{1}{H} - \frac{1}{\bar{H}}\right]}{\left[8,5880 \times 10^4 + \frac{1}{\bar{H}}\right]} \right| \quad (\text{D.60})$$

Observa-se como o auxílio da Eq. (D.60) que o valor de $N_{w_{it}}$ será máximo quando \bar{H} for máximo e H for mínimo. O valor máximo de \bar{H} é igual a 4,38 m e o valor mínimo de H é 1,21 m.

Substituindo-se estes valores na Eq. (D.60) obtém-se $N_{w_{it}} = 6,9647 \times 10^{-6}$ ou $N_{w_{it}} = 6,9647 \times 10^{-4} \%$, indicando que o termo estocástico pode ser desprezado na Eq. (D.55).

Desta forma, a Eq. (D.55) pode ser simplificada, para conter apenas a sua parte determinística. Ou seja:

$$dX_t = - \left[\lambda + \frac{K_c}{n.R_d.E} + \frac{K_c}{n.R_d.H} \right].X_t .dt \quad (D.61)$$

A Eq. (D.61) possui solução analítica, representada pela Eq. (A.26), que é aqui reproduzida como:

$$X_t = \left(\frac{M_0}{R_d} \right) \cdot \{ (e^{-[\beta_1 \cdot (t-t_f) + \lambda \cdot t_f]}) \cdot [1 + \beta_3 \cdot (1 - e^{b \cdot (t-t_f)})] \}^{\beta_2} \quad \forall t \in [t_f, t_i] \quad (D.62)$$

Esta solução é obtida considerando-se a condição inicial $X_{t_0} = M_{rw}(t_f)$, onde $M_{rw}(t_f)$ representa a massa de radionuclídeo na fase líquida no repositório, no instante da falha do mesmo, t_f . O símbolo M_0 representa a massa de radionuclídeo no instante do fechamento do repositório, antes da ocorrência do acidente.

Os significados de todos os termos da Eq. (D.62) são apresentados no Apêndice A.

D.1.5.3 Quando ocorre o transbordamento do repositório

A massa de radionuclídeo na fase líquida no repositório, M_{rw} , pode ser determinada utilizando-se a Eq. (5.44), ou seja:

$$\frac{dM_{rw}}{dt} = - \left[\lambda + \left(\frac{\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3 + \dot{Q}_4}{R_d \cdot n \cdot A \cdot H} \right) \right] \cdot M_{rw} \quad (D.63)$$

Substituindo-se a Eq. (5.27) na Eq. (D.63) obtém-se:

$$\frac{dM_{rw}}{dt} = - \left[\lambda + \left(\frac{(1 - f_m) \cdot (\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3) + f_m \cdot \dot{Q}_1}{R_d \cdot n \cdot A \cdot H} \right) \right] \cdot M_{rw} \quad (D.64)$$

Da hipótese (2) observa-se que $\dot{Q}_3 = 0$. Substituindo-se esta expressão na Eq. (D.64) obtém-se:

$$\frac{dM_{rw}}{dt} = - \left[\lambda + \frac{(1-f_m) \cdot \dot{Q}_2 + f_m \cdot \dot{Q}_1}{R_d \cdot n \cdot A \cdot H} \right] \cdot M_{rw} \quad (D.65)$$

Substituindo-se a Eq. (D.50) na Eq. (D.65) obtém-se:

$$\frac{dM_{rw}}{dt} = - \left[\lambda + \frac{(1-f_m) \cdot \dot{Q}_2 + f_m \cdot \dot{Q}_1}{R_d \cdot n \cdot A \cdot \bar{H}} \right] \cdot M_{rw} - \left[\frac{(1-f_m) \cdot \dot{Q}_2 + f_m \cdot \dot{Q}_1}{R_d \cdot n \cdot A} \right] \cdot M_{rw} \cdot \varepsilon_1 \quad (D.66)$$

Na modelagem estocástica, observa-se com relação a Eq. (5.70) que:

$$\dot{Q}_1 = F_d(t) \cdot A \cdot (\dot{p}_m + \dot{i}_r - \dot{e} - \dot{r}) + F_d(t) \cdot A \cdot \varepsilon \quad (D.67)$$

onde ε é o ruído branco gaussiano.

Utilizando-se $F_d(t) = F_d$ (hipótese (1)) na Eq. (D.67), observa-se que:

$$\dot{Q}_1 = \dot{Q}_{1m} + \Delta \dot{Q}_1 \quad (D.68)$$

onde:

$$\dot{Q}_{1m} = F_d \cdot A \cdot (\dot{p}_m + \dot{i}_r - \dot{e} - \dot{r})$$

$$\Delta \dot{Q}_1 = F_d \cdot A \cdot \varepsilon$$

Ao se substituir a Eq. (D.68) na Eq. (D.66), observa-se que:

$$\begin{aligned} \frac{dM_{rw}}{dt} = & - \left[\lambda + \frac{(1-f_m) \cdot \dot{Q}_2 + f_m \cdot \dot{Q}_{1m}}{R_d \cdot n \cdot A \cdot \bar{H}} \right] \cdot M_{rw} - \left[\frac{f_m \cdot F_d}{R_d \cdot n \cdot \bar{H}} \right] \cdot M_{rw} \cdot \varepsilon - \\ & \left[\frac{(1-f_m) \cdot \dot{Q}_2 + f_m \cdot \dot{Q}_{1m}}{R_d \cdot n \cdot A} \right] \cdot M_{rw} \cdot \varepsilon_1 - \left[\frac{f_m \cdot F_d}{R_d \cdot n} \right] \cdot M_{rw} \cdot \varepsilon \cdot \varepsilon_1 \end{aligned} \quad (D.69)$$

Substituindo-se a Eq. (D.48) na Eq. (D.46) obtém-se a seguinte equação:

$$\dot{Q}_2 = K_c \cdot A \cdot \left(\frac{\bar{H} + \Delta H + E}{E} \right) \quad (D.70)$$

Mas após o transbordamento do repositório, observa-se que $\bar{H} = H_r$. Assim, a Eq. (D.70) se transforma na equação:

$$\dot{Q}_2 = K_c \cdot A \cdot \left(\frac{H_r + \Delta H + E}{E} \right) \quad (D.71)$$

Substituindo-se a Eq. (D.71) na Eq. (D.69) observa-se que:

$$\begin{aligned} \frac{dM_{rw}}{dt} = & - \left[\lambda + \frac{(1-f_m) \cdot K_c \cdot A \cdot (H_r + E) + E \cdot f_m \cdot \dot{Q}_{lm}}{R_d \cdot n \cdot A \cdot H_r \cdot E} \right] \cdot M_{rw} - \left[\frac{f_m \cdot F_d}{R_d \cdot n \cdot H_r} \right] \cdot M_{rw} \cdot \varepsilon - \\ & \left[\frac{(1-f_m) \cdot K_c \cdot A \cdot (H_r + E) + E \cdot f_m \cdot \dot{Q}_{lm}}{R_d \cdot n \cdot A \cdot E} \right] \cdot M_{rw} \cdot \varepsilon_1 - \left[\frac{f_m \cdot F_d}{R_d \cdot n} \right] \cdot M_{rw} \cdot \varepsilon \cdot \varepsilon_1 - \\ & \left[\frac{(1-f_m) \cdot K_c}{R_d \cdot n \cdot E} \left(1 + \frac{1}{H_r} \right) \right] \cdot \Delta H \end{aligned} \quad (D.72)$$

Seja o ruído colorido não-gaussiano 2, ε_2 , definido pela seguinte equação:

$$\varepsilon_2 = \Delta H = \frac{dW_{2t}}{dt} \quad (D.73)$$

Substituindo-se a Eq. (D.73) na Eq. (D.72) obtém-se:

$$\begin{aligned} \frac{dM_{rw}}{dt} = & - \left[\lambda + \frac{(1-f_m) \cdot K_c \cdot A \cdot (H_r + E) + E \cdot f_m \cdot \dot{Q}_{lm}}{R_d \cdot n \cdot A \cdot H_r \cdot E} \right] \cdot M_{rw} - \left[\frac{f_m \cdot F_d}{R_d \cdot n \cdot H_r} \right] \cdot M_{rw} \cdot \varepsilon - \\ & \left[\frac{(1-f_m) \cdot K_c \cdot A \cdot (H_r + E) + E \cdot f_m \cdot \dot{Q}_{lm}}{R_d \cdot n \cdot A \cdot E} \right] \cdot M_{rw} \cdot \varepsilon_1 - \\ & \left[\frac{(1-f_m) \cdot K_c}{R_d \cdot n \cdot E} \left(1 + \frac{1}{H_r} \right) \right] \cdot M_{rw} \cdot \varepsilon_2 - \\ & \left[\frac{f_m \cdot F_d}{R_d \cdot n} \right] \cdot M_{rw} \cdot \varepsilon \cdot \varepsilon_1 \end{aligned} \quad (D.74)$$

O ruído branco gaussiano, ε , pode ser representado pela equação (BRAUMANN, 2004 e 2005):

$$\varepsilon = \frac{dW_t}{dt} \quad (D.75)$$

onde, de acordo com ROOS (2007), W_t é o processo estocástico de Wiener ou movimento browniano padrão (MBP).

Substituindo-se as Eqs. (D.52), (D.73) e (D.75) na Eq. (D.74) e utilizando-se a simbologia do cálculo estocástico (OKSENDAL, 2000), obtém-se a seguinte equação:

$$\begin{aligned} dX_t = & - \left[\lambda + \frac{(1-f_m).K_c.A.(H_r + E) + E.f_m.\dot{Q}_{1m}}{R_d.n.A.H_r.E} \right].X_t.dt - \left[\frac{f_m.F_d}{R_d.n.H_r} \right].X_t.dW_t - \\ & \left[\frac{(1-f_m).K_c.A.(H_r + E) + E.f_m.\dot{Q}_{1m}}{R_d.n.A.E} \right].X_t.dW_{1t} - \\ & \left[\frac{(1-f_m).K_c}{R_d.n.E} \left(1 + \frac{1}{H_r} \right) \right].X_t.dW_{2t} - \\ & \left[\frac{f_m.F_d}{R_d.n} \right].X_t.dW_t.dW_{1t} \end{aligned} \quad (D.76)$$

Como pode ser visto em MOVELLAN (2011), o produto de diferenciais como no caso do último termo do membro direito da Eq. (D.76) é esperado no estudo de equações diferenciais estocásticas.

A importância dos termos estocásticos na Eq. (D.76) pode ser avaliada com a utilização dos números adimensionais N_{W_t} , $N_{W_{1t}}$, $N_{W_{2t}}$ e $N_{W_t W_{1t}}$ que serão definidos a seguir.

Seja o número adimensional N_{W_t} definido pela equação:

$$N_{W_t} = \left| \frac{\left[\frac{f_m.F_d}{R_d.n.H_r} \right].\Delta W_t}{\left[\lambda + \frac{(1-f_m).K_c.A.(H_r + E) + E.f_m.\dot{Q}_{1m}}{R_d.n.A.H_r.E} \right].\Delta t} \right| \quad (D.77)$$

Multiplicando-se o numerador e denominador da Eq. (D.77) pelo fator $R_d.n.H_r$ e substituindo-se a Eq. (D.4) nesta equação, obtém-se:

$$N_{w_t} = \left| \frac{f_m \cdot F_d \cdot n_t}{[\lambda \cdot R_d \cdot n \cdot H_r + \frac{(1-f_m) \cdot K_c \cdot A \cdot (H_r + E) + E \cdot f_m \cdot \dot{Q}_{1m}}{A \cdot E}] \cdot \sqrt{\Delta t}} \right| \quad (D.78)$$

Na definição da Eq. (D.68) foi mostrado que $\dot{Q}_{1m} = F_d \cdot A \cdot (\dot{p}_m + \dot{i}_r - \dot{e} - \dot{r})$. Substituindo-se nesta expressão os valores $A = 1,1760 \times 10^3 \text{ m}^2$; $F_d = 0,10$; $\dot{p}_m = 1,5920 \text{ m/a}$; $\dot{i}_r = 0$; $\dot{e} = 1,4570 \text{ m/a}$ e $\dot{r} = 0$, apresentados na Tabela 6.1, obtém-se o valor $\dot{Q}_{1m} = 15,876 \text{ m}^3/\text{a}$.

Na seção 1.5.2 foi determinado o valor do coeficiente de retardo R_d . O valor encontrado foi $R_d = 11710,27$.

Substituindo-se na Eq. (D.78) os valores de A , F_d , \dot{Q}_{1m} e R_d mencionados anteriormente, juntamente com os valores $E = 0,2 \text{ m}$; $f_m = 0,05$; $H_r = 4,38 \text{ m}$; $K_c = 3,15 \times 10^{-4} \text{ m/a}$; $n = 0,10$ e $\lambda = 2,31 \times 10^{-2} \text{ a}^{-1}$, também apresentados na Tabela 6.1, obtém-se a seguinte equação:

$$N_{w_t} = \left| \frac{[4,2198 \times 10^{-5}] \cdot n_t}{\sqrt{\Delta t}} \right| \quad (D.79)$$

O máximo valor de N_{w_t} ocorrerá quando n_t for máximo ou mínimo, e quando Δt for mínimo.

O valor mínimo considerado para Δt nos modelos numéricos é 10^{-2} a . Já o valor extremo para n_t em uma distribuição normal padrão e considerando-se o intervalo de $\pm 3\sigma$ (equivalendo a uma probabilidade de 99,7%) é igual a $\pm 3(a)^{0.5}$. Substituindo-se estes valores na Eq. (D.79), obtém-se $N_{w_t} = 1,2660 \times 10^{-3}$ ou $N_{w_t} = 0,1266\%$, indicando que o termo estocástico que contém o processo de Wiener pode ser desprezado na Eq. (D.79), pois $N_{w_t} < 1\%$.

A importância do termo contendo o processo estocástico W_{1t} na Eq. (D.76) pode ser avaliada, definindo-se o número adimensional $N_{W_{1t}}$ da seguinte forma:

$$N_{W_{1t}} = \left| \frac{\left[\frac{(1-f_m).K_c.A.(H_r + E) + E.f_m.\dot{Q}_{1m}}{R_d.n.A.E} \right].\Delta W_{1t}}{\left[\lambda + \frac{(1-f_m).K_c.A.(H_r + E) + E.f_m.\dot{Q}_{1m}}{R_d.n.A.H_r.E} \right].\Delta t} \right| \quad (D.80)$$

Substituindo-se os valores dos parâmetros, com exceção apenas de ΔW_{1t} e Δt , na Eq. (D.80), obtém-se:

$$N_{W_{1t}} = \left| (2,7827 \times 10^{-4}) \cdot \left(\frac{\Delta W_{1t}}{\Delta t} \right) \right| \quad (D.81)$$

Substituindo-se a Eq. (D.58) na Eq. (D.81) obtém-se a equação:

$$N_{W_{1t}} = \left| (2,7827 \times 10^{-4}) \cdot \left(\frac{1}{H} - \frac{1}{\bar{H}} \right) \right| \quad (D.82)$$

Substituindo-se os valores $H = 1,21$ m e $\bar{H} = 4,38$ m na Eq. (D.82), obtém-se o valor $N_{W_{1t}} = 1,6642 \times 10^{-4}$ ou $N_{W_{1t}} = 1,6642 \times 10^{-2} \%$, indicando que a contribuição do termo estocástico que contém o processo W_{1t} pode ser desprezada na Eq. (D.76).

A contribuição do termo estocástico contendo o processo W_{2t} , na Eq. (D.76), é avaliada considerando-se o número adimensional $N_{W_{2t}}$, definido como:

$$N_{W_{2t}} = \left| \frac{\left[\frac{(1-f_m).K_c}{R_d.n.E} \left(1 + \frac{1}{H_r} \right) \right].\Delta W_{2t}}{\left[\lambda + \frac{(1-f_m).K_c.A.(H_r + E) + E.f_m.\dot{Q}_{1m}}{R_d.n.A.H_r.E} \right].\Delta t} \right| \quad (D.83)$$

Substituindo-se os valores dos diversos parâmetros na Eq. (D.83), obtém-se:

$$N_{W_{2t}} = \left| (6,7936 \times 10^{-5}) \cdot \left(\frac{\Delta W_{2t}}{\Delta t} \right) \right| \quad (D.84)$$

Substituindo-se a Eq. (D.48) na Eq. (D.73) observa-se que:

$$\frac{\Delta W_{2t}}{\Delta t} = H - \bar{H} \quad (D.85)$$

Substituindo-se a Eq. (D.85) na Eq. (D.84) obtém-se:

$$N_{W_{2t}} = \left| (6,7937 \times 10^{-5}) \cdot (H - \bar{H}) \right| \quad (D.86)$$

Substituindo-se os valores $H = 1,21$ m e $\bar{H} = 4,38$ m na Eq. (D.86), observa-se que $N_{W_{2t}} = 2,1536 \times 10^{-4}$ ou $N_{W_{2t}} = 2,1536 \times 10^{-2} \%$. Este resultado mostra que o termo estocástico contendo o processo W_{2t} também pode ser excluído da Eq. (D.76).

A importância do último termo do membro direito da Eq. (D.76) é avaliada utilizando-se o seguinte número adimensional:

$$N_{W_t W_{1t}} = \left| \frac{\left[\frac{f_m \cdot F_d}{R_d \cdot n} \right] \cdot \Delta W_t \cdot \Delta W_{1t}}{\left[\lambda + \frac{(1 - f_m) \cdot K_c \cdot A \cdot (H_r + E) + E \cdot f_m \cdot \dot{Q}_{1m}}{R_d \cdot n \cdot A \cdot H_r \cdot E} \right] \cdot \Delta t} \right| \quad (D.87)$$

Substituindo-se os valores de alguns parâmetros na Eq. (D.87) obtém-se:

$$N_{W_t W_{1t}} = \left| 1,8483 \times 10^{-4} \cdot \left(\frac{\Delta W_t \cdot \Delta W_{1t}}{\Delta t} \right) \right| \quad (D.88)$$

Substituindo-se as Eqs. (D.4) e (D.58) na Eq. (D.88), obtém-se:

$$N_{W_t W_{1t}} = \left| 1,8483 \times 10^{-4} (n_t \cdot \sqrt{\Delta t}) \cdot \left(\frac{1}{H} - \frac{1}{\bar{H}} \right) \right| \quad (D.89)$$

Substituindo-se os valores $n_t = 3 \text{ m.a}^{-0.5}$, $\Delta t = 10^{-2} \text{ a}$, $H = 1,21 \text{ m}$ e $\bar{H} = 4,38 \text{ m}$ na Eq. (D.89) obtém-se o valor $N_{w_t w_t} = 3,3165 \times 10^{-5}$ ou $N_{w_t w_t} = 3,3165 \times 10^{-3} \%$, indicando que o último termo do membro direito da Eq. (D.76) pode ser desprezado.

Assim, fica evidente que todos os termos estocásticos da Eq. (D.76) podem ser desprezados, sem provocar impactos significativos na precisão desta equação, que se resume apenas à sua parte determinística:

$$dX_t = - \left[\lambda + \frac{(1-f_m).K_c.A.(H_r + E) + E.f_m.\dot{Q}_{1m}}{R_d.n.A.H_r.E} \right].X_t.dt \quad (D.90)$$

A Eq. (D.90) foi resolvida analiticamente no Apêndice A, para a condição de valor inicial $X_{t_0} = M_{rw}(t_0)$, e a solução é representada pela Eq. (A.32), que é aqui reproduzida como:

$$X_t = \left(\frac{M_0}{R_d} \right) \cdot \{ (e^{-[\beta_1.(t-t_r) + \lambda.t_r + C_1^*. (t-t_r)]}) \cdot [1 + \beta_3.(1 - e^{b.(t-t_r)})] \}^{\beta_2} \quad \forall t \in [t_r, \infty) \quad (D.91)$$

Para o entendimento dos diversos termos que aparecem na Eq. (D.91), deve-se recorrer ao Apêndice A.

D.1.6 CONCENTRAÇÃO EM ATIVIDADE DE RADIONUCLÍDEO NA FASE LÍQUIDA NO REPOSITÓRIO

D.1.6.1 Geral

A concentração em atividade na fase líquida no repositório, C_R , é definida como a razão entre a atividade desta fase e o volume da mesma.

D.1.6.2 Situação em que não ocorre o transbordamento do repositório

A concentração em atividade na fase líquida no repositório, C_R , é determinada utilizando-se a Eq. (5.45), ou seja:

$$C_R = \left(\frac{A_0}{M_0}\right) \cdot \left(\frac{M_{rw}}{V_w}\right) \quad (D.92)$$

onde:

A_0 = Atividade de um determinado radionuclídeo no interior do repositório no instante $t = 0$, [Bq];

M_0 = Massa de um determinado radionuclídeo no interior do repositório no instante $t = 0$, [kg];

O valor de M_{rw} , na Eq. (D.92), é determinado com o auxílio da Eq. (D.62) e V_w com a utilização da expressão $V_w = n.A.H$. Nesta expressão, a altura de coluna de líquido no repositório, H , é determinada com o auxílio da Eq. (D.23).

D.1.6.3 Quando ocorre o transbordamento do repositório

Os valores de M_{rw} são determinados com a utilização da Eq. (D.91). Já os valores de V_w são determinados pela expressão $V_w = n.A.H$, utilizando-se os valores de H gerados pela Eq. (D.28).

D.1.7 TAXA DE LIBERAÇÃO EM ATIVIDADE DO REPOSITÓRIO PARA O MEIO AMBIENTE

D.1.7.1 Geral

A taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente, \dot{A} , é obtida multiplicando-se a concentração em atividade da mistura (água + radionuclídeos), no interior do repositório, pela vazão volumétrica de mistura que sai do mesmo.

D.1.7.2 Situação em que não ocorre o transbordamento do repositório

A taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente, \dot{A} , pode ser determinada pela Eq. (5.49), ou seja:

$$\dot{A} = C_R \cdot (\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3) \quad (D.93)$$

Da hipótese (2) observa-se que $\dot{Q}_3 = 0$ e conseqüentemente a Eq. (D.96) se resume a:

$$\dot{A} = C_R \cdot \dot{Q}_2 \quad (D.94)$$

Substituindo-se a Eq. (D.46) na Eq. (D.94) obtém-se:

$$\dot{A} = (K_c \cdot A) \cdot \left(\frac{H+E}{E}\right) \cdot C_R \quad \forall t \in [t_f, t_i] \quad (D.95)$$

onde H e C_R são determinados com o auxílio das Eqs. (D.23) e (D.92).

D.1.7.3 Quando ocorre o transbordamento do repositório

A taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente, \dot{A} , é determinada pela Eq. (5.51), ou seja:

$$\dot{A} = C_R \cdot [(1 - f_m) \cdot (\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3) + f_m \cdot \dot{Q}_1] \quad (D.96)$$

Da hipótese (2) observa-se que $\dot{Q}_3 = 0$. Assim, a Eq. (D.96) assume uma forma mais simples:

$$\dot{A} = C_R \cdot [(1 - f_m) \cdot \dot{Q}_2 + f_m \cdot \dot{Q}_1] \quad (D.97)$$

Utilizando-se a hipótese (1) na Eq. (D.67) observa-se que:

$$\dot{Q}_1 = F_d \cdot A \cdot (\dot{p}_m + \dot{i}_r - \dot{e} - \dot{r}) + F_d \cdot A \cdot \varepsilon \quad (D.98)$$

Substituindo-se as Eqs. (D.71), (D.73) e (D.98) na Eq. (D.97), obtém-se a expressão para a taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente, \dot{A} , ou seja:

$$\dot{A} = \left[\frac{(1 - f_m) \cdot K_c \cdot A}{E} \right] \cdot (H_r + E + \varepsilon_2) + (f_m \cdot F_d \cdot A) \cdot [(\dot{p}_m + \dot{i}_r - \dot{e} - \dot{r}) + \varepsilon] \cdot C_R \quad (D.99)$$

$$\forall t \in [t_t, \infty)$$

onde C_R é determinada com o auxílio da Eq. (D.92).

D.1.8 CONCENTRAÇÃO EM ATIVIDADE NO PONTO DE DESCARGA NO AQUÍFERO

D.1.8.1 Situação em que não ocorre o transbordamento do repositório

A concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero, C_D , pode ser determinada utilizando-se a Eq. (5.55):

$$C_D = \frac{C_R \cdot (\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3)}{b_a \cdot H_a \cdot v_a} \quad (D.100)$$

Da hipótese (2) observa-se que $\dot{Q}_3 = 0$. Assim, a Eq. (D.100) se reduz à seguinte equação:

$$C_D = \frac{C_R \cdot \dot{Q}_2}{b_a \cdot H_a \cdot v_a} \quad (D.101)$$

Substituindo-se as Eqs. (D.71) e (D.73) na Eq. (D.101) obtém-se:

$$C_D = \left(\frac{K_c \cdot A}{b_a \cdot H_a \cdot v_a \cdot E} \right) \cdot (H_r + E + \varepsilon_2) \cdot C_R \quad \forall t \in [t_f, t_t] \quad (D.102)$$

D.1.8.2 Quando ocorre o transbordamento do repositório

A concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero, C_D , pode ser determinada utilizando-se a Eq. (5.56):

$$C_D = \frac{C_R \cdot [(1 - f_m) \cdot (\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3) + f_m \cdot \dot{Q}_1]}{b_a \cdot H_a \cdot v_a} \quad (D.103)$$

Como $\dot{Q}_3 = 0$ [hipótese (2)], então a Eq. (D.103) se reduz a:

$$C_D = \frac{C_R \cdot [(1-f_m) \cdot \dot{Q}_2 + f_m \cdot \dot{Q}_1]}{b_a \cdot H_a \cdot v_a} \quad (D.104)$$

Substituindo-se as Eqs. (D.71), (D.73) (D.98) na Eq. (D.104) obtém-se:

$$C_D = \left[\frac{(1-f_m) \cdot K_c \cdot A}{b_a \cdot H_a \cdot v_a \cdot E} \right] \cdot (H_r + E + \varepsilon_2) + \left(\frac{f_m \cdot F_d \cdot A}{b_a \cdot H_a \cdot v_a} \right) \cdot [(p_m + i_r - e - r) + \varepsilon] \cdot C_R \quad (D.105)$$

$$\forall t \in [t_t, \infty)$$

D.1.9 CONCENTRAÇÃO EM ATIVIDADE AO LONGO DO AQUÍFERO

D.1.9.1 Situação em que não ocorre o transbordamento do repositório

A concentração em atividade ao longo do aquífero, C_A , pode ser determinada utilizando-se a Eq. (5.68):

$$C_A = (0.5) \cdot C_D \cdot \text{Exp}\left[\left(\frac{v_{rx}}{2 \cdot D_{rx}}\right) \cdot x\right] \cdot \text{Exp}[-B^* \cdot x] \cdot \text{erfc}\left[\frac{x - A^* \cdot t}{2 \cdot \sqrt{D_{rx} \cdot t}}\right] +$$

$$(0.5) \cdot C_D \cdot \text{Exp}\left[\left(\frac{v_{rx}}{2 \cdot D_{rx}}\right) \cdot x\right] \cdot \text{Exp}[B^* \cdot x] \cdot \text{erfc}\left[\frac{x + A^* \cdot t}{2 \cdot \sqrt{D_{rx} \cdot t}}\right] \quad (D.106)$$

onde C_D é determinado pela Eq. (D.102).

D.1.9.2 Quando ocorre o transbordamento do repositório

A concentração em atividade ao longo do aquífero, C_A , pode ser determinada utilizando-se a Eq. (D.106), porém C_D tem que ser determinado utilizando-se a Eq. (D.105).

APÊNDICE E

E.1. MODELO ESTOCÁSTICO 2 (Solução Numérica)

E.1.1 GERAL

Este apêndice trata do desenvolvimento do modelo estocástico 2, com solução numérica e vazamento do tipo 2 (vazamento de material radioativo pela base, teto e paredes laterais do repositório).

E.1.2 HIPÓTESES

As hipóteses deste modelo são:

- 1) Considera-se constante a função degradação do teto do repositório, ou seja, $F_d(t) = F_d$;
- 2) Considera-se que no instante da falha do repositório, t_f , a altura de coluna de líquido no interior do mesmo é igual a $H(t_f)$;

E.1.3 ALTURA DE COLUNA DE LÍQUIDO NO INTERIOR DO REPOSITÓRIO

E.1.3.1 Situação em que não ocorre o transbordamento do repositório

A altura de coluna de líquido no interior do repositório, X_t , é representada pela Eq. (5.72), ou seja:

$$dX_t = -[a.X_t^2 + b.X_t + c(t)].dt + \left(\frac{F_d(t)}{n}\right).dW_t \quad (E.1)$$

onde:

$$a = \frac{K_c \cdot (b_1 + b_2)}{n \cdot A \cdot L}, [m^{-1} \cdot a^{-1}];$$

$$b = \frac{K_c}{n \cdot E}, [a^{-1}];$$

$$c(t) = \frac{1}{n} [K_c - F_d(t) \cdot (\dot{p}_m + \dot{i}_r - \dot{e} - \dot{r})], [m/a];$$

A = área interna da base do repositório, [m²];

b₁ = largura da base do repositório, [m];

b₂ = comprimento da base do repositório, [m];

E = espessura da base do repositório, [m];

\dot{e} = taxa de evapotranspiração, [m/a];

F_d(t) = função degradação do teto do repositório (0 ≤ F_d(t) ≤ 1);

\dot{i}_r = taxa de irrigação no repositório, [m/a];

K_c = condutividade hidráulica do concreto, [m/a];

L = espessura das paredes do repositório, [m];

n = porosidade da região interna do repositório;

\dot{p}_m = taxa de precipitação pluviométrica média, [m/a];

\dot{r} = taxa de escoamento de água tangente à superfície do terreno (*surface runoff*), [m/a];

t_f = instante de tempo em que ocorre a falha do repositório, [a];

t_t = instante de tempo em que ocorre o transbordamento do repositório, [a];

W_t = processo de Wiener ou movimento browniano padrão (EVANS, 2013), [m].

Utilizando-se a hipótese (1) observa-se que F_d(t) = F_d. Assim, a Eq. (E.1) assume a seguinte forma:

$$dX_t = -[a \cdot X_t^2 + b \cdot X_t + c] \cdot dt + \left(\frac{F_d}{n}\right) \cdot dW_t \quad (E.2)$$

onde:

$$c = \frac{1}{n} \cdot [K_c - F_d \cdot (\dot{p}_m + \dot{i}_r - \dot{e} - \dot{r})].$$

Seguindo-se a mesma estratégia, apresentada no Apêndice D, de se definir um número adimensional para avaliar a importância do termo estocástico na Eq. (E.2), pode-se mostrar que este termo não pode ser excluído desta equação. Desta maneira, a Eq. (E.2) deve ser resolvida em sua forma original.

A Eq. (E.2) é uma equação diferencial estocástica não-linear de Ito (KLOEDEN & PLATEN, 1999), com ruído aditivo (vide seção 4.4.5) e sujeita à condição de valor inicial $X_{t_0} = H(t_f)$, para $t = t_0$ [vide hipótese (2)]. Ela pode ser resolvida numericamente pelos métodos de Euler-Maruyama, Milstein e Runge-Kutta (KLOEDEN & PLATEN, 1999).

Por apresentar ruído aditivo, as soluções numéricas da Eq. (E.2), obtidas com os métodos de Euler-Maruyama e de Milstein, se equivalem. Aqui é utilizado o método de Euler-Maruyama por ser o mais simples dos mencionados anteriormente.

E.1.3.2 Quando ocorre o transbordamento do repositório

A altura de coluna de líquido no interior do repositório, X_t , é representada pela Eq. (5.73), ou seja:

$$dX_t = \left(\frac{F_d(t)}{n}\right) \cdot dW_t \quad (E.3)$$

Utilizando-se a hipótese (1), $F_d(t) = F_d$, e integrando-se os dois membros da Eq. (E.3), desde o tempo de transbordamento, t_s , até um tempo t qualquer, obtém-se:

$$X_t = X_{t_s} + \left(\frac{F_d}{n}\right) \cdot \int_{t_s}^t dW_t \quad (E.4)$$

onde X_{t_t} representa a altura de coluna de líquido no instante do transbordamento do repositório. Seu valor é igual à altura interna do repositório H_r , ou seja, $X_{t_t} = H_r$.

Substituindo-se esta expressão na Eq. (E.4), observa-se que:

$$X_t = H_r + \left(\frac{F_d}{n}\right) \int_{t_t}^t dW_t \quad (E.5)$$

A integral que aparece na Eq. (E.5) é conhecida como integral estocástica de Ito (MISTURINI, 2010; SAUER, 2012). Sua solução foi apresentada no Apêndice D, pela Eq. (D.27), que substituída na Eq. (E.5) conduz à equação:

$$X_t = H_r + \left(\frac{F_d}{n}\right) \sum_{i=1}^{N_t} n_i \cdot \sqrt{\Delta t} \quad \forall t \in [t_t, \infty) \quad (E.6)$$

onde os n_i são números extraídos aleatoriamente de uma distribuição normal padrão $N(0,1)$, $\Delta t = t_i - t_{i-1}$ é o intervalo de tempo e $N_t = \left(\frac{t - t_t}{\Delta t}\right)$ é um número suficientemente grande de intervalos.

E.1.4 DETERMINAÇÃO DO INSTANTE DE TEMPO MÉDIO EM QUE SE INICIA O TRANSBORDAMENTO DO REPOSITÓRIO

Foi mostrado no Apêndice D que, como o processo de Wiener, W_t , é um processo estocástico com média 0 (zero), ou seja, $E(W_t) = 0$, então a média da solução estocástica da Eq. (E.2) é na verdade igual à solução da parte determinística desta equação. Uma abordagem semelhante a esta é mostrada em ALLEN (2011).

Assim, para o cálculo do instante de tempo médio em que se inicia o transbordamento do repositório no modelo estocástico, t_t , pode-se utilizar a Eq. (B.23), obtida no modelo determinístico, ou seja:

$$t_t = t_f + \left(\frac{1}{\beta}\right) \cdot \ln \left\{ \frac{(H_r - h_{p1}) \cdot \left[-\left(\frac{a}{\beta}\right) + \frac{1}{H(t_f) - h_{p1}} \right]}{-(H_r - h_{p1}) \cdot \left(\frac{a}{\beta}\right) + 1} \right\} \quad (\text{E.7})$$

onde todos os termos desta equação são definidos no Apêndice B.

E.1.5 MASSA DE RADIONUCLÍDEO NA FASE LÍQUIDA NO REPOSITÓRIO

E.1.5.1 Geral

A massa de radionuclídeo na fase líquida no repositório, $M_{rw}(t)$, deve ser determinada considerando-se as situações de não-transbordamento e transbordamento do mesmo.

E.1.5.2 Situação em que não ocorre o transbordamento do repositório

A massa de radionuclídeo na fase líquida no repositório, M_{rw} , pode ser determinada utilizando-se a Eq. (5.43), que é aqui reproduzida como:

$$\frac{dM_{rw}}{dt} = - \left[\lambda + \left(\frac{\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3}{n \cdot A \cdot R_d \cdot H} \right) \right] \cdot M_{rw} \quad (\text{E.8})$$

onde λ é a constante de decaimento radioativo, R_d é o coeficiente de retardo definido na Eq. (5.28) e H é a altura de coluna de líquido no interior do repositório.

As vazões volumétricas da fase líquida (água + radionuclídeos) que saem pela base do repositório, \dot{Q}_2 , e pelas paredes laterais do mesmo, \dot{Q}_3 , são representadas respectivamente pelas Eqs. (5.24) e (5.25), ou seja:

$$\dot{Q}_2 = K_c \cdot A \cdot \left(\frac{H + E}{E} \right) \quad (\text{E.9})$$

$$\dot{Q}_3 = K_c \cdot \left(\frac{H^2}{L}\right) \cdot (b_1 + b_2) \quad (\text{E.10})$$

Substituindo-se as Eqs. (E.9) e (E.10) na Eq. (E.8) obtém-se:

$$\frac{dM_{rw}}{dt} = - \left\{ \lambda + \frac{1}{n \cdot R_d \cdot A} \left[\left(\frac{K_c \cdot A}{E}\right) + \left(\frac{K_c \cdot A}{H}\right) + \left(\frac{K_c \cdot (b_1 + b_2) \cdot H}{L}\right) \right] \right\} \cdot M_{rw} \quad (\text{E.11})$$

Conforme mostrado na Eq. (5.74), a altura de coluna de líquido no modelo estocástico é representada como:

$$H = \bar{H} + \Delta H \quad (\text{E.12})$$

onde:

\bar{H} = parte determinística, [m];

ΔH = parte estocástica, [m].

Seja o ruído colorido não-gaussiano 1, ε_1 , definido pela seguinte equação:

$$\varepsilon_1 = \frac{1}{H} - \frac{1}{\bar{H}} \quad (\text{E.13})$$

O ruído colorido não-gaussiano 2, ε_2 , também pode ser representado como (vide Apêndice D):

$$\varepsilon_2 = \Delta H \quad (\text{E.14})$$

Da Eq. (E.13) observa-se que:

$$\frac{1}{H} = \varepsilon_1 + \frac{1}{\bar{H}} \quad (\text{E.15})$$

Substituindo-se as Eqs. (E.12), (E.13), (E.14) e (E.15) na Eq. (E.11) obtém-se a seguinte equação:

$$\begin{aligned} \frac{dM_{rw}}{dt} = & - \left[\lambda + \frac{K_c}{n.R_d.E} + \frac{K_c}{n.R_d.\bar{H}} + \frac{K_c.(b_1 + b_2)}{n.R_d.A.L} .\bar{H} \right] .M_{rw} - \\ & \left[\frac{K_c}{n.R_d} \right] .M_{rw} .\varepsilon_1 - \left[\frac{K_c.(b_1 + b_2)}{n.R_d.A.L} \right] .M_{rw} .\varepsilon_2 \end{aligned} \quad (E.16)$$

Os ruídos coloridos não-gaussiano 1, ε_1 , e gaussiano 2, ε_2 , também podem ser representados pelas equações:

$$\varepsilon_1 = \frac{dW_{1t}}{dt} \quad (E.17)$$

$$\varepsilon_2 = \frac{dW_{2t}}{dt} \quad (E.18)$$

onde W_{1t} e W_{2t} são processos estocásticos compatíveis com as definições de ε_1 , pelas Eqs. (E.13) e (E.17), e de ε_2 , pelas Eqs. (E.14) e (E.18), respectivamente.

Substituindo-se as Eqs. (E.17) e (E.18) na Eq. (E.16) e utilizando-se a simbologia do cálculo estocástico (OKSENDAL, 2000), observa-se que:

$$\begin{aligned} dX_t = & - \left[\lambda + \frac{K_c}{n.R_d.E} + \frac{K_c}{n.R_d.\bar{H}} + \frac{K_c.(b_1 + b_2)}{n.R_d.A.L} .\bar{H} \right] .X_t .dt - \\ & \left[\frac{K_c}{n.R_d} \right] .X_t .dW_{1t} - \left[\frac{K_c.(b_1 + b_2)}{n.R_d.A.L} \right] .X_t .dW_{2t} \end{aligned} \quad (E.19)$$

onde t_f e t_t representam respectivamente os tempos de falha e de transbordamento do repositório.

A altura de coluna determinística, \bar{H} , que aparece na Eq. (E.19) pode ser determinada com a utilização da Eq. (B.12).

Utilizando-se uma estratégia semelhante à apresentada no Apêndice D, e os valores apresentados na Tabela 6.1, pode-se mostrar que os termos estocásticos podem ser desprezados na Eq. (E.19).

Assim, a Eq. (E.19) se resume apenas a sua parte determinística, ou seja:

$$dX_t = - \left[\lambda + \frac{K_c}{n.R_d.E} + \frac{K_c}{n.R_d.H} + \frac{K_c.(b_1 + b_2)}{n.R_d.A.L} \bar{H} \right]. X_t . dt \quad (E.20)$$

A Eq. (E.20) possui solução analítica, representada pela Eq. (B.31), que é aqui reproduzida como:

$$X_t = \left(\frac{M_0}{R_d} \right) . \text{Exp} \left[- \left(\lambda . t + \frac{1}{n.R_d.A} \cdot \sum_{i=1}^3 I_i \right) \right] \quad \forall t \in [t_f, t_t] \quad (E.21)$$

A Eq. (E.21) é obtida considerando-se a condição inicial $X_{t_0} = M_{rw}(t_f)$, onde $M_{rw}(t_f)$ representa a massa de radionuclídeo na fase líquida no repositório, no instante da falha do mesmo, t_f . Já o símbolo M_0 representa a massa de radionuclídeo no instante de fechamento do repositório, antes da ocorrência do acidente.

E.1.5.3 Quando ocorre o transbordamento do repositório

A massa de radionuclídeo na fase líquida no repositório, M_{rw} , pode ser determinada utilizando-se a Eq. (5.44), ou seja:

$$\frac{dM_{rw}}{dt} = - \left[\lambda + \left(\frac{\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3 + \dot{Q}_4}{R_d . n . A . H} \right) \right] . M_{rw} \quad (E.22)$$

porém, utilizando-se H no lugar de H_r [vide Eq. (E.6)].

Substituindo-se a Eq. (5.27) na Eq. (E.22) obtém-se:

$$\frac{dM_{rw}}{dt} = - \left[\lambda + \left(\frac{(1 - f_m) . (\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3) + f_m . \dot{Q}_1}{R_d . n . A . H} \right) \right] . M_{rw} \quad (E.23)$$

Substituindo-se as Eqs. (E.9) e (E.10) na Eq. (E.23) obtém-se a seguinte equação:

$$\begin{aligned} \frac{dM_{rw}}{dt} = & - \left[\lambda + (1-f_m) \cdot \left(\frac{K_c}{R_d \cdot n \cdot E} \right) + (1-f_m) \cdot \left(\frac{K_c}{R_d \cdot n \cdot H} \right) + \right. \\ & \left. (1-f_m) \cdot \left(\frac{K_c \cdot (b_1 + b_2) \cdot H}{R_d \cdot n \cdot L \cdot A} \right) + \frac{f_m \cdot \dot{Q}_1}{R_d \cdot n \cdot A \cdot H} \right] \cdot M_{rw} \end{aligned} \quad (E.24)$$

Substituindo-se a Eq. (E.12) na Eq. (E.24) obtém-se:

$$\begin{aligned} \frac{dM_{rw}}{dt} = & - \left[\lambda + (1-f_m) \cdot \left(\frac{K_c}{R_d \cdot n \cdot E} \right) + (1-f_m) \cdot \left(\frac{K_c}{R_d \cdot n \cdot H} \right) + \right. \\ & \left. (1-f_m) \cdot \left(\frac{K_c \cdot (b_1 + b_2) \cdot \bar{H}}{R_d \cdot n \cdot L \cdot A} \right) + \frac{f_m \cdot \dot{Q}_1}{R_d \cdot n \cdot A \cdot H} \right] \cdot M_{rw} - \\ & \left[(1-f_m) \cdot \left(\frac{K_c \cdot (b_1 + b_2) \cdot \Delta H}{R_d \cdot n \cdot L \cdot A} \right) \right] \cdot M_{rw} \end{aligned} \quad (E.25)$$

Na modelagem estocástica, observa-se com o auxílio da Eq. (5.70) que:

$$\dot{Q}_1 = F_d(t) \cdot A \cdot (\dot{p}_m + \dot{i}_r - \dot{e} - \dot{r}) + F_d(t) \cdot A \cdot \varepsilon \quad (E.26)$$

Utilizando-se $F_d(t) = F_d$ [hipótese (1)] na Eq. (E.26), obtém-se:

$$\dot{Q}_1 = \dot{Q}_{1m} + F_d \cdot A \cdot \varepsilon \quad (E.27)$$

onde:

$$\dot{Q}_{1m} = F_d \cdot A \cdot (\dot{p}_m + \dot{i}_r - \dot{e} - \dot{r}) = \text{parte determinística};$$

$$F_d \cdot A \cdot \varepsilon = \text{parte estocástica}.$$

Substituindo-se as Eqs. (E.14), (E.15) e (E.27) na Eq. (E.25), obtém-se a seguinte equação:

$$\begin{aligned}
\frac{dM_{rw}}{dt} = & -[\lambda + (1-f_m) \cdot (\frac{K_c}{R_d \cdot n \cdot E}) + (1-f_m) \cdot (\frac{K_c}{R_d \cdot n \cdot \bar{H}})] + \\
& (1-f_m) \cdot (\frac{K_c \cdot (b_1 + b_2) \cdot \bar{H}}{R_d \cdot n \cdot L \cdot A} + \frac{f_m \cdot \dot{Q}_{1m}}{R_d \cdot n \cdot A \cdot \bar{H}}) \cdot M_{rw} - \\
& [\frac{f_m \cdot F_d}{R_d \cdot n \cdot \bar{H}}] \cdot M_{rw} \cdot \varepsilon - [\frac{(1-f_m) \cdot K_c}{R_d \cdot n} + \frac{f_m \cdot \dot{Q}_{1m}}{R_d \cdot n \cdot A}] \cdot M_{rw} \cdot \varepsilon_1 - \\
& [(1-f_m) \cdot (\frac{K_c \cdot (b_1 + b_2)}{R_d \cdot n \cdot L \cdot A})] \cdot M_{rw} \cdot \varepsilon_2 - \\
& [\frac{f_m \cdot F_d}{R_d \cdot n}] \cdot M_{rw} \cdot \varepsilon \cdot \varepsilon_1
\end{aligned} \tag{E.28}$$

Após o transbordamento do repositório, observa-se que $\bar{H} = H_r$. Assim, substituindo-se esta expressão na Eq. (E.28) obtém-se:

$$\begin{aligned}
\frac{dM_{rw}}{dt} = & -[\lambda + (1-f_m) \cdot (\frac{K_c}{R_d \cdot n \cdot E}) + (1-f_m) \cdot (\frac{K_c}{R_d \cdot n \cdot H_r}) + \\
& (1-f_m) \cdot (\frac{K_c \cdot (b_1 + b_2) \cdot H_r}{R_d \cdot n \cdot L \cdot A} + \frac{f_m \cdot \dot{Q}_{1m}}{R_d \cdot n \cdot A \cdot H_r}) \cdot M_{rw} - \\
& [\frac{f_m \cdot F_d}{R_d \cdot n \cdot H_r}] \cdot M_{rw} \cdot \varepsilon - [\frac{(1-f_m) \cdot K_c}{R_d \cdot n} + \frac{f_m \cdot \dot{Q}_{1m}}{R_d \cdot n \cdot A}] \cdot M_{rw} \cdot \varepsilon_1 - \\
& [(1-f_m) \cdot (\frac{K_c \cdot (b_1 + b_2)}{R_d \cdot n \cdot L \cdot A})] \cdot M_{rw} \cdot \varepsilon_2 - \\
& [\frac{f_m \cdot F_d}{R_d \cdot n}] \cdot M_{rw} \cdot \varepsilon \cdot \varepsilon_1
\end{aligned} \tag{E.29}$$

Substituindo-se as Eqs. (E.17), (E.18) e a expressão $\varepsilon = \frac{dW_t}{dt}$ na Eq. (E.29), obtém-se:

se:

$$\begin{aligned}
\frac{dM_{rw}}{dt} = & -[\lambda + (1-f_m) \cdot (\frac{K_c}{R_d \cdot n \cdot E}) + (1-f_m) \cdot (\frac{K_c}{R_d \cdot n \cdot H_r}) + \\
& (1-f_m) \cdot (\frac{K_c \cdot (b_1 + b_2) \cdot H_r}{R_d \cdot n \cdot L \cdot A} + \frac{f_m \cdot \dot{Q}_{1m}}{R_d \cdot n \cdot A \cdot H_r}) \cdot M_{rw} - \\
& [\frac{f_m \cdot F_d}{R_d \cdot n \cdot H_r}] \cdot M_{rw} \cdot \frac{dW_t}{dt} - [\frac{(1-f_m) \cdot K_c}{R_d \cdot n} + \frac{f_m \cdot \dot{Q}_{1m}}{R_d \cdot n \cdot A}] \cdot M_{rw} \cdot \frac{dW_{1t}}{dt} - \\
& [(1-f_m) \cdot (\frac{K_c \cdot (b_1 + b_2)}{R_d \cdot n \cdot L \cdot A})] \cdot M_{rw} \cdot \frac{dW_{2t}}{dt} - \\
& [\frac{f_m \cdot F_d}{R_d \cdot n}] \cdot M_{rw} \cdot \frac{dW_t}{dt} \cdot \frac{dW_{1t}}{dt}
\end{aligned} \tag{E.30}$$

que pode ser colocada na seguinte forma:

$$\begin{aligned}
dM_{rw} = & - [\lambda + (1 - f_m) \cdot \left(\frac{K_c}{R_d \cdot n \cdot E}\right) + (1 - f_m) \cdot \left(\frac{K_c}{R_d \cdot n \cdot H_r}\right) + \\
& (1 - f_m) \cdot \left(\frac{K_c \cdot (b_1 + b_2) \cdot H_r}{R_d \cdot n \cdot L \cdot A}\right) + \frac{f_m \cdot \dot{Q}_{lm}}{R_d \cdot n \cdot A \cdot H_r}] \cdot M_{rw} \cdot dt - \\
& \left[\frac{f_m \cdot F_d}{R_d \cdot n \cdot H_r}\right] \cdot M_{rw} \cdot dW_t - \left[\frac{(1 - f_m) \cdot K_c}{R_d \cdot n} + \frac{f_m \cdot \dot{Q}_{lm}}{R_d \cdot n \cdot A}\right] \cdot M_{rw} \cdot dW_{1t} - \\
& \left[(1 - f_m) \cdot \left(\frac{K_c \cdot (b_1 + b_2)}{R_d \cdot n \cdot L \cdot A}\right)\right] \cdot M_{rw} \cdot dW_{2t} - \\
& \left[\frac{f_m \cdot F_d}{R_d \cdot n}\right] \cdot M_{rw} \cdot dW_t \cdot dW_{1t}
\end{aligned} \tag{E.31}$$

Utilizando-se a simbologia estocástica (OKSENDAL, 2000), a Eq. (E.31) se transforma em:

$$\begin{aligned}
dX_t = & - [\lambda + (1 - f_m) \cdot \left(\frac{K_c}{R_d \cdot n \cdot E}\right) + (1 - f_m) \cdot \left(\frac{K_c}{R_d \cdot n \cdot H_r}\right) + \\
& (1 - f_m) \cdot \left(\frac{K_c \cdot (b_1 + b_2) \cdot H_r}{R_d \cdot n \cdot L \cdot A}\right) + \frac{f_m \cdot \dot{Q}_{lm}}{R_d \cdot n \cdot A \cdot H_r}] \cdot X_t \cdot dt - \\
& \left[\frac{f_m \cdot F_d}{R_d \cdot n \cdot H_r}\right] \cdot X_t \cdot dW_t - \left[\frac{(1 - f_m) \cdot K_c}{R_d \cdot n} + \frac{f_m \cdot \dot{Q}_{lm}}{R_d \cdot n \cdot A}\right] \cdot X_t \cdot dW_{1t} - \\
& \left[(1 - f_m) \cdot \left(\frac{K_c \cdot (b_1 + b_2)}{R_d \cdot n \cdot L \cdot A}\right)\right] \cdot X_t \cdot dW_{2t} - \\
& \left[\frac{f_m \cdot F_d}{R_d \cdot n}\right] \cdot X_t \cdot dW_t \cdot dW_{1t}
\end{aligned} \tag{E.32}$$

Como pode ser visto em MOVELLAN (2011), o produto de diferenciais como no caso do último termo do membro direito da Eq. (E.32) é esperado no estudo de equações diferenciais estocásticas.

Nas análises dimensionais que podem ser realizadas para as equações apresentadas neste apêndice, deve-se tomar um cuidado especial com as unidades dos ruídos ε , ε_1 e ε_2 . Suas unidades são m/a , m^{-1} e m , respectivamente.

Definindo-se números adimensionais e utilizando-se os valores de alguns parâmetros apresentados na Tabela 6.1 (vide Apêndice D), constata-se que os termos estocásticos podem ser desprezados na Eq. (E.32). Assim, esta equação pode conter apenas a sua parte determinística, ou seja:

$$dX_t = - \left[\lambda + (1 - f_m) \cdot \left(\frac{K_c}{R_d \cdot n \cdot E} \right) + (1 - f_m) \cdot \left(\frac{K_c}{R_d \cdot n \cdot H_r} \right) + (1 - f_m) \cdot \left(\frac{K_c \cdot (b_1 + b_2) \cdot H_r}{R_d \cdot n \cdot L \cdot A} \right) + \frac{f_m \cdot \dot{Q}_{lm}}{R_d \cdot n \cdot A \cdot H_r} \right] \cdot X_t \cdot dt \quad (E.33)$$

A Eq. (E.33) possui solução analítica representada pela Eq. (B.39), que é aqui reproduzida como:

$$M_{rw} = \left(\frac{M_0}{R_d} \right) \cdot e^{-\left[\lambda \cdot t + \frac{1}{n \cdot R_d \cdot A} \cdot \sum_{i=1}^3 I_i(t_t) + C_1^* \cdot (t - t_t) \right]} \quad \forall t \in [t_t, \infty) \quad (E.34)$$

A Eq. (E.34) é obtida considerando-se a condição inicial $X_{t_0} = M_{rw}(t_t)$, onde $M_{rw}(t_t)$ representa a massa de radionuclídeo na fase líquida no repositório, no instante do transbordamento do repositório, t_t .

E.1.6 CONCENTRAÇÃO EM ATIVIDADE DE RADIONUCLÍDEO NA FASE LÍQUIDA NO REPOSITÓRIO

E.1.6.1 Geral

A concentração em atividade na fase líquida no repositório, C_R , é definida como a razão entre a atividade desta fase e o volume da mesma.

E.1.6.2 Situação em que não ocorre o transbordamento do repositório

A concentração em atividade na fase líquida no repositório, C_R , é determinada utilizando-se a Eq. (5.45), ou seja:

$$C_R = \left(\frac{A_0}{M_0}\right) \cdot \left(\frac{M_{rw}}{V_w}\right) \quad (E.35)$$

onde:

A_0 = Atividade de um determinado radionuclídeo no interior do repositório no instante $t = 0$, [Bq];

M_0 = Massa de um determinado radionuclídeo no interior do repositório no instante $t = 0$, [kg];

É importante frisar que a massa M_{rw} , na Eq. (E.35), é determinada com o auxílio da Eq. (E.21). Já o volume V_w é determinado pela equação $V_w = n.A.H$, com os valores de H sendo determinados pela solução numérica da Eq. (E.2).

E.1.6.3 Quando ocorre o transbordamento do repositório

Os valores de M_{rw} são determinados utilizando-se a Eq. (E.34). Os valores de V_w são determinados pela equação $V_w = n.A.H$ e os de H pela Eq. (E.6).

E.1.7 TAXA DE LIBERAÇÃO EM ATIVIDADE DO REPOSITÓRIO PARA O MEIO AMBIENTE

E.1.7.1 Geral

A taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente, \dot{A} , é obtida multiplicando-se a concentração em atividade da mistura (água + radionuclídeos), no interior do repositório, pela vazão volumétrica de mistura que sai do mesmo.

E.1.7.2 Situação em que não ocorre o transbordamento do repositório

A taxa de liberação de radionuclídeos do repositório para o meio ambiente, \dot{A} , pode ser determinada pela Eq. (5.49), ou seja:

$$\dot{A} = C_R \cdot (\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3) \quad (\text{E.36})$$

Substituindo-se as Eqs. (E.9) e (E.10) na Eq. (E.36) obtém-se:

$$\dot{A} = K_c \cdot \left[\left(\frac{A}{E} \right) \cdot (H + E) + \left(\frac{b_1 + b_2}{L} \right) \cdot H^2 \right] \cdot C_R \quad \forall t \in [t_f, t_i] \quad (\text{E.37})$$

onde os parâmetros H e C_R são determinados com o auxílio das Eqs. (E.2) e (E.35), respectivamente.

E.1.7.3 Quando ocorre o transbordamento do repositório

A taxa de liberação em atividade do repositório para o meio ambiente, \dot{A} , é determinada pela Eq. (5.51), ou seja:

$$\dot{A} = C_R \cdot [(1 - f_m) \cdot (\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3) + f_m \cdot \dot{Q}_1] \quad (\text{E.38})$$

Substituindo-se as Eqs. (E.9), (E.10) e (E.26) na Eq. (E.38) obtém-se a seguinte equação:

$$\dot{A} = \left\{ (1 - f_m) \cdot K_c \cdot \left[\left(\frac{A}{E} \right) \cdot (H + E) + \left(\frac{b_1 + b_2}{L} \right) \cdot H^2 \right] + f_m \cdot F_d \cdot A \cdot [p_m + i_r - e - r + \varepsilon] \right\} \cdot C_R \quad (\text{E.39})$$

Quando ocorre o transbordamento do repositório, a altura de coluna no modelo estocástico pode ser representada como:

$$H = H_r + \Delta H \quad (\text{E.40})$$

Substituindo-se a Eq. (E.40) na Eq. (E.39) obtém-se:

$$\begin{aligned} \dot{A} = \{ & (1 - f_m) \cdot K_c \cdot \left[\left(\frac{A}{E} \right) \cdot (H_r + \Delta H + E) + \left(\frac{b_1 + b_2}{L} \right) \cdot (H_r + \Delta H)^2 \right] + \\ & f_m \cdot F_d \cdot A \cdot [\dot{p}_m + \dot{i}_r - \dot{e} - \dot{r} + \varepsilon] \} \cdot C_R \end{aligned} \quad (\text{E.41})$$

Substituindo-se a Eq. (E.14) na Eq. (E.41) observa-se que:

$$\begin{aligned} \dot{A} = \{ & (1 - f_m) \cdot K_c \cdot \left[\left(\frac{A}{E} \right) \cdot (H_r + E + \varepsilon_2) + \left(\frac{b_1 + b_2}{L} \right) \cdot (H_r + \varepsilon_2)^2 \right] + \\ & f_m \cdot F_d \cdot A \cdot [\dot{p}_m + \dot{i}_r - \dot{e} - \dot{r} + \varepsilon] \} \cdot C_R \\ & \forall t \in [t_t, \infty) \end{aligned} \quad (\text{E.42})$$

sendo a concentração C_R determinada com o auxílio da Eq. (E.35).

E.1.8 CONCENTRAÇÃO EM ATIVIDADE NO PONTO DE DESCARGA NO AQUÍFERO

E.1.8.1 Situação em que não ocorre o transbordamento do repositório

A concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero, C_D , pode ser determinada utilizando-se a Eq. (5.55):

$$C_D = \frac{C_R \cdot [\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3]}{b_a \cdot H_a \cdot v_a} \quad (\text{E.43})$$

Substituindo-se as Eqs. (E.9) e (E.10) na Eq. (E.43) obtém-se:

$$C_D = \frac{K_c}{b_a \cdot H_a \cdot v_a} \cdot \left[\left(\frac{A}{E} \right) \cdot (H + E) + \left(\frac{b_1 + b_2}{L} \right) \cdot H^2 \right] \cdot C_R \quad (\text{E.44})$$

onde o valor de C_R é determinado utilizando-se a Eq. (E.35).

Substituindo a Eq. (E.40) na Eq. (E.44) obtém-se a equação:

$$C_D = \frac{K_c}{b_a \cdot H_a \cdot v_a} \cdot \left[\left(\frac{A}{E} \right) \cdot (H_r + \Delta H + E) + \left(\frac{b_1 + b_2}{L} \right) \cdot (H_r + \Delta H)^2 \right] \cdot C_R \quad (E.45)$$

A substituição da Eq. (E.14) na Eq. (E.45) conduz à equação:

$$C_D = \frac{K_c}{b_a \cdot H_a \cdot v_a} \cdot \left[\left(\frac{A}{E} \right) \cdot (H_r + E + \varepsilon_2) + \left(\frac{b_1 + b_2}{L} \right) \cdot (H_r + \varepsilon_2)^2 \right] \cdot C_R \quad \forall t \in [t_f, t_t] \quad (E.46)$$

E.1.8.2 Quando ocorre o transbordamento do repositório

A concentração em atividade no ponto de descarga no aquífero, C_D , pode ser determinada utilizando-se a Eq. (5.56):

$$C_D = \frac{C_R \cdot [(1 - f_m) \cdot (\dot{Q}_2 + \dot{Q}_3) + f_m \cdot \dot{Q}_1]}{b_a \cdot H_a \cdot v_a} \quad (E.47)$$

Substituindo-se as Eqs. (E.9), (E.10) e (E.26) na Eq. (47), observa-se que:

$$C_D = \left(\frac{1}{b_a \cdot H_a \cdot v_a} \right) \cdot \left\{ (1 - f_m) \cdot K_c \cdot \left[\left(\frac{A}{E} \right) \cdot (H + E) + \left(\frac{b_1 + b_2}{L} \right) \cdot H^2 \right] + f_m \cdot F_d \cdot A \cdot [\dot{p}_m + \dot{i}_r - \dot{e} - \dot{r} + \varepsilon] \right\} \cdot C_R \quad (E.48)$$

Substituindo-se a Eq. (E.40) na Eq. (E.48) obtém-se:

$$C_D = \left(\frac{1}{b_a \cdot H_a \cdot v_a} \right) \cdot \left\{ (1 - f_m) \cdot K_c \cdot \left[\left(\frac{A}{E} \right) \cdot (H_r + \Delta H + E) + \left(\frac{b_1 + b_2}{L} \right) \cdot (H_r + \Delta H)^2 \right] + f_m \cdot F_d \cdot A \cdot [\dot{p}_m + \dot{i}_r - \dot{e} - \dot{r} + \varepsilon] \right\} \cdot C_R \quad (E.49)$$

Substituindo-se a Eq. (E.14) na Eq. (E.49) observa-se que:

$$C_D = \left(\frac{1}{b_a \cdot H_a \cdot v_a} \right) \cdot \left\{ (1 - f_m) \cdot K_c \cdot \left[\left(\frac{A}{E} \right) \cdot (H_r + E + \varepsilon_2) + \left(\frac{b_1 + b_2}{L} \right) \cdot (H_r + \varepsilon_2)^2 \right] + f_m \cdot F_d \cdot A \cdot [\dot{p}_m + \dot{i}_r - \dot{e} - r + \varepsilon] \right\} \cdot C_R \quad \forall t \in [t_t, \infty) \quad (E.50)$$

sendo a concentração C_R determinada com o auxílio da Eq. (E.35).

E.1.9 CONCENTRAÇÃO EM ATIVIDADE AO LONGO DO AQUÍFERO

E.1.9.1 Situação em que não ocorre o transbordamento do repositório

A concentração em atividade ao longo do aquífero, C_A , pode ser determinada utilizando-se a Eq. (5.68):

$$C_A = (0.5) \cdot C_D \cdot \text{Exp} \left[\left(\frac{v_{rx}}{2 \cdot D_{rx}} \right) \cdot x \right] \cdot \text{Exp} [-B^* \cdot x] \cdot \text{erfc} \left[\frac{x - A^* \cdot t}{2 \cdot \sqrt{D_{rx} \cdot t}} \right] + (0.5) \cdot C_D \cdot \text{Exp} \left[\left(\frac{v_{rx}}{2 \cdot D_{rx}} \right) \cdot x \right] \cdot \text{Exp} [B^* \cdot x] \cdot \text{erfc} \left[\frac{x + A^* \cdot t}{2 \cdot \sqrt{D_{rx} \cdot t}} \right] \quad (E.51)$$

onde a concentração C_D é determinada com o auxílio da Eq. (E.46).

E.1.9.2 Quando ocorre o transbordamento do repositório

A concentração em atividade ao longo do aquífero, C_A , pode ser determinada utilizando-se a Eq. (E.51), porém C_D tem que ser determinado com o auxílio da Eq. (E.50).

APÊNDICE F

F.1. ANÁLISE DE CONSISTÊNCIA, CONVERGÊNCIA E ESTABILIDADE PARA O MÉTODO DE EULER-MARUYAMA

F.1.1 GERAL

Neste apêndice é realizada uma análise prática da consistência, convergência e estabilidade do método de Euler-Maruyama (EM).

O método de Euler-Maruyama foi utilizado nesta tese para a obtenção de soluções numéricas das Eqs. (D.2) (modelo estocástico 1) e (E.2) (modelo estocástico 2), que representam a altura de coluna de líquido no interior do repositório, H.

A primeira equação [Eq. (D.2)] é uma equação estocástica linear de Ito, cuja solução analítica foi obtida no referido Apêndice D. Já a Eq. (E.2) é uma equação estocástica não-linear de Ito, cuja solução analítica não foi incluída no escopo desta tese.

É mostrado na seção 6.4.2.5 (vide Fig. 6.16), que existe uma boa concordância entre as soluções analítica e numérica (método de Euler-Maruyama) da Eq. (D2), no intervalo $0 \leq H \leq 25$ m, com um desvio relativo percentual máximo igual a 0,7224%, quando o incremento de tempo Δt é igual a $0,5 a$. É intuitivo esperar que uma redução no valor de Δt provoque a redução no valor do desvio relativo percentual máximo, mencionado anteriormente, e isso será analisado no estudo da convergência do método de Euler-Maruyama, na seção F.1.3.

O fato de não ter sido obtida uma solução analítica para a Eq. (E.2), dificulta a análise de convergência do método de Euler-Maruyama, por esta equação.

Por outro lado, uma análise das soluções numéricas das Eqs. (D2) e (E2), apresentadas na Fig. 6.17, e respeitando-se as diferenças existentes entre os modelos estocásticos 1 e 2, mostra que existe uma coerência muito grande tanto no formato como nos valores da curva representativa da solução numérica da Eq. (E.2). Assim, espera-se que as análises de consistência, convergência e estabilidade realizadas para o método de Euler-Maruyama, com o auxílio da Eq. (D.2), sejam qualitativamente aplicáveis à Eq. (E.2).

Desta maneira, as análises de consistência, convergência e estabilidade serão realizadas nesta tese para o método de Euler-Maruyama, utilizando-se a Eq. (D.2), que é aqui reproduzida como:

$$dX_t = -[b.X_t + c].dt + \left(\frac{F_d}{n}\right).dW_t \quad (F.1)$$

onde todos os parâmetros da Eq. (F.1) já foram definidos no Apêndice D.

F.1.2 CONSISTÊNCIA

F.1.2.1 Geral

Na seção 4.11.3.1.2, foi mencionado que a consistência para uma aproximação numérica de um processo estocástico de Ito é dividida em consistência forte e consistência fraca.

F.1.2.2 Consistência forte

Para a consistência forte, deve-se atender às Eqs. (4.83), (4.84) e (4.85), que são aqui reproduzidas respectivamente como:

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} c(\delta) = 0 \quad (F.2)$$

tal que:

$$E\left[\left|E\left(\frac{Y_{n+1}^\delta - Y_n^\delta}{\Delta n} \mid A_{\tau_n}\right) - a(\tau_n, Y_n^\delta)\right|^2\right] \leq c(\delta) \quad (F.3)$$

e

$$E\left(\frac{1}{\Delta n} \left| Y_{n+1}^\delta - Y_n^\delta - E(Y_{n+1}^\delta - Y_n^\delta \mid A_{\tau_n}) - b(\tau_n, Y_n^\delta) \cdot \Delta W_n \right|^2\right) \leq c(\delta) \quad (F.4)$$

onde $a(\tau_n, Y_n^\delta)$ e $b(\tau_n, Y_n^\delta)$ representam os termos de arraste médio e difusivo do processo estocástico de Ito, respectivamente. Os símbolos W_n , E , A_{τ_n} e Δn representam, respectivamente, o processo de Wiener ou movimento browniano padrão (MBP), a esperança matemática ou média, a família de conjuntos σ -álgebras e o incremento de tempo.

Definindo-se as funções $\Psi_1^c(Y, \Delta, A_\tau, a)$ e $\Psi_2^c(Y, \Delta, A_\tau, b, \Delta W)$ pelas seguintes equações:

$$\Psi_1^c = \left| E\left(\frac{Y_{n+1}^\delta - Y_n^\delta}{\Delta n} \mid A_{\tau_n}\right) - a(\tau_n, Y_n^\delta) \right|^2 \quad (F.5)$$

$$\Psi_2^c = \frac{1}{\Delta n} \left| Y_{n+1}^\delta - Y_n^\delta - E(Y_{n+1}^\delta - Y_n^\delta \mid A_{\tau_n}) - b(\tau_n, Y_n^\delta) \cdot \Delta W_n \right|^2 \quad (F.6)$$

observa-se que atender à consistência forte é o mesmo que atender às seguintes restrições:

$$\lim_{\Delta n \rightarrow 0} E[\Psi_1^c] = 0 \quad (F.7)$$

$$\lim_{\Delta n \rightarrow 0} E[\Psi_2^c] = 0 \quad (F.8)$$

Em outras palavras, mostrar que o método de Euler-Maruyama possui consistência forte na discretização da Eq. (F.1) é equivalente a mostrar que as funções $E[\Psi_1^c]$ e $E[\Psi_2^c]$ tendem a 0 à medida que Δn também tende a 0.

F.1.2.3 Consistência fraca

Na consistência fraca, deve-se atender às Eqs. (F.2) e (F.3), além da Eq. (4.86), que é aqui reproduzida por comodidade como:

$$E\left[\left|E\left[\frac{1}{\Delta n}(Y_{n+1}^\delta - Y_n^\delta).(Y_{n+1}^\delta - Y_n^\delta)^T \mid A_{\tau_n}\right] - b(\tau_n, Y_n^\delta).b(\tau_n, Y_n^\delta)^T\right|^2\right] \leq c(\delta) \quad (F.9)$$

onde $(Y_{n+1}^\delta - Y_n^\delta)^T$ é o transposto do vetor $(Y_{n+1}^\delta - Y_n^\delta)$. Os demais termos já foram definidos anteriormente.

Definindo-se a função $\Psi_3^c(Y, \Delta, A_\tau, b)$ pela seguinte equação:

$$\Psi_3^c = \left|E\left[\frac{1}{\Delta n}(Y_{n+1}^\delta - Y_n^\delta).(Y_{n+1}^\delta - Y_n^\delta)^T \mid A_{\tau_n}\right] - b(\tau_n, Y_n^\delta).b(\tau_n, Y_n^\delta)^T\right|^2 \quad (F.10)$$

então, observa-se que atender à consistência fraca, é o mesmo que atender às seguintes equações:

$$\lim_{\Delta n \rightarrow 0} E[\Psi_1^c] = 0 \quad (F.11)$$

$$\lim_{\Delta n \rightarrow 0} E[\Psi_3^c] = 0 \quad (F.12)$$

Analogamente ao caso da consistência forte, mostrar que o método de Euler-Maruyama possui consistência fraca na discretização da Eq. (F.1) é equivalente a

mostrar que as funções $E[\Psi_1^c]$ e $E[\Psi_3^c]$ tendem a 0 à medida que Δn também tende a 0.

Na seção 4.4.4 foi mostrado que o processo de Wiener pode ser representado pela expressão $\Delta W_i = \sqrt{\Delta t} \cdot n_i$.

Assim, observa-se que as Eqs. (F.7), (F.8) e (F.9), são equivalentes às expressões $\lim_{\Delta n \rightarrow 0} \{ \lim_{\Delta W_n \rightarrow 0} E[\Psi_1^c] \} = 0$; $\lim_{\Delta n \rightarrow 0} \{ \lim_{\Delta W_n \rightarrow 0} E[\Psi_2^c] \} = 0$ e $\lim_{\Delta n \rightarrow 0} \{ \lim_{\Delta W_n \rightarrow 0} E[\Psi_3^c] \} = 0$, respectivamente. Estas expressões podem ser facilmente demonstradas, desenvolvendo-se rotinas apropriadas no Mathematica 9.0. Entretanto, como o tempo de computação envolvido nesta tarefa é muito elevado, a melhor alternativa neste caso é recorrer a KLOEDEN & PLATEN (1999), onde é encontrada a demonstração matemática da consistência do método de Euler-Maruyama na discretização numérica de um processo estocástico de Ito.

F.1.3 CONVERGÊNCIA

F.1.3.1 Geral

A convergência para uma aproximação numérica de um processo estocástico de Ito é definida na seção 4.11.3.1.3. Ela é também dividida em convergência forte e convergência fraca.

F.1.3.2 Convergência forte

A condição para que ocorra a convergência forte de um processo estocástico aproximado de Ito é representada pela Eq. (4.50). Ela é aqui colocada na seguinte forma equivalente:

$$\varepsilon_{br} = E[|X_T - Y_N(T)|] \leq K \cdot \delta^\gamma \quad \forall \delta \in (0, \delta_0) \quad (F.13)$$

onde ε_{for} é o erro absoluto forte, E representa a esperança matemática ou média, X_T e $Y_N(T)$ são as soluções exata e aproximada de um processo estocástico de Ito, no final do intervalo de tempo $[0, T]$, K é uma constante finita, δ é o incremento de tempo e γ é a ordem de convergência da aproximação numérica Y_N .

F.1.3.3 Convergência fraca

No caso da convergência fraca, deve-se atender a Eq. (4.51), ou seja:

$$\varepsilon_{\text{fra}} = |E[g(X_T)] - E[g(Y_N(T))]| \leq K \cdot \delta^\beta \quad \forall \delta \in (0, \delta_0) \quad (\text{F.14})$$

onde ε_{fra} é o erro absoluto fraco, g são polinômios apresentados em KLOEDEN & PLATEN (1999) e os demais termos já foram definidos anteriormente.

É importante frisar que a utilização dos polinômios g é particularmente importante nos casos em que não se conhece a solução exata, X_T , do problema, mas, sim, uma aproximação da distribuição de probabilidade de X_T .

Como no presente caso é conhecida a solução analítica da Eq. (F.1), vide Apêndice D, os polinômios g podem ser excluídos da Eq. (F.14), dando origem à seguinte equação:

$$\varepsilon_{\text{fra}} = |E[X_T] - E[Y_N(T)]| \leq K \cdot \delta^\beta \quad \forall \delta \in (0, \delta_0) \quad (\text{F.15})$$

F.1.3.4 Resultados obtidos

Para esta análise de convergência são utilizados valores de incrementos de tempo, Δt , pertencentes ao intervalo $I_{\Delta t} = [10^{-3}, 10^{-1}]$.

Os programas de computador REPEA1 e REPEN1, desenvolvidos no Mathematica 9.0 para fornecer as soluções analítica e numérica da Eq. (F.1), são muito lentos quando utilizados com valores de Δt da ordem de 10^{-3} , por conter toda a

modelagem estocástica para o cálculo da migração do radionuclídeo desde o repositório até o poço de captação de água no aquífero.

Para tornar o estudo da convergência mais agradável, uma cópia das rotinas dos programas REPEA1 e REPEN1, apropriadas para o cálculo da Eq. (F.1), foi utilizada no desenvolvimento do programa CONVERGE, que é muito rápido (tempo de processamento em torno de 2 minutos) na solução dessa equação, mesmo para valores de Δt inferiores a 10^{-3} a.

Com a utilização do programa CONVERGE são determinados os valores dos parâmetros apresentados nas Tabelas F.1, F.2 e F.3.

Tabela F.1 – Valores analíticos e numéricos do processo estocástico $X(t)$

Δt [a]	X_T [m]	$Y_N(T)$ [m]
10^{-3}	- 0,0797849	- 0,0797862
	- 0,1617870	- 0,1617900
	0,4323400	0,4323460
	- 0,2354990	- 0,2355030
	- 0,1196260	- 0,1196280
	0,0865706	0,0865718
	0,1022770	0,1022780
	- 0,1844590	- 0,1844620
	0,1565270	0,1565290
	- 0,2721270	- 0,2721310
5×10^{-3}	- 0,1766720	- 0,1766880
	0,5891610	0,5892050
	1,4331100	1,4332200
	0,1817710	0,1817820
	0,4047740	0,4048030
	- 0,5615990	- 0,5616460
	- 1,5810200	- 1,5811500
	1,1394900	1,1395700
	0,6111490	0,6111940
	- 0,4364870	- 0,4365240
10^{-2}	1,6029100	1,6031600
	- 0,1981540	- 0,1981910
	0,7405330	0,7406430
	- 1,2164200	- 1,2166200
	- 0,5105210	- 0,5106070
	- 0,8806840	- 0,8808280
	0,6013360	0,6014250
	0,7167570	0,7168600
	- 1,3773900	- 1,3776200
	- 0,3751800	- 0,3752490

Tabela F.1 (cont.) – Valores analíticos e numéricos do processo estocástico X(t)

Δt [a]	X_T [m]	$Y_N(T)$ [m]
5×10^{-2}	2,1200300	2,1214000
	0,7954540	0,7958340
	- 0,8663550	- 0,8672800
	- 0,5333040	- 0,5339630
	0,8821890	0,8826040
	- 1,8879400	- 1,8896500
	- 0,9904900	- 0,9915220
	2,6728100	2,6746400
	- 0,1431010	- 0,1434640
	- 2,098700	- 2, 1005900
10^{-1}	10,6521000	10,6673000
	4,2014100	4,2069000
	2,3452800	2,3478400
	1,2648700	1,2658100
	2,8289100	2,8323300
	- 0,5401400	- 0,5420200
	1,5402600	1,5415300
	1,1076000	1,1083100
	- 2,3354200	- 2,3397900
	0,1424980	0,1417270
5×10^{-1}	5,7893000	5,8164100
	2,0176400	2,0095900
	- 3,5813100	- 3,6276100
	- 2,0349500	- 2,0685700
	15,4386000	15,5223000
	1,3972200	1,3859700
	17,7498000	17,8598000
	7,5946000	7,6249300
	- 4,5601700	- 4,6060000
	1,6742900	1,6656100

Tabela F.2 – Valores do erro absoluto forte

Δt [a]	$ X_T - Y_N(T) $ [m]	$\varepsilon_{\text{for}} = E[X_T - Y_N(T)]$ [m]
10^{-3}	$1,3606 \times 10^{-6}$	$2,9032 \times 10^{-6}$
	$2,6502 \times 10^{-6}$	
	$6,7008 \times 10^{-6}$	
	$3,8115 \times 10^{-6}$	
	$1,9871 \times 10^{-6}$	
	$1,2588 \times 10^{-6}$	
	$1,5066 \times 10^{-6}$	
	$3,0081 \times 10^{-6}$	
	$2,3596 \times 10^{-6}$	
	$4,3884 \times 10^{-6}$	
5×10^{-3}	$1,6454 \times 10^{-5}$	$5,5438 \times 10^{-5}$
	$4,3751 \times 10^{-5}$	
	$1,1007 \times 10^{-4}$	
	$1,1729 \times 10^{-5}$	
	$2,9236 \times 10^{-5}$	
	$4,6775 \times 10^{-5}$	
	$1,2691 \times 10^{-4}$	
	$8,7002 \times 10^{-5}$	
	$4,5446 \times 10^{-5}$	
	$3,7002 \times 10^{-5}$	
10^{-2}	$2,4573 \times 10^{-4}$	$1,3080 \times 10^{-4}$
	$3,7017 \times 10^{-5}$	
	$1,1037 \times 10^{-4}$	
	$1,9712 \times 10^{-4}$	
	$8,6363 \times 10^{-5}$	
	$1,4459 \times 10^{-4}$	
	$8,8490 \times 10^{-5}$	
	$1,0254 \times 10^{-4}$	
	$2,2649 \times 10^{-4}$	
	$6,9295 \times 10^{-5}$	

Tabela F.2 (cont.) – Valores do erro absoluto forte

Δt [a]	$ X_T - Y_N(T) $ [m]	$\varepsilon_{\text{for}} = E[X_T - Y_N(T)]$ [m]
5×10^{-2}	$1,3702 \times 10^{-3}$	$1,0573 \times 10^{-3}$
	$3,8060 \times 10^{-4}$	
	$9,2462 \times 10^{-4}$	
	$6,5890 \times 10^{-4}$	
	$4,1508 \times 10^{-4}$	
	$1,7069 \times 10^{-3}$	
	$1,0323 \times 10^{-3}$	
	$1,8359 \times 10^{-3}$	
	$3,6253 \times 10^{-4}$	
	$1,8855 \times 10^{-3}$	
10^{-1}	$1,5202 \times 10^{-2}$	$3,6639 \times 10^{-3}$
	$5,4895 \times 10^{-3}$	
	$2,5640 \times 10^{-3}$	
	$9,4637 \times 10^{-4}$	
	$3,4179 \times 10^{-3}$	
	$1,8806 \times 10^{-3}$	
	$1,2749 \times 10^{-3}$	
	$7,1825 \times 10^{-4}$	
	$4,3741 \times 10^{-3}$	
	$7,7116 \times 10^{-4}$	
5×10^{-1}	$2,7112 \times 10^{-2}$	$4,0477 \times 10^{-2}$
	$8,0470 \times 10^{-3}$	
	$4,6301 \times 10^{-2}$	
	$3,3623 \times 10^{-2}$	
	$8,3634 \times 10^{-2}$	
	$1,1249 \times 10^{-2}$	
	$1,0998 \times 10^{-1}$	
	$3,0322 \times 10^{-2}$	
	$4,5830 \times 10^{-2}$	
	$8,6717 \times 10^{-3}$	

Tabela F.3 – Valores do erro absoluto fraco

Δt [a]	X_T [m]	$E[X_T]$ [m]	$Y_N(T)$ [m]	$E[Y_N(T)]$ [m]	$\varepsilon_{fra} = E[X_T] - E[Y_N(T)] $ [m]
10^{-3}	- 0,0797849	0,0275568	- 0,0797862	0,0275575	$7,1000 \times 10^{-7}$
	- 0,1617870		- 0,1617900		
	0,4323400		0,4323460		
	- 0,2354990		- 0,2355030		
	- 0,1196260		- 0,1196280		
	0,0865706		0,0865718		
	0,1022770		0,1022780		
	- 0,1844590		- 0,1844620		
	0,1565270		0,1565290		
	- 0,2721270		- 0,2721310		
5×10^{-3}	- 0,1766720	0,160368	- 0,1766880	0,160377	$8,9000 \times 10^{-6}$
	0,5891610		0,5892050		
	1,4331100		1,4332200		
	0,1817710		0,1817820		
	0,4047740		0,4048030		
	- 0,5615990		- 0,5616460		
	- 1,5810200		- 1,5811500		
	1,1394900		1,1395700		
	0,6111490		0,6111940		
	- 0,4364870		- 0,4365240		
10^{-2}	1,6029100	0,0896813	1,6031600	0,0897027	$2,1400 \times 10^{-5}$
	- 0,1981540		- 0,1981910		
	0,7405330		0,7406430		
	- 1,2164200		- 1,2166200		
	- 0,5105210		- 0,5106070		
	- 0,8806840		- 0,8808280		
	0,6013360		0,6014250		
	0,7167570		0,7168600		
	- 1,3773900		- 1,3776200		
	- 0,3751800		- 0,3752490		

Tabela F.3 (cont.) – Valores do erro absoluto fraco

Δt [a]	X_T [m]	$E[X_T]$ [m]	$Y_N(T)$ [m]	$E[Y_N(T)]$ [m]	$\varepsilon_{fra} = E[X_T] - E[Y_N(T)] $ [m]
5×10^{-2}	2,1200300	0,0049407	2,1214000	0,0051991	$2,5840 \times 10^{-4}$
	0,7954540		0,7958340		
	- 0,8663550		- 0,8672800		
	- 0,5333040		- 0,5339630		
	0,8821890		0,8826040		
	- 1,8879400		- 1,8896500		
	- 0,9904900		- 0,9915220		
	2,6728100		2,6746400		
	- 0,1431010		- 0,1434640		
	- 2,098700		- 2,1005900		
10^{-1}	10,6521000	2,12074	10,6673000	2,12299	$2,2569 \times 10^{-3}$
	4,2014100		4,2069000		
	2,3452800		2,3478400		
	1,2648700		1,2658100		
	2,8289100		2,8323300		
	- 0,5401400		- 0,5420200		
	1,5402600		1,5415300		
	1,1076000		1,1083100		
	- 2,3354200		- 2,3397900		
	0,1424980		0,1417270		
5×10^{-1}	5,7893000	4,1485	5,8164100	4,15824	$9,7410 \times 10^{-3}$
	2,0176400		2,0095900		
	- 3,5813100		- 3,6276100		
	- 2,0349500		- 2,0685700		
	15,4386000		15,5223000		
	1,3972200		1,3859700		
	17,7498000		17,8598000		
	7,5946000		7,6249300		
	- 4,5601700		- 4,6060000		
	1,6742900		1,6656100		

Os valores dos erros absolutos forte, ε_{for} , e fraco, ε_{fra} , apresentados nas Tabelas F.2 e F.3, são mostrados em forma de gráficos log-log nas Figs. F.1 e F.2, respectivamente.

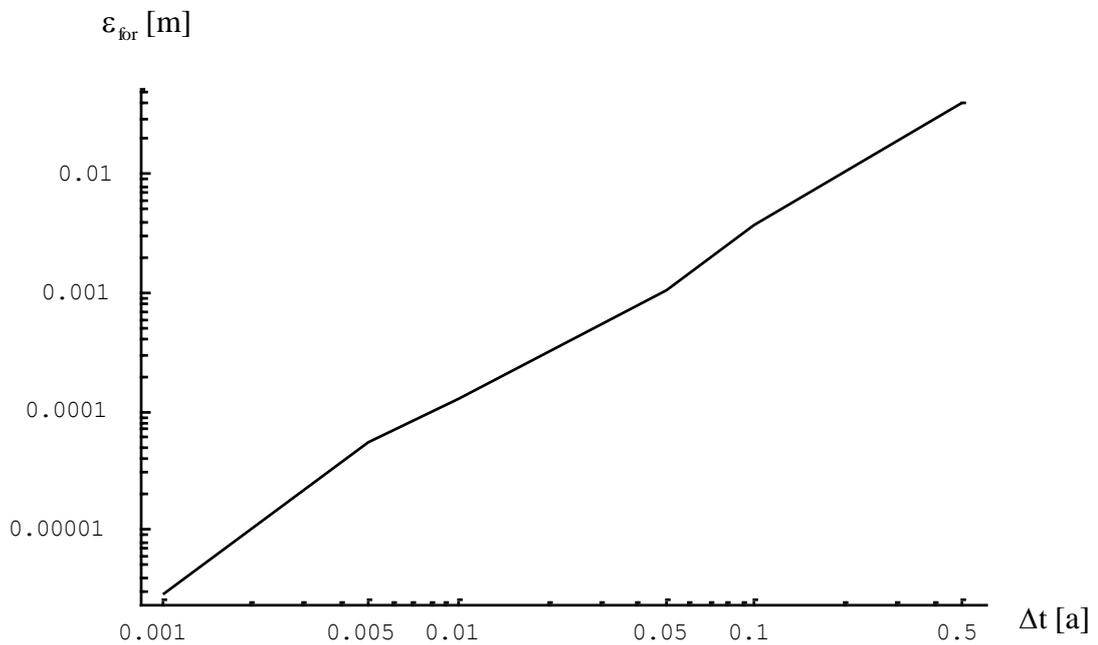


Figura F.1 – Valores do erro absoluto forte em função do incremento de tempo

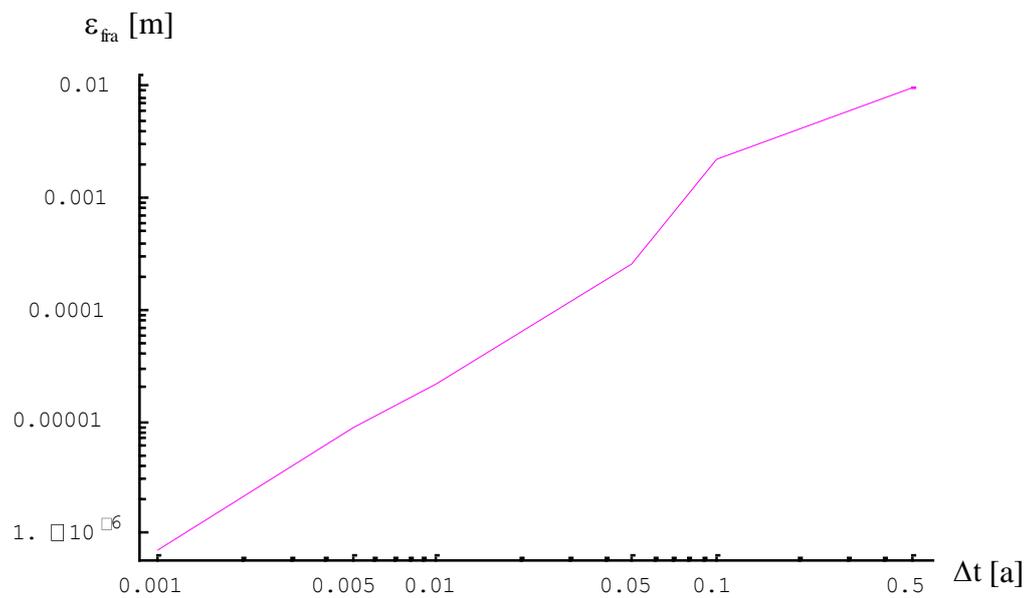


Figura F.2 – Valores do erro absoluto fraco em função do incremento de tempo

Observa-se, com o auxílio das Figs. F.1 e F.2, que os erros absolutos forte, ε_{for} , e fraco, ε_{fra} , tendem a 0, à medida que o incremento de tempo Δt também tende a 0.

Este resultado mostra que a aproximação numérica do processo de Ito, Y_N , representado pela Eq. (F.1), atende aos critérios de convergência forte e fraco, representados pelas Eqs. (F.14) e (F.15), respectivamente. Conseqüentemente, pode-se afirmar que a solução numérica, $Y_N(t)$, converge para a solução exata, $X(t)$.

O formato da curva do erro absoluto forte, ε_{for} , se aproxima de uma reta com inclinação aproximadamente constante no gráfico log-log, para valores de Δt no intervalo $I_{\Delta t} = [10^{-3}, 10^{-1}]$.

Já para o erro absoluto fraco, ε_{fra} , observa-se que sua curva tem um formato aproximado de uma reta no gráfico log-log, porém sua inclinação aumenta bruscamente para valores de Δt no intervalo $I_{\Delta t} = [5 \times 10^{-2}, 10^{-1}]$.

Esta discrepância pode ser atribuída à utilização de poucos valores de X_T e $Y_N(T)$, para cada valor de Δt , na determinação dos erros absolutos forte e fraco. Como pode ser visto nas Tabelas F.1, F.2 e F.3, são utilizados apenas 10 valores de X_T e $Y_N(T)$, para cada valor de Δt .

Na Fig. F.3 são mostradas simultaneamente as curvas dos erros absolutos forte, ε_{for} , e fraco, ε_{fra} , em função do incremento de tempo, Δt .

Observa-se, com o auxílio da Fig. F.3 que o erro absoluto fraco, ε_{fra} , é sempre menor que o erro absoluto forte, ε_{for} , em todo o intervalo $I_{\Delta t} = [10^{-3}, 5 \times 10^{-1}]$.

Esse resultado já era esperado, e evidencia o fato de que é mais fácil atender ao critério de convergência fraca do que ao critério de convergência forte, como os próprios nomes sugerem.

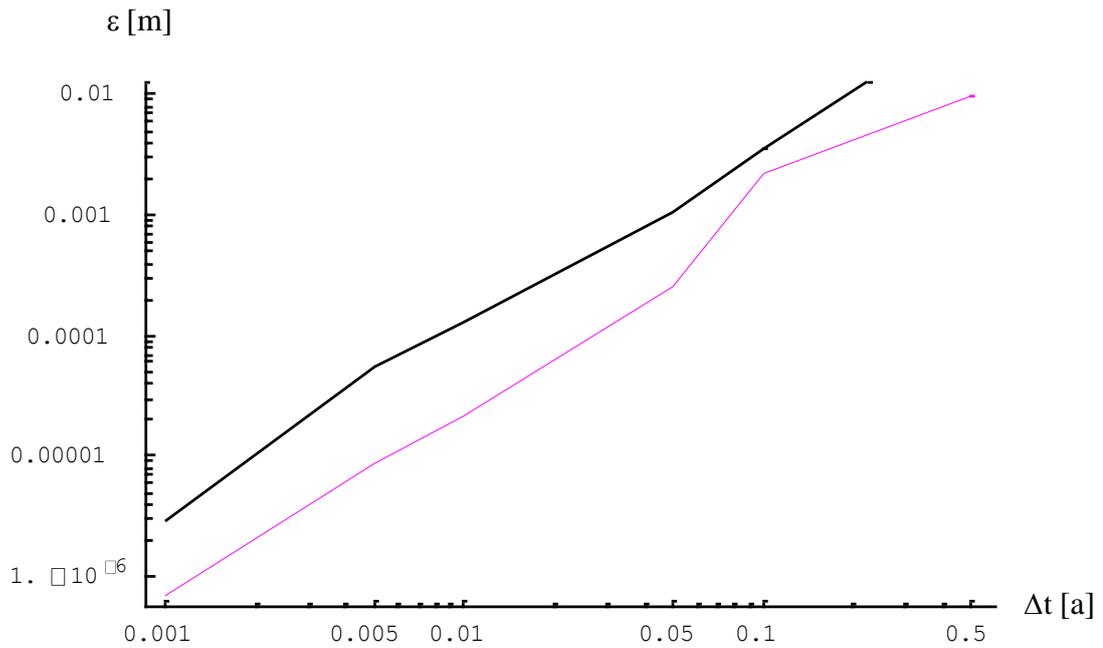


Figura F.3 – Valores dos erros absolutos forte e fraco em função do incremento de tempo

F.1.4 ESTABILIDADE

Conforme mostrado na seção 4.11.4.4, a estabilidade de uma aproximação numérica de um processo estocástico de Ito pode ser analisada, utilizando-se os métodos dos momentos (assintoticamente p-estável e exponencialmente p-estável) e o segundo método de Lyapunov (KLOEDEN & PLATEN, 1999; MAHONY, 2013; HIGHAM, 2010; SAYTO, 2013; SAYTO & MITSUI, 2002; HERZOG, 2010).

Como ilustração, será mostrada neste apêndice apenas a utilização do método M-estável por ser o mais simples, já que os resultados apresentados na Fig. 6.14 indicam que o método de Euler-Maruyama é estável para o problema tratado nesta tese, no intervalo de tempo de 0 a 300 anos.

Neste método, uma solução $X(t)$ de um processo estocástico de Ito tem estabilidade média (*mean stability*) ou M-estabilidade se:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} E(|X(t)|) = 0 \quad (\text{F.16})$$

ou seja, a solução $X(t)$ é estável na média, se o limite da média do módulo de $X(t)$ tender a 0, quando t tender a infinito.

Na seção 4.11.2 foi mostrado que o método de Euler-Maruyama para um processo estocástico de Ito pode ser representado pela seguinte equação:

$$Y_{i+1} = Y_i + a(t, Y_i) \cdot \Delta t + b(t, Y_i) \cdot \Delta W_i \quad (\text{F.17})$$

onde $\Delta W_i = W_{\tau_{i+1}} - W_{\tau_i}$ e Y_0 é a condição de valor inicial do problema.

Aplicando-se o método de Euler-Maruyama à Eq. (F.1) e utilizando-se as relações $Y_i = X_i$ e $\Delta t = h$, obtém-se:

$$X_{i+1} = X_i + [-b \cdot X_i - c] \cdot h + \left(\frac{F_d}{n}\right) \cdot \Delta W_i \quad (\text{F.18})$$

Determinando-se a média em ambos os membros da Eq. (F.18) obtém-se a seguinte equação:

$$E(X_{i+1}) = E(X_i) + E([-b \cdot X_i - c] \cdot h) + E\left(\left(\frac{F_d}{n}\right) \cdot \Delta W_i\right) \quad (\text{F.19})$$

Considerando-se os intervalos de tempo constantes ($h = \text{constante}$) e lembrando que também são constantes os parâmetros b , c , F_d e n , a Eq. (F.19) pode ser colocada na seguinte forma:

$$E(X_{i+1}) = E(X_i) - b \cdot h \cdot E(X_i) - c \cdot h + \left(\frac{F_d}{n}\right) \cdot E(\Delta W_i) \quad (\text{F.20})$$

Conforme mencionado anteriormente, o processo de Wiener, W_i , é definido como um processo estocástico que possui média igual a 0 (OKSENDAL, 2000; SAUER, 2012). Assim:

$$E(\Delta W_i) = 0 \quad (\text{F.21})$$

Substituindo-se a Eq. (F.21) na Eq. (F.20) obtém-se a seguinte equação:

$$E(X_{i+1}) = (1 - b.h).E(X_i) - c.h \quad (\text{F.22})$$

Fazendo-se $i = 0$ na Eq. (F.22) observa-se que:

$$E(X_1) = (1 - b.h).E(X_0) - c.h \quad (\text{F.23})$$

Para $i = 1$, observa-se que a Eq. (F.22) possui a seguinte forma:

$$E(X_2) = (1 - b.h)^2.E(X_0) - [c.h + (1 - b.h).c.h] \quad (\text{F.24})$$

Fazendo-se substituições sucessivas dos valores de i na Eq. (F.22), obtém-se a seguinte forma geral para essa equação:

$$E(X_i) = (1 - b.h)^i.E(X_0) - c.h.[1 + (1 - b.h) + (1 - b.h)^2 + \dots + (1 - b.h)^{i-1}] \quad (\text{F.25})$$

O segundo termo do membro direito da Eq. (F.25) é a soma dos termos de uma progressão geométrica (PG) cujo primeiro termo é 1 e a razão é $(1 - b.h)$. Levando-se este fato em consideração, observa-se que essa equação pode ser colocada na seguinte forma:

$$E(X_i) = [E(X_0) + \frac{c}{b}].(1 - b.h)^i - \frac{c}{b} \quad (\text{F.26})$$

Das Eqs. (F.16) e (F.26) observa-se que o critério de estabilidade, para o método de Euler-Maruyama, requer que:

$$\lim_{i \rightarrow \infty} E(|X_i|) = \lim_{i \rightarrow \infty} \left\{ \left| \left[E(X_0) + \left(\frac{c}{b}\right) \right] \cdot (1 - b \cdot h)^i - \left(\frac{c}{b}\right) \right| \right\} = 0 \quad (\text{F.27})$$

Analisando-se a Eq. (F.27), observa-se que ela só é verdadeira quando $h = 0$ e $E(X_0) = 0$, porém, estas condições são muito restritivas e não atendem as necessidades do problema em questão.

Outra alternativa, é considerar como verdadeira a desigualdade $|1 - b \cdot h| < 1$, que faz o limite da Eq. (F.27) tender a uma constante quanto i tende a ∞ , e obter a seguinte equação:

$$\lim_{i \rightarrow \infty} E(|X_i|) = \left| -\left(\frac{c}{b}\right) \right| \quad (\text{F.28})$$

Para o caso do repositório de Abadia de Goiás, observa-se que $\left(\frac{c}{b}\right) < 0$, logo a Eq. (F.28) pode ser colocada na seguinte forma equivalente:

$$\lim_{i \rightarrow \infty} E(|X_i|) = -\left(\frac{c}{b}\right) \quad (\text{F.29})$$

De acordo com SAITO (2013) e com base na Eq. (F.29), observa-se que a solução numérica X_i não é numericamente estável na média (it is *not numerically stable in mean*), mas é consistente assintoticamente na média (*asymptotically consistent in mean*), com assíntota igual a $-\left(\frac{c}{b}\right)$. Em outras palavras, pode-se afirmar que a solução numérica X_i não é estável na média, embora seja estável assintoticamente na assíntota $-\left(\frac{c}{b}\right)$.

Da condição $|1 - b.h| < 1$, pode-se determinar o intervalo de validade do incremento de tempo h .

Com este propósito, devem-se considerar as seguintes situações:

$$1 - b.h < 0 \quad \Rightarrow \quad |1 - b.h| = b.h - 1 \quad \Rightarrow \quad h < \frac{2}{b} \quad (\text{F.30})$$

$$1 - b.h \geq 0 \quad \Rightarrow \quad |1 - b.h| = 1 - b.h \quad \Rightarrow \quad h > 0 \quad (\text{F.31})$$

Com base nas Eqs. (F.30) e (F.31), observa-se que a análise de estabilidade do método de Euler-Maruyama, na solução da Eq. (F.1), conduz ao intervalo $0 < h < \frac{2}{b}$, que é ilustrado na Fig. F.4.

Para o caso do repositório de Abadia de Goiás, o valor de b é igual a $0,01575 a^{-1}$. Substituindo-se este valor no intervalo de h obtém-se o intervalo $0 < h < 126,98 a$, indicando que, para o caso em estudo, o método de Euler-Maruyama é estável para valores de h compreendidos em um intervalo aberto muito grande, ou seja, de 0 a 126,98 anos.

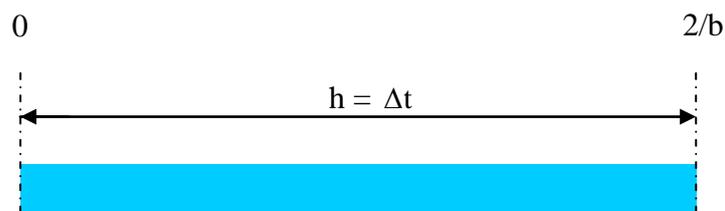


Figura F.4 – Intervalo do incremento de tempo h determinado pela análise de estabilidade do Método de Euler-Maruyama