

**MINISTÉRIO DA DEFESA
EXÉRCITO BRASILEIRO
DEPARTAMENTO DE CIÊNCIA E TECNOLOGIA
INSTITUTO MILITAR DE ENGENHARIA
CURSO DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA**

VINICIUS CORDEIRO MACHADO

**MODELAGEM COMPUTACIONAL DA DISPERSÃO DE AGENTES
RADIOLÓGICOS EM AMBIENTES ABERTOS**

**RIO DE JANEIRO
2023**

VINICIUS CORDEIRO MACHADO

MODELAGEM COMPUTACIONAL DA DISPERSÃO DE AGENTES
RADIOLÓGICOS EM AMBIENTES ABERTOS

Projeto Final de Curso apresentado ao Curso de Graduação em Engenharia Química do Instituto Militar de Engenharia, como requisito parcial para a obtenção do título de Bacharel em Engenharia Química.

Orientadores: Jakler Nichele Nunes, D.Sc. (IME)
 Rodrigo Carneiro Curzio, M.Sc. (IDQBRN)

Rio de Janeiro
2023

©2023

INSTITUTO MILITAR DE ENGENHARIA

Praça General Tibúrcio, 80 – Praia Vermelha

Rio de Janeiro – RJ CEP: 22290-270

Este exemplar é de propriedade do Instituto Militar de Engenharia, que poderá incluí-lo em base de dados, armazenar em computador, microfilmар ou adotar qualquer forma de arquivamento.

É permitida a menção, reprodução parcial ou integral e a transmissão entre bibliotecas deste trabalho, sem modificação de seu texto, em qualquer meio que esteja ou venha a ser fixado, para pesquisa acadêmica, comentários e citações, desde que sem finalidade comercial e que seja feita a referência bibliográfica completa.

Os conceitos expressos neste trabalho são de responsabilidade do autor e dos orientadores.

Cordeiro Machado, Vinicius.

Modelagem computacional da dispersão de agentes radiológicos em ambientes abertos / Vinicius Cordeiro Machado. – Rio de Janeiro, 2023.

61 f.

Orientadores: Jakler Nichele Nunes e Rodrigo Carneiro Curzio.

Projeto Final de Curso (graduação) – Instituto Militar de Engenharia, Engenharia Química, 2023.

1. Dispersão. 2. CFD. 3. Modelagem. 4. Advecção-Difusão. 5. Estocástico. i. Nichele Nunes, Jakler (orient.) ii. Carneiro Curzio, Rodrigo (orient.) iii. Título

VINICIUS CORDEIRO MACHADO

**Modelagem computacional da dispersão de agentes
radiológicos em ambientes abertos**

Projeto Final de Curso apresentado ao Curso de Graduação em Engenharia Química do Instituto Militar de Engenharia, como requisito parcial para a obtenção do título de Bacharel em Engenharia Química.

Orientadores: Jakler Nichele Nunes e Rodrigo Carneiro Curzio.

Aprovada em 05 de outubro de 2023, pela seguinte banca examinadora:



Prof. Jakler Nichele Nunes - D.Sc. do IME - Presidente



Prof. Breno Ribeiro Mascarenhas - M.Sc. do IME



Prof. Matheus Leão Pereira - M.Sc. do IME



Prof. Rodrigo Carneiro Curzio - M.Sc. do IDQBRN

Rio de Janeiro
2023

AGRADECIMENTOS

À minha mãe Patricia, por todo o esforço por ser uma pessoa presente e preocupada com a minha saúde, educação e alimentação. Sem dúvidas, seu carinho e amor me fizeram ser uma pessoa mais humana e empática. Te amo, dona Patricia.

Ao meu irmão Caio, pela amizade e parceria desde sempre. Sua forma leve de levar a vida e resolver conflitos me inspira a ser uma pessoa mais tranquila. Nunca me esqueço do dia que nós fomos à noite na praia... Foi um dos momentos mais incríveis e de maior aprendizado que tive até hoje. Te amo, CFOP.

Ao meu pai Robson, pela confiança de apoiar aquele indisciplinado jovem aluno da Escola Preparatória de Cadetes-do-Ar a começar a trajetória rumo ao sonho de ser um engenheiro. Seu jeito metódico me inspirou organização, foco e ousadia para conseguir passar no concurso do IME, algo que sonhamos juntos por muito tempo. Muito obrigado.

Às minhas amigas Laís e Gabriela, pela amizade de sempre e para sempre. Obrigado por todas as conversas, apoio e presença incondicional em todos esses anos. Ter conhecido vocês na época de Apogeu realmente foi uma grata coincidência do destino. Não posso deixar de mencionar a família Bonoto por todo o acolhimento, torcida e carinho que sempre me fizeram sentir como parte da família.

A todos os professores que tive contato nos cursos preparatórios, Apogeu e Farias Brito. Em especial: Rafael Alves, por ter confiado em mim logo que saí da EPCAr. Patrícia Barra, ou tia Paty, pela amizade, apoio, confiança e ensinamentos dentro e fora da sala de aula. Dilmer pela sabedoria fora do comum. Airton e Patrícia, pela confiança para me convidar para o Farias Brito. Judson Santos, pelas brilhantes resoluções matemáticas. Carlos Eduardo, pela didática impecável dentro e fora de sala de aula. Sérgio Matos, por tornar Química Orgânica muito mais simples.

Às amizades que fiz em Fortaleza, por todos os momentos de troca de experiências, estudos e muita alegria. Destaco em especial: Aparício Barbosa, Felipe Marquezine, João Pedro Tíbola, Keyser Matheus e Rubens Ramos, todos companheiros do apartamento Ana Bilhar (M5), Alice Cziz, Camila Magalhães, Caroline Alves, Gabriela Leopoldo, Francisco Bruno, Luiz Matheus, Mateus Proença, Marcelo de Deus, Pedrina Vitória, Rafael Pina, Thalya Darlyng, Vítor Juiz e Vitória Coelho. Certamente, 2018 foi um dos melhores anos da minha vida, graças à presença de todos vocês.

Às pessoas que entraram na minha vida de maneira marcante durante o curso no IME, pelos ensinamentos e carinho de sempre! Primeiramente, agradeço à minha companheira Ana Cecília por ter torcido intensamente por este projeto e pela minha trajetória no ano de 2023. Em seguida, agradeço a: Agatha Bruna, Andrew Alves, Andrey

Campos, Bárbara Maia, Bruna Alves, Camilla de Paula, Davi Albulquerque, Felipe Gochi, Iago Woznicza, Hevelyn Braga, Kamylla Marques, Kessiane Belshoff, Jéssica Villar, Laís Araújo, Matheus Paladino, Mestre Gepeto, Tamires Queiroz, Victor Mello, Vinícius Magalhães.

Aos amigos da turma IME 2023, por todos os 5 anos de muita luta e companheirismo. Vivi momentos marcantes no apartamento 5010 no primeiro ano, o apartamento 5006 no segundo ano e tantos outros. Certamente, serão uma saudade diária depois que os nossos queques tomarem os céus da Praça General Tibúrcio.

Aos “Químigos” por todos esses 3 anos de troca intensa. Muitas horas, suor, lágrimas, alegrias e risadas pra enfrentar o QTS mais difícil do IME. Foi muito divertido dividir esses momentos com todos vocês. Nosso time é incrível. Em especial, agradeço a Leandro Iorio por um dia ter salvado a minha vida.

À Seção de Engenharia Química, por todo o suporte e ensinamentos colhidos desde o terceiro ano de graduação. Com toda certeza, a decisão de cursar Engenharia Química teve grande influência pelo ambiente oferecido por todos os profissionais da Seção de Ensino. Em especial, destaco os professores incríveis como o Coronel Alfredo Cruz Júnior (paraninfo da Engenharia Química 2023) e Fernando Peixoto, e o pessoal administrativo da SE, como Major Breno, Capitão Laís Araújo, Capitão Matheus Leão, Servidora Civil Maria Elisabete e Sargento Thiago.

Aos meus queridos orientadores e amigos, Major Jakler Nichele Nunes e Capitão Rodrigo Curzio Carneiro, pela paciência, tempo e dedicação ao longo de todo o ano de 2023. Os senhores foram minha inspiração desde o início deste projeto e fico feliz em perceber que nossa relação ultrapassou as barreiras entre orientador e orientado.

Ao Instituto Militar de Engenharia, casa em que me orgulho muito de estar me graduando, por todo o suporte oferecido.

Ao Instituto de Defesa Química Biológica, Radiológica e Nuclear por terem proposto o tema deste estudo.

Às agências de fomento CAPES, CNPq e FAPERJ pelo incentivo à pesquisa no país e, em especial, no IME.

Por fim, agradeço ao Exército Brasileiro pela oportunidade de estar me graduando na melhor escolha de engenharia do país.

*“A vida é como um lápis que certamente se esgotará,
mas deixará a bela escrita da vida.”
(Eiichiro Oda)*

RESUMO

Acidentes nucleares são eventos com um grande potencial para causar uma significativa dispersão de material radioativo na atmosfera, resultando em exposição a altas doses de radiação e contaminação. Com isso, entender como ocorre a liberação de agentes radiológicos na atmosfera é de prima importância para que sejam adotadas medidas de intervenção do ponto de vista da Proteção Radiológica. Dessa forma, a investigação do comportamento de um escoamento atmosférico, utilizando os conceitos de Mecânica dos Fluidos, torna-se relevante para a identificação dos focos de maior concentração da nuvem de material radioativo, aprimorando a defesa contra esse tipo de agente. O presente estudo tem por objetivo determinar como se comporta a dispersão de agentes radiológicos no meio sob efeito de um vento estocástico, provenientes da liberação atmosférica oriunda de um acidente nuclear hipotético em um reator nuclear de pequeno porte (SMR) que emite radiação continuamente ao longo do tempo. Na análise desse comportamento, propôs-se um estudo por simulação desse fenômeno, mediante uso de modelagem computacional. Para tal, utilizou-se a equação da Advecção-Difusão, que foi o modelo físico base para toda a construção do trabalho. O campo de velocidades foi inicialmente caracterizado com uma direção fixa e, na sequência, variou-se esse parâmetro a cada determinados passos de tempo (a partir de um processo de Wiener com variância 1), de forma que, periodicamente, a direção e intensidade do vento sofressem alterações. A intensidade dessa turbulência é dependente dos critérios de Pasquill-Gifford para definição do nível de estabilidade atmosférica no momento da dispersão. O Método das Diferenças Finitas foi utilizado na solução da equação da Advecção-Difusão, evidenciando as diferenças inerentes aos métodos explícito e implícito, para os casos unidimensional e bidimensional. Destaca-se, ainda, a utilização do Método de Euler-Maruyama para definição do termo estocástico inerente ao campo de velocidades. Além disso, foram analisadas os números adimensionais de Peclet, Courant e Fourier e o impacto desses valores na escolha da estratégia computacional utilizada. Outrossim, destacaram-se as peculiaridades dos escoamentos unidimensional e bidimensional, sob a ótica de escoamentos incompressíveis, diferenciando o padrão que o campo escalar de concentrações assume ao longo do tempo. Por outra perspectiva, foi analisada a dose efetiva acumulada a partir da dispersão de agentes radiológicos ao longo do tempo em uma dada região. Essa análise possibilita uma visão inicial da periculosidade da área observada, oferecendo sugestões de medidas emergenciais de Proteção Radiológica. Por fim, ressalta-se que este estudo deu um importante passo na compreensão dos fenômenos de escoamentos atmosféricos e do planejamento de respostas em situações de emergência, cuja aplicação não é restrita apenas a acidentes nucleares, mas também a instalações médicas e industriais que façam uso de fontes radioativas.

Palavras-chave: Dispersão. CFD. Modelagem. Advecção-Difusão. Estocástico.

ABSTRACT

Nuclear accidents are events with significant potential to cause a substantial dispersion of radioactive material into the atmosphere, resulting in exposure to high doses of radiation and contamination. Therefore, understanding how the release of radiological agents occurs in the atmosphere is of paramount importance for the adoption of intervention providences from the perspective of Radiological Protection. In this regard, investigating the behavior of turbulent flow using Fluid Mechanics concepts becomes relevant for identifying areas of higher concentration of the radioactive material cloud, thereby enhancing defense against such agents. The present project aims to determine the dispersion behavior of radiological agents in a medium under the influence of stochastic wind, originating from atmospheric dispersion resulting from a hypothetical nuclear accident in a small modular nuclear reactor (SMR) continuously emitting radiation over time. In the analysis of this behavior, a simulation study of this phenomenon was proposed using computational modeling. To this end, the Advection-Diffusion equation was used as the fundamental physical model for the entire work. The velocity field was initially characterized with a fixed direction and, subsequently, this parameter was varied at each certain time step (based on a Wiener process with variance 1), so that, periodically, the direction and intensity of the wind changed. The intensity of this turbulence depends on the Pasquill-Gifford criteria for defining the level of atmospheric stability at the time of dispersion. The Finite Difference Method was used to solve the Advection-Diffusion equation, highlighting the inherent differences between explicit and implicit methods for one-dimensional and two-dimensional cases. Also noteworthy is the use of the Euler-Maruyama Method to define the stochastic term inherent to the velocity field. Additionally, dimensionless parameters such as Peclet, Courant, and Fourier were analyzed, along with their impact on the computational strategy adopted. Furthermore, the peculiarities of one-dimensional and two-dimensional flows were emphasized, considering incompressible flows and differentiating the pattern that the scalar concentration field assumes over time. From another perspective, the effective accumulated dose resulting from the dispersion of radiological agents over time in a given area was analyzed. This analysis provides an initial assessment of the area's hazard, offering suggestions for emergency Radiological Protection measures. Finally, it is worth noting that this study represents a significant step in understanding atmospheric flow phenomena and emergency response planning, with applications not limited solely to nuclear accidents but also extending to medical and industrial facilities utilizing radioactive sources.

Keywords: Dispersion. CFD. Modeling. Advection-Diffusion. Stochastic.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Dispersão atmosférica de Cs-137 por ocasião do acidente de Chernobyl	16
Figura 2 – Esquema de turbulência e vorticidade na CLP	22
Figura 3 – Esquema de elemento de volume de fluido	25
Figura 4 – Comparação entre um modelo matemático determinístico e um modelo matemático estocástico	28
Figura 5 – Região finita de dimensões $L \times L$	30
Figura 6 – Ilustração do espalhamento de um ataque QBRN dentro de uma área quadrada com a presença de vento	32
Figura 7 – Malha genérica de diferenças finitas	32
Figura 8 – Esquema de discretização das EDP Parabólicas	33
Figura 9 – Dependência entre os pontos para o método explícito	37
Figura 10 – Dependência entre os pontos para o método implícito	38
Figura 11 – Comparação entre abordagem explícita e implícita	44
Figura 12 – Diferença entre o método implícito e o explícito	45
Figura 13 – Variação da média e desvio padrão da diferença para diferentes malhas	45
Figura 14 – Comparação entre modelo determinístico e estocástico unidimensional .	47
Figura 15 – Variação no perfil de concentrações	47
Figura 16 – Perfil de concentrações do modelo determinístico para o caso bidimensional	48
Figura 17 – Perfil de concentrações do modelo estocástico para o caso bidimensional	49
Figura 18 – Caso de acúmulo de radionuclídeos	50
Figura 19 – Perfil de Dose Efetiva Acumulada (mSv)	51
Figura 20 – Área de evacuação imediata	51
Figura 21 – Áreas de ação de proteção	52
Figura 22 – Tempo de Execução por quantidade de pontos na malha	53

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Classificação da estabilidade atmosférica com base no modelo de Pasquill	22
Tabela 2 – Valores utilizados para simulação computacional	42
Tabela 3 – Estrutura de pastas do projeto	60

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

CDS	<i>Central Difference Scheme</i>
CFD	computational fluid dynamics
CNEN	Comissão Nacional de Energia Nuclear
CLP	camada limite planetária
DQBRN	Defesa Química, Biológica, Radiológica e Nuclear
EDO	equação diferencial ordinária
EDP	equação diferencial parcial
EDE	equação diferencial estocástica
GPC	<i>generalized polynomial chaos</i>
ICRP	<i>International Commission on Radiological Protection</i>
ICRU	<i>International Commission on Radiation Units and Measurements</i>
IDQBRN	Instituto de Defesa Química, Biológica, Radiológica e Nuclear
IME	Instituto Militar de Engenharia
IND	<i>improvised nuclear device</i>
MCTIC	Ministério da Ciência, Tecnologia, Inovações e Comunicação
MDF	método das diferenças finitas
MVF	método dos volumes finitos
NRC	<i>Nuclear Regulatory Commission</i>
RANS	<i>Reynolds Averaged Navier-Stokes</i>
RDD	<i>radioactive dispersal device</i>
SMR	<i>Small Modular Reactor</i>
TDMA	<i>Tridiagonal Matrix Algorithm</i>
WL	<i>Working Level</i>

LISTA DE SÍMBOLOS

b	parâmetro de relevância estocástica
c	concentração das partículas por volume
Co	número de Courant
D	coeficiente de difusão
E	dose efetiva acumulada
\mathbf{f}	força de campo
Fo	número de Fourier
g	aceleração da gravidade
\mathbf{J}	vetor fluxo de difusão
l_m	comprimento característico
L	comprimento do domínio espacial
M	massa total
n	número de nós na malha
N	número aleatório
\dot{m}	variação temporal de massa
p	pressão
Pe	número de Peclet
Re	número de Reynolds
\mathbf{u}	campo de velocidades
t	tempo
t_f	tempo final de simulação
T	período total de exposição
U	velocidade média
V	Variância

W	processo de Wiener
X	variável genérica
δ'	delta de Kronecker
λ	comprimento adimensional
μ	viscosidade dinâmica
μ^b	viscosidade dinâmica bulk
μ_m	média
ϕ	concentração adimensional
ρ	densidade
σ	desvio padrão
τ	tensão viscosa
ξ	parâmetro estocástico

Sobrescrito

t	referente ao tempo
T	transposta
+	limite lateral pela direita
-	limite lateral pela esquerda

Subscrito

A	substância genérica A
in	entrada
s	fonte
out	saída
i	referente à distância
j	referente à distância
x	referente à coordenada x
y	referente à coordenada y

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	16
1.1	REVISÃO DA LITERATURA	17
1.2	DEFINIÇÃO DO PROBLEMA E OBJETIVOS	19
1.3	JUSTIFICATIVA	20
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	21
2.1	CONCEITOS SOBRE FENÔMENOS ATMOSFÉRICOS	21
2.2	PROTEÇÃO RADIOLÓGICA E QUANTIFICAÇÃO EM EVENTOS RADIO- LÓGICOS	22
2.3	EQUAÇÕES DE GOVERNO DA DISPERSÃO DE PLUMAS RADIOLÓGICAS	23
2.3.1	EQUAÇÃO DA CONTINUIDADE	24
2.3.2	EQUAÇÃO DE MOMENTO LINEAR	25
2.3.3	LEIS DE FICK	26
2.3.4	EQUAÇÃO DA ADVECÇÃO-DIFUSÃO	26
2.4	EQUAÇÕES DIFERENCIAIS ESTOCÁSTICAS	27
2.4.1	PROCESSO DE WIENER	28
3	METODOLOGIA	30
3.1	DEFINIÇÃO DO PROBLEMA	30
3.2	MÉTODO DAS DIFERENÇAS FINITAS	31
3.2.1	ANÁLISE DA ESTABILIDADE DE SOLUÇÃO NUMÉRICA	34
3.2.2	ADIMENSIONALIZAÇÃO DO MODELO	35
3.2.3	EQUAÇÕES ALGÉBRICAS DISCRETIZADAS	36
3.2.3.1	MÉTODO EXPLÍCITO	37
3.2.3.2	MÉTODO IMPLÍCITO	37
3.3	MÉTODO DE EULER-MARUYAMA	39
3.4	INDEPENDÊNCIA DE MALHA	40
3.5	SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL	41
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	43
4.1	MÉTODO IMPLÍCITO E MÉTODO EXPLÍCITO DETERMINÍSTICO UNI- DIMENSIONAL	43
4.2	MODELO DETERMINÍSTICO E MODELO ESTOCÁSTICO	46
4.2.1	UNIDIMENSIONAL	46
4.2.2	BIDIMENSIONAL	47
4.3	DOSE EFETIVA ACUMULADA	50

4.4	CUSTO COMPUTACIONAL	53
5	CONCLUSÃO	55
	REFERÊNCIAS	57
	APÊNDICE A – SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL	60
A.1	PRÉ-REQUISITOS	60
A.2	ESTRUTURA DO PROJETO	60

1 INTRODUÇÃO

No estudo da dispersão de partículas e dos processos envolvendo a transferência de massa, consideram-se os efeitos combinados de difusão e advecção, de forma a descrever adequadamente alguns fenômenos físicos. Um caso importante relacionado ao tema envolve a dispersão de agentes radiológicos na atmosfera (JIMENEZ; ANA, 2016). Isso porque eventos envolvendo esse tipo de dispersão têm ocorrido de forma marcante desde o domínio das tecnologias nucleares no século XX. Assim sendo, destacam-se os acidentes em usinas nucleares (Chernobyl - Ucrânia e Fukushima - Japão), o acidente envolvendo a circulação de cápsulas de Cs-137 (Goiânia - Brasil) ou ainda na forma de névoa de agentes de guerra nuclear, como aquelas produzidas por dispositivos de dispersão radiológica (RDD - *radioactive dispersal device*) e dispositivos nucleares improvisados (IND - *improvised nuclear device*) (GREEN *et al.*, 2016). A Figura 1 apresenta um mapa de calor da dispersão atmosférica do Cs-137 a partir do acidente com reator nuclear da usina de Chernobyl.

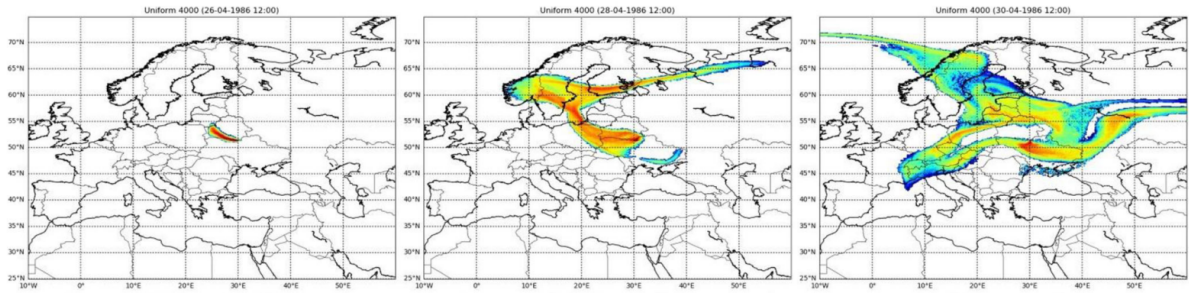


Figura 1 – Dispersão atmosférica de Cs-137 por ocasião do acidente em Chernobyl (BILGIÇ; GÜNDÜZ, 2021).

O transporte de agentes radiológicos na atmosfera pode ser descrito sob uma abordagem macroscópica pela equação da Advecção-Difusão, que é uma equação diferencial parcial (EDP) parabólica, com forma geral expressa pela Eq. 1.1 (ANDERSON; TANNEHILL; PLETCHER, 2016)

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\nabla^2 c - \nabla \cdot (\mathbf{u}c) \quad (1.1)$$

em que $c = c(t, x, y, z)$ é o campo escalar que representa a concentração das partículas dada em número de partículas por unidade de volume; \mathbf{u} é o campo de velocidades por meio do qual as partículas são transportadas; e D é o coeficiente de difusão molecular. O primeiro termo da equação, $\frac{\partial c}{\partial t}$, descreve a taxa de variação da concentração da substância. Já o segundo termo, $D\nabla^2 c$, descreve o movimento difusivo das partículas. Por fim, o terceiro termo, $\nabla \cdot (\mathbf{u}c)$, descreve como as partículas são transportadas no espaço, representando o termo advectivo (JIMENEZ; ANA, 2016).

Para que as investigações acerca do tema sejam mais realistas, é importante considerar também as flutuações estocásticas do campo de velocidades do meio em que ocorre a dispersão e da fonte geradora de contaminação (ANCEY; BOHORQUEZ; HEYMAN, 2015). Essas flutuações são incluídas nas equações de conservação a partir de termos estocásticos, fazendo com que tais equações passem a ser classificadas como equações diferenciais estocásticas (EDE).

Dessa maneira, no contexto da equação da Advecção-Difusão, os ruídos estocásticos podem ser introduzidos de duas maneiras: adicionando um ruído branco à equação determinística (RICHARDSON, 2017) (Eq. 1.1), conforme Eq. 1.2; ou na forma de um termo fonte, considerando um campo de velocidades aleatórias (WAN; XIU; KARNIADAKIS, 2004), segundo Eq. 1.3.

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\nabla^2 c - \nabla \cdot (\mathbf{u}c) + \xi(t, x, y, z) \quad (1.2)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\nabla^2 c - \nabla \cdot (\mathbf{u}(x, y, z; \xi)c) \quad (1.3)$$

sendo $\xi(t, x, y, z)$ um ruído branco.

Pelo fato de a EDE apresentar termos de natureza aleatória, a solução da equação também tem natureza estocástica e a evolução da distribuição temporal de probabilidade do ruído branco pode ser calculada por meio da Equação de Fokker-Planck (DITLEVSEN, 2003).

Considerando o contexto apresentado, o presente projeto propõe uma investigação computacional da dispersão atmosférica de agentes radiológicos empregando equações diferenciais estocásticas. Ainda, à guisa de introdução, serão apresentados uma breve revisão da literatura baseada em uma cronologia do estudo do tema; a demarcação do problema da pesquisa que norteará o estudo pretendido; os consequentes objetivos da pesquisa elencados a partir da definição do problema; e, finalmente, as justificativas que motivam o desenvolvimento deste projeto.

1.1 Revisão da Literatura

Ao longo dos anos, muitos estudos envolvendo a dispersão de partículas foram realizados, com o objetivo de determinar e analisar com maior efetividade a distância que um agente estaria da sua fonte após um determinado período de tempo. Para isso, diversas estratégias envolvendo a utilização de modelos matemáticos foram adotadas, possibilitando, assim, uma progressiva continuidade nos estudos da equação de Advecção-Difusão. A literatura aponta duas abordagens gerais para tratar o problema da dispersão de partículas: a experimental, utilizando modelos físicos e estudos de campo; e a computacional, que é o foco deste projeto, empregando métodos numéricos determinísticos e estocásticos.

Taylor (1921), Richardson (1925), Rossby (1932), Sutton (1932, 1947a, 1947b, 1950) apresentaram teorias para a difusão turbulenta, analisando o comportamento de gases e particulados na atmosfera, por meio da simulação computacional.

Boçon (1998), utilizando técnicas de Fluidodinâmica Computacional (CFD), estudou a dispersão de poluentes na microescala atmosférica por meio do modelo matemático tridimensional a partir da aplicação da equação da Advecção-Difusão aliada ao modelo de turbulência $\kappa - \epsilon$ para o cálculo do escoamento e a quantificação da turbulência atmosférica (BOÇON *et al.*, 1998).

Sklavounos et al. (2004) voltaram seus estudos para a análise e comparação de modelos de turbulência, a saber, $\kappa - \epsilon$; $\kappa - \omega$; SSG (*Speziale-Sarkar-Gatski*) e SST (*Shear Stress Transport*). Os resultados numéricos dos comparativos foram realizados utilizando dados experimentais gerados nos ensaios de campo da Ilha Torney, no sul da Inglaterra, e, no geral, apresentaram valores satisfatórios.

Wan et al. (2004) propuseram uma solução numérica para a equação da Advecção-Difusão bidimensional com transporte advectivo aleatório. A metodologia utilizada para análise dos fatores estocásticos foi o GPC (*Generalized Polynomial Chaos*), visto que sua aplicação é mais eficiente para representar processos não-gaussianos.

Zhang et al. (2007) utilizaram o método de Euler para estudar a concentração de particulados em espaços confinados, no contexto da dispersão desse material num ambiente urbano, com o ar atmosférico sendo descrito pelas equações RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*). Dessa forma, os autores conseguiram verificar que, se os agentes contaminantes estiverem em concentrações na ordem de partes por milhão em relação ao ar atmosférico, o modelo físico turbulência $\kappa - \epsilon$ é adequado para descrever a realidade.

Kakosimos et al. (2011) abordaram a dispersão de material particulado proveniente das atividades de decapeamento de minas de extração de lignita, cuja metodologia envolve comparar a abordagem numérica do modelo Euleriano-Lagrangeano e a abordagem analítica do modelo Gaussiano. Para isso, os casos de estudos envolviam utilizar um regime permanente de escoamento, com três velocidades e três direções de vento.

Kranzfeld (2019) pesquisou a dispersão de jatos de aerossóis, de forma a obter correlações entre velocidade média e concentração média do particulado. O objeto de sua análise envolveu avaliar de que maneira alguns parâmetros do aerossol, como concentração, diâmetro da partícula, massa específica da partícula e velocidade inicial do jato influenciam o transporte das partículas. Para isso, foi utilizado o Método dos Volumes Finitos (MVF) e o método SIMPLE (acrônimo para *Semi-Implicit Method*), um algoritmo largamente utilizado para resolver equações de Navier-Stokes.

Curzio (2020) visou determinar em seu trabalho a melhor blindagem contra radiação ionizante oriunda da dispersão atmosférica de agentes radiológicos. Em sua pesquisa, o

autor identificou que o trajeto da pluma de contaminação depende de alguns fenômenos atmosféricos, como as classes de estabilidade de Pasquill-Gifford e intensidade da turbulência.

Cabe ressaltar que, na literatura, foram encontrados poucos estudos relacionados a dispersões atmosféricas sob a perspectiva de um regime estocástico para quantificar a aleatoriedade dos ventos. Neste contexto, grande parte dos estudos relacionados à dispersão de agentes radiológicos partem do pressuposto do uso da equação de Advecção-Difusão, abordando apenas o modelo matemático em sua forma determinística. O uso do fator estocástico fornece maior acurácia para estudos envolvendo o impacto da poluição atmosférica provocada por incidentes ou acidentes com material radioativo, dada a característica turbulenta intrínseca ao vento.

Dessa forma, há a necessidade de mais estudos sobre possíveis implicações referentes ao vento e à fonte com perturbações estocásticas que descrevam o fenômeno.

1.2 Definição do problema e objetivos

A partir do exposto anteriormente, o emprego da equação da Advecção-Difusão com perturbações estocásticas ainda necessita de maior detalhamento quanto à quantificação das flutuações do campo de velocidades em função do comportamento natural dos ventos na atmosfera e de aleatoriedades na fonte de emissão. Diversas aplicações práticas poderiam ser esclarecidas pela elucidação do comportamento aleatório em função do tempo para descrever as variações atribuídas ao regime dos ventos, que são preponderantes para o entendimento do comportamento dinâmico da dispersão de agentes radiológicos.

Assim sendo, a seguinte pergunta-problema foi estabelecida para conduzir e nortear o desenvolvimento do presente projeto: *Como se comporta a dispersão de agentes radiológicos no meio sob efeito de um vento estocástico?*

Com a definição da pergunta-problema, definiu-se como *objetivo geral* do projeto avaliar, por meio de simulações computacionais, o comportamento da dispersão de agentes radiológicos no meio atmosférico, utilizando a equação da Advecção-Difusão com perturbações estocásticas.

Para alcançar o objetivo geral proposto, os seguintes *objetivos específicos* foram elencados:

- a) investigar por simulações computacionais o transporte de partículas com presença de campo de velocidades unidimensional regular;
- b) investigar por simulações computacionais o transporte de partículas com presença de campo de velocidades unidimensional estocástico;

- c) investigar por simulações computacionais o transporte de partículas com presença de campo de velocidades bidimensional regular;
- d) investigar por simulações computacionais o transporte de partículas com presença de campo de velocidades bidimensional estocástico; e
- e) Interpretar e avaliar o comportamento do resultado das soluções.

1.3 Justificativa

O presente projeto foi proposto pela Seção de Defesa Radiológica e Nuclear (SDRN), do Instituto de Defesa Química, Biológica, Radiológica e Nuclear (IDQBRN) com o objetivo de proporcionar uma capacitação introdutória na área de Fluidodinâmica Computacional (CFD) sob a ótica da dispersão de agentes radiológicos para alunos da graduação do Instituto Militar de Engenharia (IME), de forma a ambientá-los às demandas científico-tecnológicas do Sistema de Defesa Química, Biológica, Radiológica e Nuclear do Exército Brasileiro (SisDQBRNEx).

Além disso, o projeto dá continuidade aos esforços do Laboratório de Fluidodinâmica Computacional Multiescala da Seção de Engenharia Química do IME, que tem desenvolvido estudos na área de fluidodinâmica computacional com aplicações em defesa, como a investigação da dispersão de aerossóis por Kranzfeld (2019).

É importante destacar que a pesquisa deste projeto faz parte da Estratégia Nacional de Defesa e do Plano Estratégico do Exército para o quadriênio 2020-2023 (ação estratégica 3.2.2), visto que os objetivos visam ampliar a capacidade operacional para atuar na prevenção e no combate às ações DQBRN, aperfeiçoando a capacidade operativa do SisDQBRNEx, provendo proteção e apoio a órgãos governamentais (CDAEX, 2019).

Com isso, o projeto pode auxiliar Organizações Militares QBRN na previsão da posição e concentração de um agente radiológico que possa ter sido lançado em algum ambiente, viabilizando o processo da tomada de decisão pelas instâncias superiores do Exército Brasileiro, em evento de liberação radioativa, seja deliberada ou acidental.

Numa perspectiva da atenção a cenários típicos de liberação ambiental de materiais radioativos, seja por ativação de RDD ou acidentes nucleares, o estudo da dispersão de agentes radiológicos fornece ferramentas de tomada de decisão e elaboração de planos mais efetivos ao Exército Brasileiro, no tocante a acidentes QBRN, melhorando o desenvolvimento das ações das equipes de resposta nesse tipo de ambiente operacional. Dessa forma, evita-se uma contaminação desnecessária da tropa ou um espalhamento maior do agente em questão, fatores cruciais para o sucesso na operação, na saúde dos combatentes e, em última instância, na preservação do meio ambiente.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Neste Capítulo, serão apresentados os aspectos teóricos relevantes para o desenvolvimento desta pesquisa. Para isso, serão abordados os principais conceitos sobre os fenômenos atmosféricos; equações governantes da dispersão de plumas radiológicas e os modelos computacionais relativos à dispersão atmosférica.

2.1 Conceitos sobre fenômenos atmosféricos

Para analisar a dispersão de agentes radiológicos, é necessário, primeiro, entender de que maneira os fenômenos atmosféricos é capaz de influenciar a movimentação das partículas. Para isso, define-se a Camada Limite Planetária (CLP), que compreende desde a superfície terrestre até 1500 m de altitude (abaixo da troposfera), como sendo a porção atmosférica que governa o transporte e a dispersão de contaminantes. Nos primeiros 10% da CLP, encontram-se edifícios e elementos variados do relevo, que são responsáveis por um aumento considerável de complexidade na modelagem matemática. Acima dessa primeira parte da CLP, existem poucas variações verticais nos fluxos turbulentos, sendo as forças de campo e do gradiente de pressão as mais relevantes para a descrição dos fenômenos (BOÇON *et al.*, 1998).

Aplicando o conceito de turbulência sob a ótica da CLP, a influência dos ventos (módulo, direção e sentido) e da topografia da região analisada representam variáveis fundamentais para investigar o comportamento da distribuição da concentração de agentes contaminantes como agentes radiológicos, possibilitando a antecipação de eventos críticos no meio ambiente (CURZIO, 2020).

Em relação à topografia da área de interesse, é importante considerar a “rugosidade” do terreno no qual ocorre o escoamento. Em áreas urbanas e florestas, por exemplo, o movimento das partículas sofre intensa interferência, o que gera locais com intensa instabilidade e turbulência próximo ao solo. Na Figura 2, ilustra-se o esquema de formação de vórtices na atmosfera, influenciados pela efeitos de turbulência e pela intensidade e direção dos ventos (BOÇON *et al.*, 1998).

De acordo com a *Nuclear Regulatory Commission* (NRC), existem 5 parâmetros meteorológicos que são fundamentais para determinar a estabilidade atmosférica de uma região, bem como para a preparação para algum possível incidente radiológico, a saber: direção e velocidade do vento a 10 e a 60 metros de altura, temperatura ambiente a 10 metros do solo, precipitação, umidade atmosférica e diferença vertical na temperatura (NRC, 2007).

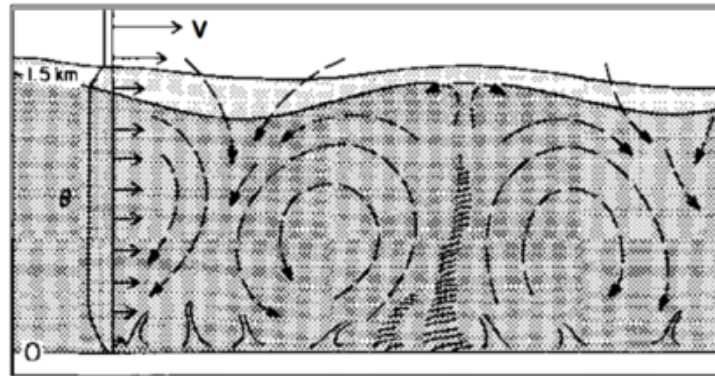


Figura 2 – Esquema de turbulência e vorticidade na CLP (WYNGAARD, 1992).

Especialmente, os parâmetros direção e velocidade do vento possuem relação direta com a classificação de estabilidade atmosférica utilizada pela NRC: o modelo de Pasquill. Esse modelo foi proposto pelo meteorologista inglês Frank Pasquill, com o objetivo de explicar o movimento de camadas mais densas do fluido no sentido descendente enquanto as camadas menos densas ascendem (estratificação atmosférica), baseado em observações meteorológicas, como a intensidade da radiação solar e as coberturas de nuvens na atmosfera. Pasquill propôs o conceito de classes de estabilidade, nominadas de A a F, para quantificar o grau de estabilidade da atmosfera, tornando-se útil nos cálculos de dispersão (PASQUILL; SMITH, 1983).

A Tabela 1 estabelece os critérios utilizados no modelo de Pasquill para classificar a atmosfera das classes A (Extremamente instável) até F (Moderadamente estável).

Tabela 1 – Classificação da estabilidade atmosférica com base no modelo de Pasquill (PASQUILL; SMITH, 1983).

Velocidade do vento (m/s)	Período Diurno			Período Noturno	
	Radiação Solar			Fração de cobertura de nuvens	
	Forte	Média	Fraca	$\geq 4/8$	$\leq 3/8$
<2	A	A-B	B	-	-
2 a 3	A-B	B	C	E	F
3 a 5	B	B-C	C	D	F
5 a 6	C	C-D	D	D	D
>6	C	D	D	D	D

2.2 Proteção Radiológica e Quantificação em Eventos Radiológicos

Devido aos efeitos potencialmente nocivos da radiação ionizante, organizações internacionais surgiram com o objetivo de regular, criar políticas e definir grandezas relativas à Proteção Radiológica, visando descrever os processos de interação da radiação com a matéria e a quantificação dos seus efeitos (determinísticos ou estocásticos). Duas

instituições se destacam nesse cenário: a Comissão Internacional de Unidades e Medidas de Radiação (*International Commission Radiation Units and Measurements* - ICRU) e a Comissão Internacional de Proteção Radiológica (*International Commission Radiological Protection* - ICRP) (ICRP, 2017).

No cenário nacional, a Comissão Nacional de Energia Nuclear (CNEN), autarquia federal vinculada ao Ministério da Ciência, Tecnologia, Inovações e Comunicações (MCTIC), criada em 1956 e estruturada pela Lei 4.118, de 27 de agosto de 1962, para desenvolver a política nacional de energia nuclear, é a instituição responsável por elaborar as normas para o funcionamento de atividades nucleares no Brasil, de acordo com o que é preconizado pela ICRU e ICRP.

A compreensão do comportamento e das propriedades de substâncias radioativas e da interação de tais substâncias com o corpo humano, permitiu determinar níveis máximos de segurança de exposição a radionuclídeos. Especificamente, o elemento Rn^{222} , isótopo mais estável do Rn, é um dos maiores causadores de câncer de pulmão (ICRP, 2010), de forma que a concentração máxima recomendada de exposição é de $300 \text{ Bq} \cdot \text{m}^{-3}$.

Uma maneira utilizada pela NRC para definir a concentração de produtos radioativos de Rn^{222} no ar é o Nível de Trabalho (Working Level - WL). Essa definição considera valores de exposição no ambiente de minas de Urânio e visa estabelecer qual a concentração máxima anual segura a qual um trabalhador pode ser submetido durante a jornada de trabalho. Dessa forma, foi definido que os níveis recomendáveis variam entre 4 mSv e 14 mSv (ICRP, 1991).

Considerando os efeitos potencialmente nocivos da radiação ionizante e a razão de gás Rn^{222} e seus produtos de decaimento, a ICRP define que o coeficiente de dose, grandeza relacionada ao risco nominal, é de $6,7 \cdot 10^{-6} \text{ mSv} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{Bq}^{-1} \cdot \text{h}^{-1}$. Esse valor serve de base para o cálculo da dose efetiva acumulada (E) no corpo humano ao longo de um determinado período de exposição que, baseado numa concentração de radionuclídeos variável no tempo, pode ser expresso pela Eq. 2.1 (ICRP, 2014).

$$E(t) = (6,7 \cdot 10^{-6}) \int_{t_0}^{t_0+T} C(t) dt \quad (2.1)$$

onde T é o período total de exposição (em horas) e $C(t)$ é a concentração de Rn^{222} num instante de tempo (em $\text{Bq} \cdot \text{m}^{-3}$).

2.3 Equações de governo da dispersão de plumas radiológicas

Uma vez que a forma de liberação do material radioativo na atmosfera é relevante, vários modelos foram propostos para estudar modos de liberação atmosférica de material contaminante e sua propagação no espaço (BOÇON *et al.*, 1998). De forma geral, os modelos matemáticos utilizados para estudos de dispersão atmosférica podem ser classificados

segundo as abordagens Euleriana e Lagrangeana, sendo a utilização de uma determinada classe de modelo dependente da complexidade do problema a ser tratado e dos objetivos do estudo.

Na perspectiva Euleriana, a dispersão é estudada em termos de uma equação diferencial para conservação de massa, a qual é resolvida em um domínio fixo no espaço-tempo. Já no modelo Lagrangeano, a trajetória de cada partícula em dispersão representa um ponto de interesse em um campo turbulento, caracterizado por condições iniciais e vínculos físicos específicos. A diferença básica entre as abordagens é que os sistemas Eulerianos operam em um sistema de referência fixo, ao passo que os modelos Lagrangeanos seguem o movimento médio das partículas em movimento. Assim sendo, por padronização, todas as equações do presente projeto estão relacionadas ao sistema Euleriano de referência.

Existem três leis físicas fundamentais que são aplicadas a todo e qualquer fluxo independentemente da natureza do fluido sob consideração. Para cada uma, tem-se uma descrição matemática que descreve o fenômeno em questão (WELTY; RORRER; FOSTER, 2020): Lei de Conservação de Massas e a Equação da continuidade; Segunda Lei de Newton e a Equação de momentum; e Primeira Lei da Termodinâmica e a Equação da energia.

Neste contexto, é importante frisar que as equações supramencionadas se referem a uma abordagem macroscópica do escoamento dos fluidos. Assim, na aplicação dessas equações, é válida a hipótese do contínuo, onde os fenômenos de escala molecular são desprezados, e o fluido pode ser considerado contínuo. Essa hipótese pode ser aplicada, visto que as escalas macroscópicas de comprimento do escoamento são muito maiores que o caminho livre médio das moléculas. Dessa forma, o comportamento do fluido pode ser descrito por meio de propriedades macroscópicas, como velocidade, pressão, densidade e temperatura, e suas respectivas derivadas no tempo e no espaço.

É importante notar que no estudo de Mecânica dos Fluidos, uma premissa adotada é a de que o fluido é tratado como um contínuo, no qual todas as características locais, como massa específica, velocidade e temperatura, são invariáveis, independentemente do tamanho da região analisada.

2.3.1 Equação da continuidade

Para um determinado volume de controle, a equação da continuidade descreve a conservação de massa, indicando que qualquer mudança na densidade do fluido ao longo do tempo deve ser compensada pelo transporte de massa dentro do domínio do fluido.

Essa relação pode ser descrita, na forma diferencial, conforme a Eq. 2.2.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (2.2)$$

sendo ρ , a massa específica do fluido; t , o tempo; e \mathbf{u} , o campo de velocidades do fluido.

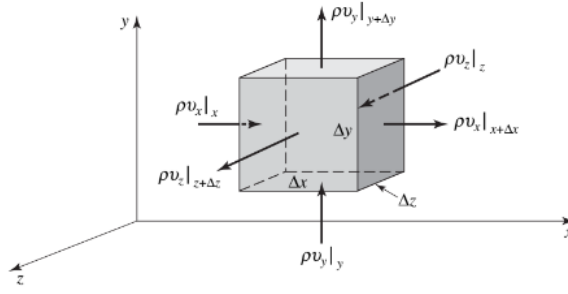


Figura 3 – Esquema de elemento de volume de fluido (WELTY; RORRER; FOSTER, 2020).

Para o caso de escoamentos incompressíveis, a Eq. 2.2 se reduz a Eq. 2.3

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.3)$$

2.3.2 Equação de momento linear

A segunda lei de Newton estabelece uma relação entre a taxa de variação no tempo de momento linear e as forças atuantes sobre o sistema de interesse.

Sob a ótica do escoamento de fluidos, a equação do momento é uma consequência da equação da continuidade, indicando que a taxa de variação temporal do momento é equilibrada pela pressão e pelas tensões viscosas, conforme a Eq. 2.4 (GORAJ, 2016).

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{f} \quad (2.4)$$

sendo p a pressão; \otimes , o produto diádico dois vetores; \mathbf{f} , a força de campo atuante; e $\boldsymbol{\tau}$, o tensor tensão viscosa, que, no caso de fluidos newtonianos, pode ser relacionado ao campo de velocidades por meio da Eq. 2.5.

$$\boldsymbol{\tau} = \mu (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) + \mu^b (\nabla \cdot \mathbf{u}) \delta' \quad (2.5)$$

sendo μ , a viscosidade dinâmica do fluido; μ^b , a viscosidade bulk ($\mu^b = -\frac{2}{3}\mu$); e δ' , a função delta de Kronecker.

Especificamente no caso particular em que μ e ρ são constantes e a força de campo é a força gravitacional, a Eq. 2.4 desdobra-se à Eq. 2.6, conhecida como a Equação de Navier-Stokes.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \frac{1}{3}\mu \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) + \rho \mathbf{g} \quad (2.6)$$

onde μ é a viscosidade dinâmica e \mathbf{g} é a aceleração da gravidade (BRISTEAU; GLOWINSKI; PERIAUX, 1987).

No caso particular de escoamentos incompressíveis, a Eq. 2.6 se reduz à Eq. 2.7.

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot (\nabla \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \left\{ \mu (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) \right\} + \rho \mathbf{g} \quad (2.7)$$

2.3.3 Leis de Fick

Para entender o fenômeno da difusão molar, duas relações empíricas são fundamentais: a primeira e a segunda leis de Fick. O fluxo molar de uma substância é uma grandeza vetorial diretamente proporcional ao vetor gradiente de concentração da substância e tem direção oposta ao gradiente. A consequência desse postulado é que a substância difunde-se do local de maior para o de menor concentração. Sendo assim, a primeira lei de Fick é descrita de acordo com a Eq. 2.8.

$$\mathbf{J}_A = -D\nabla c_A \quad (2.8)$$

onde \mathbf{J}_A é o vetor fluxo de difusão da substância A.

Por outro lado, ao analisar como a concentração da substância se comporta em relação ao tempo, a taxa de variação da concentração é proporcional à difusividade da substância e à curvatura do perfil de concentração, conforme a Eq. 2.9.

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} = D\nabla^2 c_A \quad (2.9)$$

É importante notar que as duas equações anteriores são válidas sob as hipóteses da inexistência de movimentação do fluido no qual a substância A está inserida e da constância dos valores de difusividade e de densidade do meio.

2.3.4 Equação da Advecção-Difusão

A equação da Advecção-Difusão é uma equação macroscópica que deriva dos princípios da continuidade, conforme abordado na subseção 2.3.1, e por leis fenomenológicas, como a Lei de Fick, abordadas na subseção 2.3.3.

Para entender como os fenômenos de difusão e o de advecção funcionam de forma conjunta, é necessário, primeiramente, entender se são processos independentes ou não. O fenômeno difusivo é um processo aleatório decorrente do movimento molecular, ao passo que o processo advectivo é decorrente da movimentação da partícula dentro de um campo de velocidades. Sendo assim, os dois processos não tem qualquer relação de retroalimentação ou concorrência.

Assumindo difusividade molecular constante e considerando que o fluxo total molecular (J_x) numa direção arbitrária possa ser descrito como a soma da parcela referente ao fluxo combinado de momentum com aquela do fluxo molecular, de acordo com a Eq. 2.10 (MITGCM, 2004).

$$J_x = u_x C - D \frac{\partial C}{\partial x} \quad (2.10)$$

Considerando o elemento de volume da Figura 3, a conservação de massa, como um caso particular da Equação da continuidade, pode ser reescrita genericamente de acordo

com a Eq. 2.11.

$$\frac{\partial M}{\partial t} = \sum \dot{m}_{in} - \sum \dot{m}_{out} \quad (2.11)$$

Para a direção x , a variação molecular no volume de controle é dada pela Eq. 2.12.

$$\delta \dot{m}|_x = \left(uC - D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \Big|_1 \delta y \delta z - \left(uC - D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \Big|_2 \delta y \delta z \quad (2.12)$$

Mas, usando a expansão em séries de Taylor para combinar os dois termos relacionado ao fluxo, obtêm-se a Eq. 2.13.

$$uC|_1 - uC|_2 = uC|_1 - \left(uC|_1 + \frac{\partial(uC)}{\partial x} \Big|_1 \delta x \right) = \frac{\partial(uC)}{\partial x} \delta x \quad (2.13)$$

De maneira análoga, aplicando o mesmo processo para a parcela relacionada a difusão, pode-se reescrever a Eq. 2.12 de acordo com a Eq. 2.14

$$\delta \dot{m}|_x = -\frac{\partial(uC)}{\partial x} \delta x \delta y \delta z + D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \delta x \delta y \delta z \quad (2.14)$$

Analogamente para as demais direções, e, considerando $M = C \delta x \delta y \delta z$, obtêm-se a equação da Advecção-Difusão (Eq. 1.1) (MITGCM, 2004).

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \nabla^2 c - \mathbf{u} \cdot \nabla c$$

2.4 Equações Diferenciais Estocásticas

Na seção 2.3, foram apresentadas equações que descrevem fenômenos físicos, de forma que, para cada conjunto único de condição inicial e condições de contorno, exista uma solução única e exata correspondente. Esses tipos de modelagem matemática representam modelos determinísticos, caracterizados pela previsibilidade e ausência de incertezas.

De forma a conseguir lidar com as perturbações inerentes a muitos processos físicos, o estudo de modelos matemáticos estocásticos se faz necessário, visto que aborda resultados probabilísticos e com certo grau de variabilidade, com o objetivo de atribuir maior realismo e confiabilidade na análise do objeto de estudo (ØKSENDAL, 2003).

Uma solução analítica para uma EDE é uma função exata que satisfaz a equação diferencial para todas as condições iniciais relevantes e é representada por uma fórmula matemática. No entanto, na maioria dos casos, EDEs não possuem soluções analíticas, visto que as soluções possuem forte dependência histórica, além de lidar com distribuições de probabilidade, o que faz com que os métodos analíticos tradicionais usados para resolver equações diferenciais ordinárias muitas vezes não sejam aplicáveis, criando a necessidade da aplicação de métodos numéricos.

Diversas são as maneiras de tratar a imprevisibilidade de um fenômeno estocástico. Nesse projeto, será abordada a aleatoriedade por meio de um processo de Wiener, onde números aleatórios são gerados com distribuição normal.

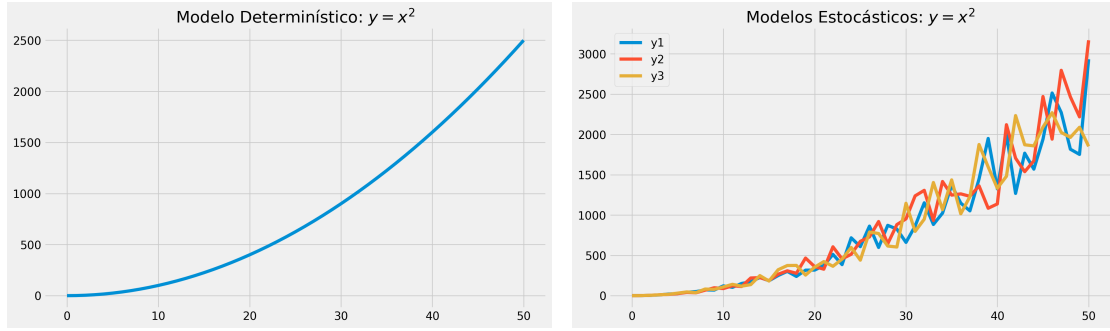


Figura 4 – Comparação entre um modelo matemático determinístico e um modelo matemático estocástico (AUTORIA PRÓPRIA; 2023)

2.4.1 Processo de Wiener

Introduzido por Norbert Wiener na década de 1920, o processo de Wiener ($W(t)$) é um processo estocástico contínuo com incrementos independentes e estacionários, cujas mudanças ocorridas são normalmente distribuídas e com variância crescente com o intervalo de tempo.

Uma característica fundamental que define um processo de Wiener é ser um processo de Markov, cujo aspecto predominante é que a probabilidade de comportamentos futuros dependem somente do estado atual, sendo independentes do histórico completo do sistema (IBE, 2013). Tal definição simplifica a análise e a modelagem da aleatoriedade de um processo estocástico.

Com isso, em um processo de Wiener ($W(t)$), qualquer variação ΔW referente a um intervalo de tempo Δt , precisa satisfazer às seguintes condições (EL-KALLA; EL-DESOUKY; EL-BELTAGY, 2018):

- a) $W(0) = 0$;
- b) $\Delta W = N\sqrt{\Delta t}$, onde $N = N(0, 1)$; e
- c) A variável aleatória N não possui correlação serial, atendendo à propriedade do processo de Markov.

A partir das propriedades e dos comportamentos apresentados nesta subseção, é possível definir matematicamente o processo de Wiener generalizado para uma variável X em função do incremento de Wiener dW , conforme a Eq. 2.15.

$$dX(t) = \alpha(X(t))dt + \sigma(X(t))dW(t) \quad (2.15)$$

em que $X(t)$ é a variável aleatória; α e σ são os parâmetros, de magnitude constante, de convecção e de variância, respectivamente; e $dW(t)$, o diferencial de natureza estocástica ligado à fonte de ruído aleatório (SAUER, 2013).

Além disso, de acordo com as definições apresentadas, pode-se afirmar que ΔW possui distribuição normal, cuja média, $\mu_m(\Delta W)$, é nula e variância, $V(\Delta W)$, é Δt . Dado um intervalo de tempo Δt , a variação em X possui distribuição normal, média $\mu_m(\Delta X) = \alpha \Delta t$ e variância $V(\Delta X) = \sigma^2 \Delta t$.

A partir dos conceitos apresentados relativos ao cálculo de probabilidades de um processo estocástico, é possível definir o comportamento do termo estocástico $\xi(t)$ (ruído branco) presente nas equações diferenciais estocásticas, como sendo a derivada temporal de um processo de Wiener, conforme a Eq. 2.16.

$$\dot{W}(t) = \xi(t) \tag{2.16}$$

3 METODOLOGIA

Após verificados os fundamentos teóricos necessários para o desenvolvimento do presente projeto, este capítulo apresenta a metodologia utilizada. Na primeira seção deste capítulo, são apresentados o problema investigado e as equações resolvidas. A segunda seção aborda o Método de Diferenças Finitas e desenvolve a discretização de cada um dos termos da equação da difusão-advecção, considerando a abordagem determinística e traz uma discussão sobre os métodos utilizados de solução numérica de sistemas algébricos. A terceira seção apresenta o Método de Euler-Maruyama para solução de EDE. Por fim, a última seção destina-se a discutir o processo de construção das malhas utilizadas neste trabalho, abordando sucintamente o estudo de independência de malha empregado.

3.1 Definição do problema

O presente projeto tratou da dispersão do radionuclídeo Rn^{222} , um gás cancerígeno, altamente ionizante – alfa emissor – e oriundo de produto de fissão. O termo fonte foi gerado a partir da dispersão atmosférica proveniente de um acidente nuclear hipotético em um reator modular de pequeno porte (*Small Modular Reactor* - SMR). Dada uma região finita quadrada de dimensões $L \times L$ representando uma porção do espaço atmosférico, assumiu-se que esse SMR defeituoso emitiu continuamente o radionuclídeo por meio do sistema de exaustão dos gases provenientes da instalação nuclear, de forma que a concentração permaneça constante no local da fonte ao longo de todo o período de simulação, em unidades de Bq/m^3 (CURZIO, 2020).

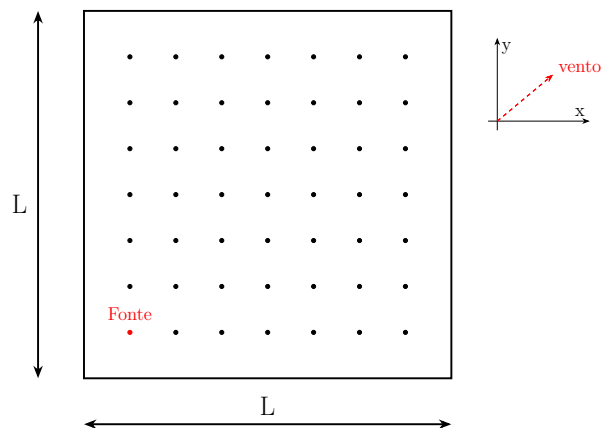


Figura 5 – Região finita de dimensões $L \times L$ (AUTORIA PRÓPRIA, 2023)

Além disso, a classificação da estabilidade atmosférica (modelo de Pasquill) adotada foi a F, moderadamente estável, visto que favorece a situação de menor espalhamento

difusivo (devido ao fenômeno da turbulência), focando mais no transporte da pluma pelo fenômeno advectivo.

Para o estudo das condições de contorno do problema, faz-se necessário atentar para cinco localizações específicas dentro da região de interesse: o local da fonte radiológica e as quatro bordas da região quadrada de dimensões $L \times L$. Em relação à fonte, é importante perceber que a concentração nessa área permanece inalterada, podendo ser equacionada da seguinte maneira:

$$c(t, x_s, y_s) = C_s, t \geq 0 \quad (3.1)$$

onde (x_s, y_s) são as coordenadas da fonte e C_s é a concentração de radionuclídeos emitida.

Com relação às fronteiras, é importante notar que, apesar de haver transferência de massa ao longo de toda simulação, para um período de tempo suficientemente grande, a concentração nas bordas se estabiliza, de forma que não haja variação de concentração por unidade de volume, o que permite o seguinte equacionamento:

$$\begin{aligned} c(t_f, x, 0^+) &= c(t_f, x, 0^-), 0 \leq x \leq L \\ c(t_f, x, L^+) &= c(t_f, x, L^-), 0 \leq x \leq L \\ c(t_f, 0^+, y) &= c(t_f, 0^-, y), 0 \leq y \leq L \\ c(t_f, L^+, y) &= c(t_f, L^-, y), 0 \leq y \leq L \end{aligned} \quad (3.2)$$

onde t_f é o instante de tempo final da simulação.

Em condições que se aproximam da idealidade, considera-se que o campo de velocidades do fluido atmosférico (ar) não apresente obstáculos e as flutuações no referido campo sejam causadas apenas por fatores ligados à turbulência inerente à atmosfera. Além disso, o coeficiente de difusão D do radionuclídeo no ar permanece constante ao longo de todo espaço e tempo de simulação. A Figura 6 ilustra o que ocorre na região ao redor da fonte.

3.2 Método das Diferenças Finitas

O método das diferenças finitas é um dos métodos mais utilizados na solução numérica de EDOs e EDPs, permitindo a resolução de problemas de valor inicial e problemas de valor de contorno. O propósito desse método visa transformar problemas compostos por equações diferenciais em um problema envolvendo equações algébricas, a partir da discretização do domínio de variáveis independentes, utilizando uma malha discreta de $n+1$ nós, que podem ter o mesmo tamanho (malha uniforme) ou não (malha não-uniforme). É importante notar que quanto mais refinada a malha, maior a precisão da solução numérica,

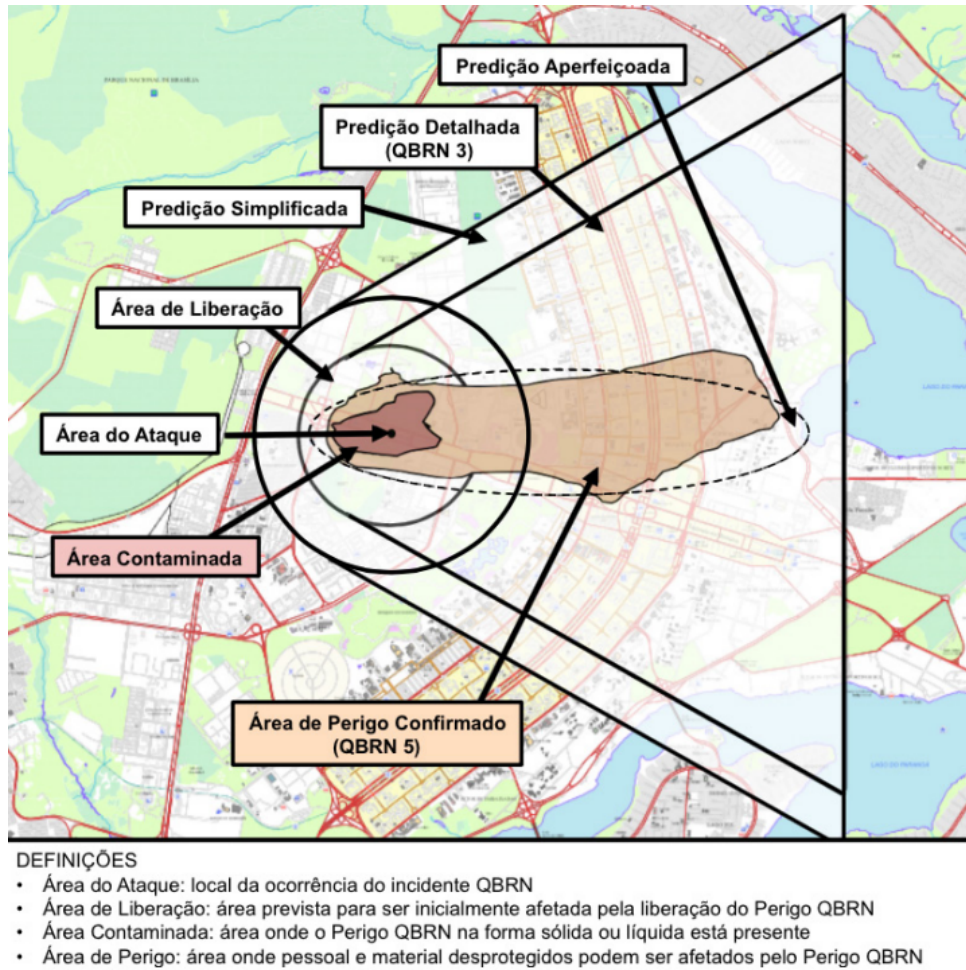


Figura 6 – Ilustração do espalhamento de um ataque QBRN dentro de uma área quadrada com a presença de vento (COTER, 2016)

porém maior o custo computacional envolvido (ANDERSON; TANNEHILL; PLETCHER, 2016).

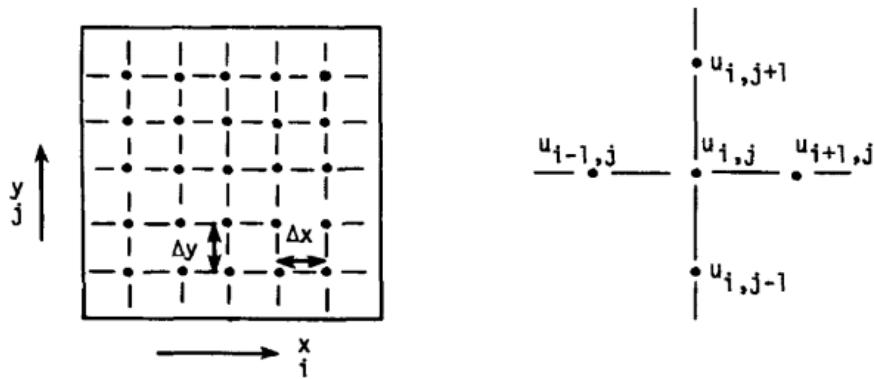


Figura 7 – Malha genérica de diferenças finitas (ANDERSON; TANNEHILL; PLETCHER, 2016).

No caso de EDP parabólicas, como a Eq. 1.1, o domínio de solução é aberto em

uma das direções, não sendo necessário conhecer as condições e/ou um valor final para resolver a equação. Na Figura 8, a malha possui n_i nós na direção x , ao passo que na direção t , a infinidade de nós permite a computação numérica indefinida, conforme haja a necessidade.

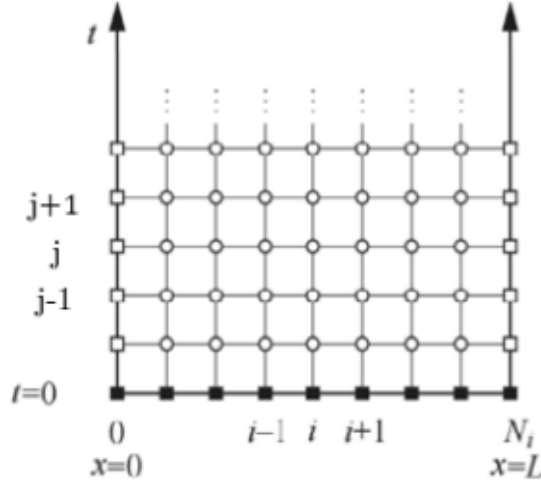


Figura 8 – Esquema de discretização das EDP Parabólicas (ANDERSON; TANNEHILL; PLETCHER, 2016).

Após definir o tamanho da malha, é necessário gerar as aproximações numéricas para as derivadas das variáveis independentes, que são baseadas na diferença entre os valores em pontos discretos e próximos dentro do domínio. Uma das maneiras de obter essas aproximações é utilizando a expansão em séries de Taylor em torno de um dado ponto e que manipulada de forma adequada resulta nas expressões de diferenças finitas para as derivadas.

$$u(x) = u(x_0) + \sum_{n=1}^k \frac{1}{n!} \frac{d^n u}{dx^n} \bigg|_{x_0} (x - x_0)^n + \mathcal{O}(|x - x_0|^{k+1}) \quad (3.3)$$

Na discretização espacial, em geral são utilizadas três abordagens para criação dos nós da malha: diferenças progressivas, regressivas e centrais (ANDERSON; TANNEHILL; PLETCHER, 2016).

No caso das diferenças progressivas, a derivada de uma função é aproximada usando informações dos pontos vizinhos à direita do ponto de interesse, sendo a Eq. 3.4 a derivada progressiva de primeira ordem de uma função genérica $u(x)$.

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} \quad (3.4)$$

onde u_i é o valor da função u no ponto i da malha e Δx é o espaçamento uniforme entre os pontos.

No caso das diferenças regressivas, a lógica das diferenças progressivas se mantém. A variação se dá no fato de que a derivada de uma função é aproximada usando informações dos pontos vizinhos à esquerda do ponto de interesse, de acordo com a Eq. 3.5.

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} \quad (3.5)$$

No contexto da abordagem numérica da Equação da Advecção-Difusão, os dois casos anteriores são particularmente interessante no que diz respeito a problemas nos quais o fenômeno da advecção é dominante, sendo conhecido como esquema Upwind (ANDERSON; TANNEHILL; PLETCHER, 2016). Se o fluxo de velocidade é predominantemente para a direita ou para cima (positivo), a derivada espacial é aproximada usando diferenças regressivas. Caso contrário, diferenças progressivas são a escolha mais adequada, de forma que se garanta que as informações sejam propagadas na direção do fluxo.

Já no caso das diferenças centrais, a derivada de uma função é aproximada utilizando informações dos pontos adjacentes ao ponto de interesse, sendo a Eq. 3.6 a derivada central de segunda ordem de uma função genérica $u(x)$.

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} \quad (3.6)$$

Pelo fato de utilizar pontos adjacentes, essa abordagem garante maior precisão no valor da derivada, em relação aos casos progressivo e regressivo, que utilizam informações de apenas um dos lados do ponto de interesse. No contexto da abordagem numérica da Equação da Advecção-Difusão, o caso das diferenças centrais são mais recomendados para problemas nos quais o fenômeno da difusão é dominante, sendo conhecido como *Central Difference Scheme* (CDS) (ANDERSON; TANNEHILL; PLETCHER, 2016).

Por outro lado, quando se trata da discretização temporal, a abordagem utilizada para discretizar as derivadas temporais das equações, ou seja, como será computado o valor da variável do próximo instante de tempo, define o método numérico e a ferramenta matemática a ser utilizada na resolução do problema. Na subseção 3.2.3, dois métodos distintos para resolver numericamente a Equação da Advecção-Difusão serão apresentados: o método explícito e o método implícito.

3.2.1 Análise da estabilidade de solução numérica

Um grande desafio relacionado à solução de EDPs é garantir a estabilidade da solução numérica, que significa obter soluções nas quais pequenas variações nos parâmetros ou condições iniciais impliquem pequenas variações na solução final (ANDERSON; TANNEHILL; PLETCHER, 2016).

Para analisar a estabilidade de uma solução numérica, é necessário atentar para dois conceitos relacionados: consistência e convergência. Uma solução numérica é consistente

quando a discrepância entre a solução numérica e a solução exata diminui à medida que o tamanho do passo diminui, isto é, o erro de truncamento tende a zero. Por outro lado, uma solução numérica é convergente se os resultados obtidos se aproximarem da solução exata quando o tamanho do passo se tornar infinitesimalmente pequeno (HIDAYAT, 2021).

Em resumo, a consistência refere-se à fidelidade da técnica numérica em relação à equação diferencial, enquanto a convergência avalia a capacidade da técnica em produzir soluções precisas à medida que o tamanho do passo diminui (ANDERSON; TANNEHILL; PLETCHER, 2016).

No contexto da equação de Advecção-Difusão, ao substituir as derivadas parciais e gerar as equações algébricas discretizadas, surgem três parâmetros adimensionais que permitem a análise da estabilidade da solução numérica: o número de Peclet (Pe), o número de Courant (Co) e o número de Fourier (Fo) (MENDES *et al.*, 2016).

O número de Peclet (Pe) é um parâmetro adimensional que analisa se a transferência de massa descrita pela equação possui um caráter mais difusivo ou mais advectivo, expressando a razão entre a discretização espacial e o comprimento difusivo ($\frac{u}{D}$), conforme descrito pela Eq. 3.7. Para valores de $Pe < 2$, o caráter difusivo é mais representativo, ao passo que para $Pe \geq 2$, o fenômeno advectivo torna-se mais relevante (DAUS; FRIND; SUDICKY, 1985).

$$Pe = \frac{u\Delta x}{D} \quad (3.7)$$

Considerando o efeito da discretização temporal, utiliza-se o número de Courant (Co), representado pela Eq. 3.8, que estima a velocidade na qual o método numérico consegue transportar a informação analisada. Para garantir a estabilidade, o método numérico deve seguir a condição de estabilidade de Courant–Friedrichs–Lewy, que fixa que a razão entre a distância percorrida pelo transporte de massa advectivo deve ser menor do que a discretização espacial, ou seja, $Co \leq 1$ (DAUS; FRIND; SUDICKY, 1985).

$$Co = \frac{u\Delta t}{\Delta x} \quad (3.8)$$

O número de Fourier (Fo), expresso pela Eq. 3.9, avalia a forma como o erro associado à solução numérica se propaga no domínio da solução, visto que o erro de truncamento tem uma natureza gradualmente divergente. Sendo assim, para que o método seja estável ao longo dos passos de tempo, é necessário que a condição de estabilidade de Von Neumann seja satisfeita, ou seja, $Fo \leq 0.5$ (MICKENS, 2022).

$$Fo = \frac{D\Delta t}{(\Delta x)^2} = \frac{Co}{Pe} \quad (3.9)$$

3.2.2 Adimensionalização do modelo

A fim de simplificar cálculos e evitar questões relacionadas à diferença na ordem de grandeza das variáveis, uma solução recomendável é a adimensionalização das equações

diferenciais parciais (LANGTANGEN; PEDERSEN, 2016).

Como dito anteriormente, o projeto trata da dispersão atmosférica proveniente de uma fonte radiológica, cuja concentração é constante e igual a C_s , agindo num espaço de tamanho L (unidimensional) ou área L^2 (bidimensional). Sendo assim, aplicam-se as seguintes mudanças de variáveis:

$$\lambda_x = \frac{x}{L} \implies dx = d\lambda \cdot L \quad (3.10)$$

$$\lambda_y = \frac{y}{L} \implies dy = d\lambda_y \cdot L \quad (3.11)$$

$$\phi = \frac{c}{C_s} \implies \nabla c = \nabla \phi \cdot C_s \quad (3.12)$$

Dessa maneira, a Eq. 1.1, para o problema com escoamentos incompressíveis, reduz-se à Eq. 3.13

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{D}{L^2} \nabla^2 \phi - \frac{\mathbf{u}}{L} \cdot \nabla \phi \quad (3.13)$$

com as condições de contorno expressas por:

$$\begin{aligned} \phi(t_f, \lambda_x, 0^+) &= \phi(t_f, \lambda_x, 0^-), \quad 0 \leq \lambda_x \leq 1 \\ \phi(t_f, \lambda_x, 1^+) &= \phi(t_f, \lambda_x, 1^-), \quad 0 \leq \lambda_x \leq 1 \\ \phi(t_f, 0^+, y) &= \phi(t_f, 0^-, \lambda_y), \quad 0 \leq \lambda_y \leq 1 \\ \phi(t_f, 1^+, \lambda_y) &= \phi(t_f, 1^-, \lambda_y), \quad 0 \leq \lambda_y \leq 1 \end{aligned} \quad (3.14)$$

3.2.3 Equações algébricas discretizadas

Tomando como base a Eq. 3.13, é possível apresentar as equações algébricas discretizadas e os algoritmos utilizados para obter os valores de concentração por unidade de volume.

Para as equações e métodos a seguir, é de suma importância que a primeira etapa dos algoritmos seja a inicialização da matriz de valores de ϕ com as condições iniciais $\phi(0, x)$ ou $\phi(0, x, y)$ para todo o domínio espacial do modelo, seguida do estabelecimento das condições de contorno nos limites do domínio.

Além disso, é necessário definir a distância entre os nós da malha discretizada, por meio da imposição da quantidade de pontos contidos no domínio discretizado. A relação numérica entre os dois parâmetros citados é representado pela Eq. 3.15.

$$\Delta x = \frac{L}{n_x - 1} \quad \Delta y = \frac{L}{n_y - 1} \quad \Delta t = \frac{L}{n_t - 1} \quad (3.15)$$

onde n_i é a quantidade de nós da malha espacial ou temporal.

3.2.3.1 Método explícito

No método explícito, as derivadas temporais são discretizadas utilizando pontos de tempo atuais, de forma que o valor no próximo instante de tempo seja computado em função do instante de tempo atual e dos valores das derivadas espaciais já conhecidos. Dessa maneira, dadas as condições iniciais e de contorno, um método iterativo faz-se necessário para calcular o valor do próximo passo de tempo de uma equação algébrica, a partir de informações já conhecidas. Vale ressaltar que esse método é mais restrito quanto à estabilidade numérica, exigindo passos de tempo menores para garantir a convergência.

As Eq. 3.16 e Eq. 3.17 representam as equações algébricas discretizadas nos domínios unidimensional e bidimensional, respectivamente, para aplicação no método explícito.

$$\phi_i^{t+1} = \phi_i^t - \frac{u}{L} \frac{\Delta t}{\Delta \lambda_x} (\phi_i^t - \phi_{i-1}^t) + \frac{D}{L^2} \frac{\Delta t}{(\Delta \lambda_x)^2} (\phi_{i-1}^t - 2\phi_i^t + \phi_{i+1}^t) \quad (3.16)$$

onde $\mathbf{u}(t, x, y, z) \equiv u(x)$.

$$\begin{aligned} \phi_{i,j}^{t+1} = & \phi_{i,j}^t - \frac{u_x \Delta t}{\Delta \lambda_x} (\phi_{i,j}^t - \phi_{i-1,j}^t) - \frac{u_y \Delta t}{\Delta \lambda_y} (\phi_{i,j}^t - \phi_{i,j-1}^t) \\ & + \frac{D}{L^2} \left(\frac{\Delta t}{(\Delta \lambda_x)^2} (\phi_{i+1,j}^t - 2\phi_{i,j}^t + \phi_{i-1,j}^t) + \frac{\Delta t}{(\Delta y)^2} (\phi_{i,j+1}^t - 2\phi_{i,j}^t + \phi_{i,j-1}^t) \right) \end{aligned} \quad (3.17)$$

onde $\mathbf{u}(t, x, y, z) \equiv (u_x(x), u_y(y))$.

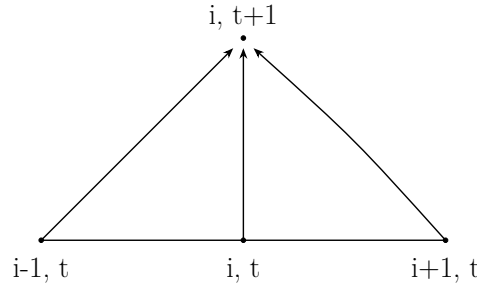


Figura 9 – Dependência entre os pontos para o método explícito (AUTORIA PRÓPRIA; 2023)

Definidas as condições iniciais, as condições de contorno e as equações algébricas discretizadas, é necessário atualizar o valor da concentração no ponto (t, i, j) , por meio da iteração de $t = 1$ até $t = n_t$, $x = 1$ até $x = n_x$ e $y = 1$ até $y = n_y$. Após esses passos, a solução numérica da equação estará na matriz ϕ , de dimensão $n_x \times n_t$, no caso unidimensional e $n_x \times n_y \times n_t$, no caso bidimensional.

3.2.3.2 Método Implícito

No método implícito, as derivadas temporais são discretizadas utilizando pontos de tempo futuros, de forma que as variáveis da equação algébrica não sejam calculadas

diretamente, sendo necessária a utilização de ferramentas matemáticas de resolução de sistemas de equações algébricas lineares da forma $[\mathbf{A}][\phi] = [\mathbf{b}]$. A utilização de valores futuros torna o método implícito mais estável em relação a condições de estabilidade numérica, permitindo passos de tempo maiores sem comprometer a acurácia da solução.

As Eq. 3.18 e Eq. 3.19 representam as equações algébricas discretizadas nos domínios unidimensional e bidimensional, respectivamente, para aplicação no método implícito.

$$\phi_i^{t+1} = \phi_i^t - \frac{u}{L} \frac{\Delta t}{\Delta \lambda_x} (\phi_i^{t+1} - \phi_{i-1}^{t+1}) + \frac{D}{L^2} \frac{\Delta t}{(\Delta \lambda_x)^2} (\phi_{i+1}^{t+1} - 2\phi_i^{t+1} + \phi_{i-1}^{t+1}) \quad (3.18)$$

$$\begin{aligned} \phi_{i,j}^{t+1} = \phi_{i,j}^t - \frac{u_x \Delta t}{\Delta \lambda_x} (\phi_{i,j}^{t+1} - \phi_{i-1,j}^{t+1}) - \frac{u_y \Delta t}{\Delta y} (\phi_{i,j}^{t+1} - \phi_{i,j-1}^{t+1}) \\ + \frac{D}{L^2} \left(\frac{\Delta t}{(\Delta \lambda_x)^2} (\phi_{i+1,j}^{t+1} - 2\phi_{i,j}^{t+1} + \phi_{i-1,j}^{t+1}) + \frac{\Delta t}{(\Delta \lambda_y)^2} (\phi_{i,j+1}^{t+1} - 2\phi_{i,j}^{t+1} + \phi_{i,j-1}^{t+1}) \right) \end{aligned} \quad (3.19)$$

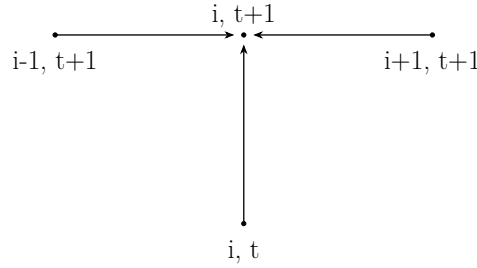


Figura 10 – Dependência entre os pontos para o método implícito (AUTORIA PRÓPRIA; 2023)

Definidas as condições iniciais, as condições de contorno e as equações algébricas discretizadas, é construído um sistema de equações lineares utilizando uma abordagem de identificação dos coeficientes similar a um sistema de coordenadas cartográficas. Nesse sistema, os pontos localizados à direita e à esquerda do ponto de concentração ϕ_i^t (ponto P) são codificados como leste (E - *east*) e oeste (W - *west*), respectivamente. Dessa maneira, esses coeficientes assumem a seguinte forma:

$$A_P = 1 + Co + 2Fo$$

$$A_W = -(Co + Fo)$$

$$A_E = -Fo$$

simplificando escrita da Eq. 3.18 no formato da Eq. 3.20.

$$A_W \phi_{i-1}^t + A_P \phi_i^t + A_E \phi_{i+1}^t = \phi_i^{t-1} \quad (3.20)$$

Dessa forma, a Eq. 3.20 possui a forma de uma matriz tridiagonal, representado por $[\mathbf{A}][\phi] = [\mathbf{b}]$; onde \mathbf{A} é a matriz principal dos coeficientes, ϕ_i^t é o vetor incógnita e ϕ_i^{t-1} é o vetor independente. Para isso, implementou-se no MATLAB o algoritmo TDMA, que tem como objetivo transformar a matriz principal (inicialmente tridiagonal), em uma matriz triangular superior, facilitando, portanto, a resolução do sistema (FORD, 2015).

3.3 Método de Euler-Maruyama

O método é a versão estocástica do método de Euler, para resolução de EDPs que envolvem flutuações aleatórias. A característica principal dessa técnica numérica é a adição de um termo estocástico (bdW), cuja incerteza é dependente da constante b , relevância ou amplitude do ruído estocástico, e de um processo de Wiener.

Sendo um processo de primeira ordem e não dependendo de cálculos complexos, o método de Euler-Maruyama é computacionalmente eficiente e muito utilizado em diferentes áreas do conhecimento, como Biologia e Finanças (YI; HU; ZHAO, 2021). Apesar da extensa aplicabilidade desse método numérico, uma desvantagem acerca de sua utilização é a possibilidade de erros de discretização estocástica, o que requer passos de tempo suficientemente pequenos para que os resultados sejam consistentes e convergentes. Em casos de altos valores de b , métodos numéricos de ordem mais elevada, como o método de Milstein, são requeridos para melhor precisão dos resultados.

No presente projeto, o termo estocástico foi tratado como um ruído dependente das coordenadas espaciais, de maneira que, utilizando a Eq. 2.16, chega-se à discretização explícita apresentada na Eq. 3.21 (GAINES, 1995).

$$\xi = \frac{\Delta W(t)}{\sqrt{\Delta x}} = N(0, 1) \frac{\sqrt{\Delta t}}{\sqrt{\Delta x}} \quad (3.21)$$

Além disso, é importante observar que o campo de velocidades do vento atmosférico será função das coordenadas espaciais, do termo estocástico e de um parâmetro de relevância estocástica b , responsável pela magnitude da contribuição do ruído na solução da equação diferencial. Dessa forma, a equação do campo de velocidades é dado pela Eq. 3.22.

$$\mathbf{u}(x; \xi) = u(x) + b \cdot N(0, 1) \frac{\sqrt{\Delta t}}{\sqrt{\Delta x}} \quad (3.22)$$

Portanto, basta adicionar o resultado da Eq. 3.21 às equações 3.16 e 3.18, para obter a suas formas estocásticas (Eq. 3.23 e Eq. 3.26).

$$\phi_i^{t+1} = \phi_i^t - \frac{1}{L} \frac{\Delta t}{\Delta \lambda_x} (\phi_i^t - \phi_{i-1}^t) \cdot \left(u(x) + b \cdot N(0, 1) \frac{\sqrt{\Delta t}}{\sqrt{\Delta x}} \right) + \frac{D}{L^2} \frac{\Delta t}{(\Delta \lambda_x)^2} (\phi_{i-1}^t - 2\phi_i^t + \phi_{i+1}^t) \quad (3.23)$$

$$\phi_i^{t+1} = \phi_i^t - \frac{1}{L} \frac{\Delta t}{\Delta \lambda_x} (\phi_i^{t+1} - \phi_{i-1}^{t+1}) \cdot \left(u(x) + b \cdot N(0, 1) \frac{\sqrt{\Delta t}}{\sqrt{\Delta x}} \right) + \frac{D}{L^2} \frac{\Delta t}{(\Delta \lambda_x)^2} (\phi_{i+1}^{t+1} - 2\phi_i^{t+1} + \phi_{i-1}^{t+1}) \quad (3.24)$$

Nos casos bidimensionais, o ruído estocástico será tratado como $\xi \equiv (\xi_x(x), \xi_y(y))$, de forma que o campo de velocidades bidimensional do vento atmosférico seja descrita pela Eq. 3.25.

$$\mathbf{u}(x, y; \xi) = \left(u_x(x) + b \cdot N_x(0, 1) \frac{\sqrt{\Delta t}}{\sqrt{\Delta x}}, u_y(y) + b \cdot N_y(0, 1) \frac{\sqrt{\Delta t}}{\sqrt{\Delta y}} \right) \quad (3.25)$$

Dessa forma, substituindo a Eq. 3.25 nas equações 3.17 e 3.19, obtêm-se as equações 3.26 e 3.27.

$$\begin{aligned} \phi_{i,j}^{t+1} = & \phi_{i,j}^t - \frac{\Delta t}{\Delta \lambda_x} (\phi_{i,j}^t - \phi_{i-1,j}^t) \cdot \left(u_x(x) + b \cdot N_x(0, 1) \frac{\sqrt{\Delta t}}{\sqrt{\Delta x}} \right) \\ & - \frac{\Delta t}{\Delta \lambda_y} (\phi_{i,j}^t - \phi_{i,j-1}^t) \cdot \left(u_y(y) + b \cdot N_y(0, 1) \frac{\sqrt{\Delta t}}{\sqrt{\Delta y}} \right) \\ & + \frac{D}{L^2} \left(\frac{\Delta t}{(\Delta \lambda_x)^2} (\phi_{i+1,j}^t - 2\phi_{i,j}^t + \phi_{i-1,j}^t) \right) \\ & + \frac{D}{L^2} \left(\frac{\Delta t}{(\Delta \lambda_y)^2} (\phi_{i,j+1}^t - 2\phi_{i,j}^t + \phi_{i,j-1}^t) \right) \end{aligned} \quad (3.26)$$

$$\begin{aligned} \phi_{i,j}^{t+1} = & \phi_{i,j}^t - \frac{\Delta t}{\Delta \lambda_x} (\phi_{i,j}^{t+1} - \phi_{i-1,j}^{t+1}) \cdot \left(u_x(x) + b \cdot N_x(0, 1) \frac{\sqrt{\Delta t}}{\sqrt{\Delta x}} \right) \\ & - \frac{\Delta t}{\Delta \lambda_y} (\phi_{i,j}^{t+1} - \phi_{i,j-1}^{t+1}) \cdot \left(u_y(y) + b \cdot N_y(0, 1) \frac{\sqrt{\Delta t}}{\sqrt{\Delta y}} \right) \\ & + \frac{D}{L^2} \left(\frac{\Delta t}{(\Delta \lambda_x)^2} (\phi_{i+1,j}^{t+1} - 2\phi_{i,j}^{t+1} + \phi_{i-1,j}^{t+1}) \right) \\ & + \frac{D}{L^2} \left(\frac{\Delta t}{(\Delta \lambda_y)^2} (\phi_{i,j+1}^{t+1} - 2\phi_{i,j}^{t+1} + \phi_{i,j-1}^{t+1}) \right) \end{aligned} \quad (3.27)$$

3.4 Independência de Malha

A análise da independência de malha é uma importante etapa para validação e otimização do método numérico empregado, visando verificar se os resultados obtidos pela simulação são afetados pela discretização espacial do domínio físico do problema investigado.

No presente estudo, foram utilizados diferentes número de pontos na malha computacional (apresentados no Capítulo 4 - Resultados e Discussão), de forma a se buscar a otimização entre a precisão do modelo e o custo computacional. Neste caso, se o passo da malha estiver com a valor muito alto, a simulação pode não capturar detalhes importantes, levando a resultados imprecisos ou até mesmo a problemas de consistência e convergência.

Por outro lado, caso a malha esteja com o passo muito pequeno, a simulação pode se tornar computacionalmente cara e desnecessariamente demorada.

No presente projeto, essa análise está intrínsecamente conectada aos parâmetros adimensionais citados no tópico 3.2.1, visto que ao controlar esses valores, automaticamente definem-se a quantidade de elementos nas malhas, ao mesmo tempo que as métricas de estabilidade e consistência são observadas e cumpridas.

3.5 Simulação Computacional

A Eq. 3.13 foi utilizada como base para a modelagem computacional. Para a obtenção da solução numérica, foi necessário definir as premissas adotadas, os valores das variáveis físicas e dos parâmetros de simulação.

Para a solução numérica, foi utilizado o método explícito baseado em diferenças finitas, no qual, devido à predominância do caráter advectivo no ambiente atmosférico, foi empregado o método Upwind ($Pe > 2$) para a discretização das coordenadas espaciais.

Para o campo de velocidades, o primeiro passo foi atentar para a condição de escoamento incompressível, $\nabla \cdot \mathbf{u}(t, x, y, z; \xi) = 0$, de forma que, para os casos unidimensional e bidimensional, as premissas adotadas sejam igualmente atendidas. Dessa forma, para os casos unidimensional e bidimensional, adotou-se campos de velocidades expressos, respectivamente, pelas Eq. 3.28 e Eq. 3.29.

$$\mathbf{u}(t, x, y, z; \xi) = 5 + b \cdot \xi_x \quad (3.28)$$

$$\mathbf{u}(t, x, y, z; \xi) = (5 + b \cdot \xi_x, 2 + b \cdot \xi_y) \quad (3.29)$$

É importante destacar que adotou-se a premissa de que o parâmetro estocástico assumia 10 valores diferentes (baseados na Eq. 3.21) ao longo de toda a simulação. O objetivo desse pressuposto é simular mudanças naturais da direção do vento e, a partir disso, estudar como a concentração de radionuclídeos afeta o espaço (unidimensional ou bidimensional) frente ao campo de velocidades imposto.

Ademais, a fim de avaliar a quantidade de radiação a que um indivíduo pudesse estar exposto quando do acidente, estimou-se o cálculo da dose efetiva acumulada (E) em cada ponto da malha, a partir da discretização da Eq. 2.1, sendo expressa pela Eq. 3.30 e Eq. 3.31. Por fim, a Tabela 2 apresenta os valores de parâmetros utilizados na simulação.

$$E_{i,j}^{t+1} = (6,7e-6)C_s\phi_{i,j}^t\Delta t + E_{i,j}^t \quad (3.30)$$

$$E_{i,j}^{t_f} = (6,7e-6)C_s\phi_{i,j}^{t_f}t_f + E_{i,j}^0 \quad (3.31)$$

Tabela 2 – Valores utilizados para simulação computacional .

Parâmetro	Valor	Unidade
Concentração inicial ($c(0, x, y)$)	0	Bq/m ³
Concentração na fonte (C_s)	2,334E+07	Bq/m ³
Comprimento do domínio espacial (L)	2000	m
Tempo total de simulação (t_f)	200	s
Coeficiente difusivo (D)	2.11E-05	m ² /s
Campo de velocidades (u)	Eq. 3.29	m/s
Parâmetro de relevância estocástica (b)	5	-
Courant	0,5	-

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Após definidas as premissas adotadas, os valores das variáveis físicas e dos parâmetros de simulação, as condições iniciais e de contorno e o modelo fisicamente consistente, a equação da Advecção-Difusão foi resolvida para os casos unidimensional e bidimensional. No prosseguimento, este capítulo visa apresentar e discutir os resultados obtidos a partir da implementação da metodologia mostrada no capítulo 3 - Metodologia.

Num primeiro momento, são apresentados os perfis da dispersão dos agentes radiológicos, comparando as abordagens explícita e implícita no modelo determinístico unidimensional. Em seguida, comparou-se o modelo determinístico com o modelo estocástico (unidimensional e bidimensional), ressaltando como a mudança na direção do vento afeta o perfil de concentração de agentes radiológicos e a dose efetiva acumulada. Por fim, foram discutidos aspectos relacionados ao impacto computacional no tempo de execução de cada modelo.

É importante destacar que, neste capítulo, todos os gráficos relacionados ao modelo estocástico, representam uma única possibilidade para os parâmetros físicos considerados. Conforme discutido no capítulo 3 - Metodologia, os números aleatórios $N(0, 1)$ gerados em cada simulação variam e, conseqüentemente, geram efeitos diversos no modelo físico analisado. Essa condição poderia ser refinada caso fosse optado pela realização de “rodadas” de simulação, a fim de se obter um valor médio esperado para a concentração e para dose associada, referente ao radionuclídeo proposto para estudo.

Apesar disso, este estudo utiliza hipóteses conservadoras, as quais tendem a superestimar as concentrações e impactos do material radioativo dispersos no ambiente. A metodologia apresentada é dedicada à avaliação e, sendo abrangente em escopo, avalia conseqüências no ambiente, podendo ser aplicada em uma perspectiva de suporte à decisão.

4.1 Método Implícito e Método Explícito determinístico unidimensional

Como já discutido na subseção 3.2.3, a diferença principal entre os métodos implícito e explícito reside no fato de que o primeiro possui alta estabilidade do modelo, sendo computacionalmente mais custoso, ao passo que o segundo é mais rápido e simples de implementar, apesar de ser mais impreciso e estar restrito à condição de Courant-Friedrichs-Lewy.

O método explícito, pelo fato de propagar a informação pelos pontos vizinhos da malha, está sujeito a um fenômeno conhecido como “difusão numérica”. Essa ocorrência

indesejável no modelo numérico é responsável por gerar imprecisão nos resultados, particularmente em locais da malha onde o gradiente assume um valor expressivo, como é o caso, por exemplo, do início da simulação do presente estudo, no qual, inicialmente, o valor da concentração adimensional na fonte é 1 e o valor da concentração do ponto vizinho é zero.

As figuras 11 e 12 apresentam uma comparação do perfil de concentração do agente radiológico para os métodos explícito e implícito e o perfil de distanciamento dos valores entre os dois métodos avaliados, para diferentes instantes de tempo. Próximo à concentração adimensional de 0,5, os dois modelos tendem a ser concordantes, porém, conforme o tempo de simulação avança, é notável que existe um intervalo no qual o método explícito possui uma resposta atrasada frente ao modelo implícito e, abaixo da faixa de 0,5, uma resposta avançada. Esse comportamento é aceitável do ponto de vista teórico, visto que é típico de modelos que apresentam a característica da difusão numérica (SCHLICHTING; SEIS, 2017).

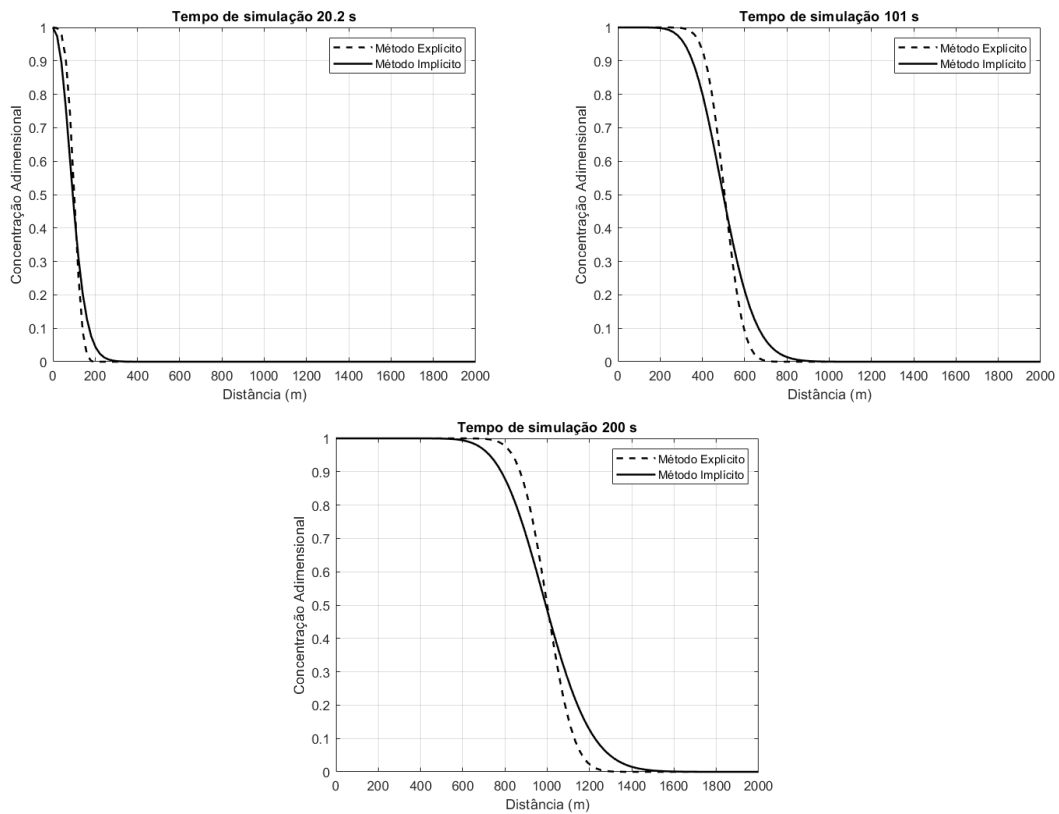


Figura 11 – Comparação entre abordagem explícita e implícita (AUTORIA PRÓPRIA; 2023)

É importante notar que, para as figuras 11 e 12, o número de pontos da malha unidimensional utilizado foi 100 pontos. Utilizando malhas refinadas (maior número de pontos), a média e desvio padrão das diferenças entre os dois métodos tende a diminuir, visto que ambos os modelos tendem a ficar mais precisos. Para tal avaliação, uma abordagem estatística foi utilizada com o objetivo de verificar o comportamento geral da diferença de

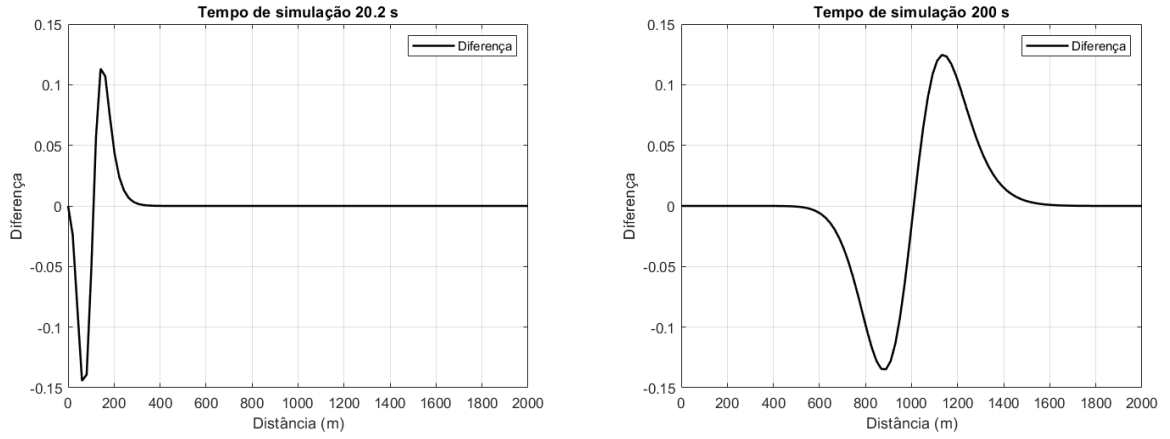


Figura 12 – Diferença entre o método implícito e o explícito (AUTORIA PRÓPRIA; 2023)

valores obtidos pelos métodos implícito e o explícito ao longo do tempo de simulação. As equações 4.1 e 4.2 visam obter a discrepância entre os dois modelos obtendo a média do valor absoluto da diferença do perfil de concentração entre as duas abordagens, bem como o desvio padrão associado a essa diferença.

$$\mu(t) = \frac{1}{n_x} \sum_{i=1}^{n_x} |\phi_{i,\text{explícito}}^t - \phi_{i,\text{implícito}}^t| \quad (4.1)$$

$$\sigma(t) = \sqrt{\frac{1}{n_x} \sum_{i=1}^{n_x} (|\phi_{i,\text{explícito}}^t - \phi_{i,\text{implícito}}^t| - \mu(t))^2} \quad (4.2)$$

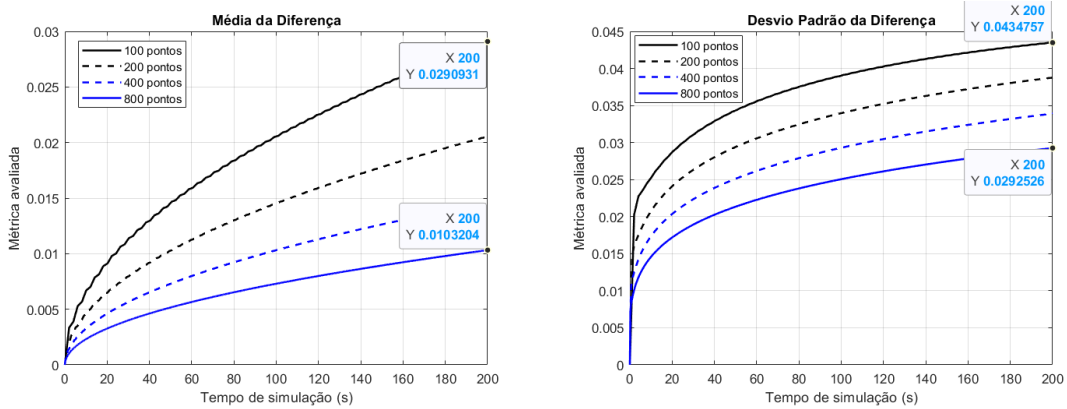


Figura 13 – Variação da média e desvio padrão da diferença para diferentes malhas (AUTORIA PRÓPRIA; 2023)

Dentro dessa perspectiva, de acordo com a Figura 13, a evolução da média e desvio padrão da diferença entre os métodos explícito e implícito de uma malha com 100 pontos e com 800 pontos apresentam melhorias da ordem de 10^{-2} ou 1% (considerando a concentração adimensional), o que não representa um ganho substancial, em termos de

precisão, dado que aumentou-se em 8 vezes a quantidades de pontos e, conseqüentemente, o custo computacional. Posteriormente, será abordado a evolução do custo computacional em relação à quantidade de pontos presentes na malha.

Dessa forma, a escolha entre qual método utilizar deve ser pautada nas características específicas de cada situação e nos recursos computacionais existentes. Pelo motivo de o presente estudo estar tratando de um possível acidente radiológico, é possível que o método explícito seja o mais recomendável, pelo fato de que em situações de calamidade, a obteção de respostas rápidas e eficazes são prioritárias frente à precisão fina dos resultados.

4.2 Modelo Determinístico e Modelo Estocástico

Após analisadas as características e diferenças dos métodos explícito e implícito, nesta seção discutiu-se sobre os modelos determinísticos e estocásticos nos casos unidimensional e bidimensional. A partir da discussão da seção anterior e considerando a argumentação envolvendo a Figura 13, nesta seção será utilizado o método explícito numa malha contendo 100 pontos em cada dimensão espacial.

4.2.1 Unidimensional

De maneira geral, para o caso unidimensional, a principal característica que diferencia os modelos determinístico e estocástico é a variação da magnitude do vento estocástico atuando no sistema. Isto é, em relação ao perfil determinístico de concentrações, o perfil estocástico pode estar mais avançado ou mais atrasado no sentido da dimensão espacial, a depender do valor do parâmetro estocástico do instante observado.

Um comportamento interessante é o fato de que o formato da curva tende a se manter o mesmo durante todo o período de simulação, estando, de forma geral, transladado para direita ou para a esquerda. Naturalmente, quanto maior o parâmetro de relevância estocástica b , maior a probabilidade de a curva estar deslocada para direita ou para a esquerda.

Por outro lado, para valores menores de b , menor a probabilidade de translação da curva, até o limite de $b = 0$, no qual o modelo estocástico se comporta exatamente como o determinístico. A Figura 15 mostra o possível impacto da redução em mil vezes no parâmetro de relevância estocástica, o que, fisicamente, representaria situações de baixíssima turbulência no transporte advectivo.

Essa condição mostra a relevância das classes do modelo de Pasquill nos estudos de dispersão atmosférica, ficando evidente que o pior cenário esperado, isto é, aquele que oferece o menor tempo de resposta nas ações de proteção contra incidentes/acidentes radiológicos, ocorre em situações de maior turbulência, caracterizada pela classe A do

modelo de estabilidade atmosférica citado.

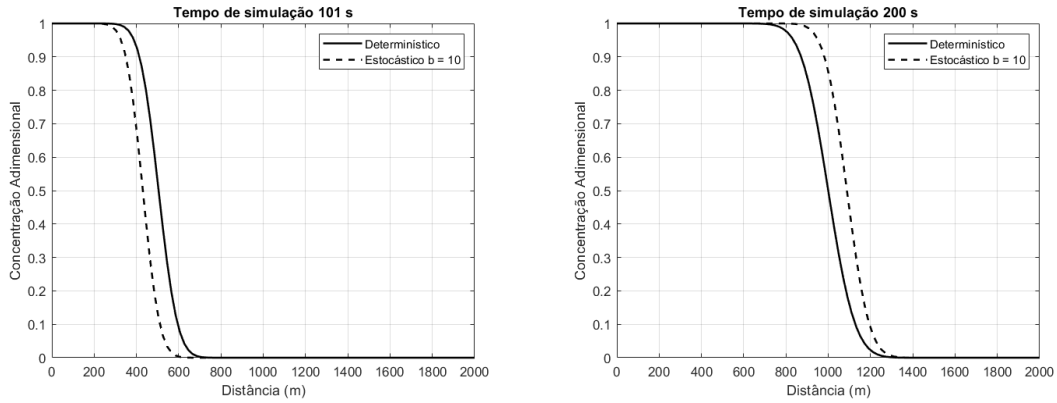


Figura 14 – Comparação entre modelo determinístico e estocástico unidimensional, para $b = 10$ (AUTORIA PRÓPRIA; 2023).

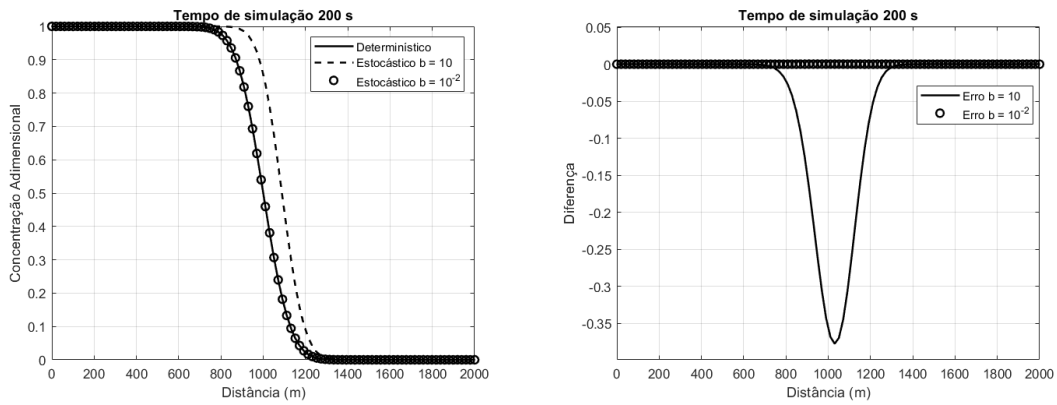


Figura 15 – Variação no perfil de concentrações, para $b = 10$ (AUTORIA PRÓPRIA; 2023).

4.2.2 Bidimensional

Diferente do caso unidimensional, o perfil de concentrações na direção do vento não tende à mesma concentração da fonte. É observado que o campo de concentrações decai conforme aumenta a distância para a fonte, visto que os agentes radiológicos se espalham por uma área, atendendo a hipótese da conservação de massa (Eq. 2.2) estabelecida no presente estudo.

Além disso, a nuvem de agentes radiológicos não apresenta uma espécie de translação da curva, pois o principal efeito observável, dada a variação independente dos parâmetros estocásticos nas duas coordenadas espaciais, é uma alteração na direção do vento. Essa mudança é o principal diferencial do modelo estocástico bidimensional frente aos modelos determinísticos e estocásticos unidimensional e ao modelo determinístico bidimensional.

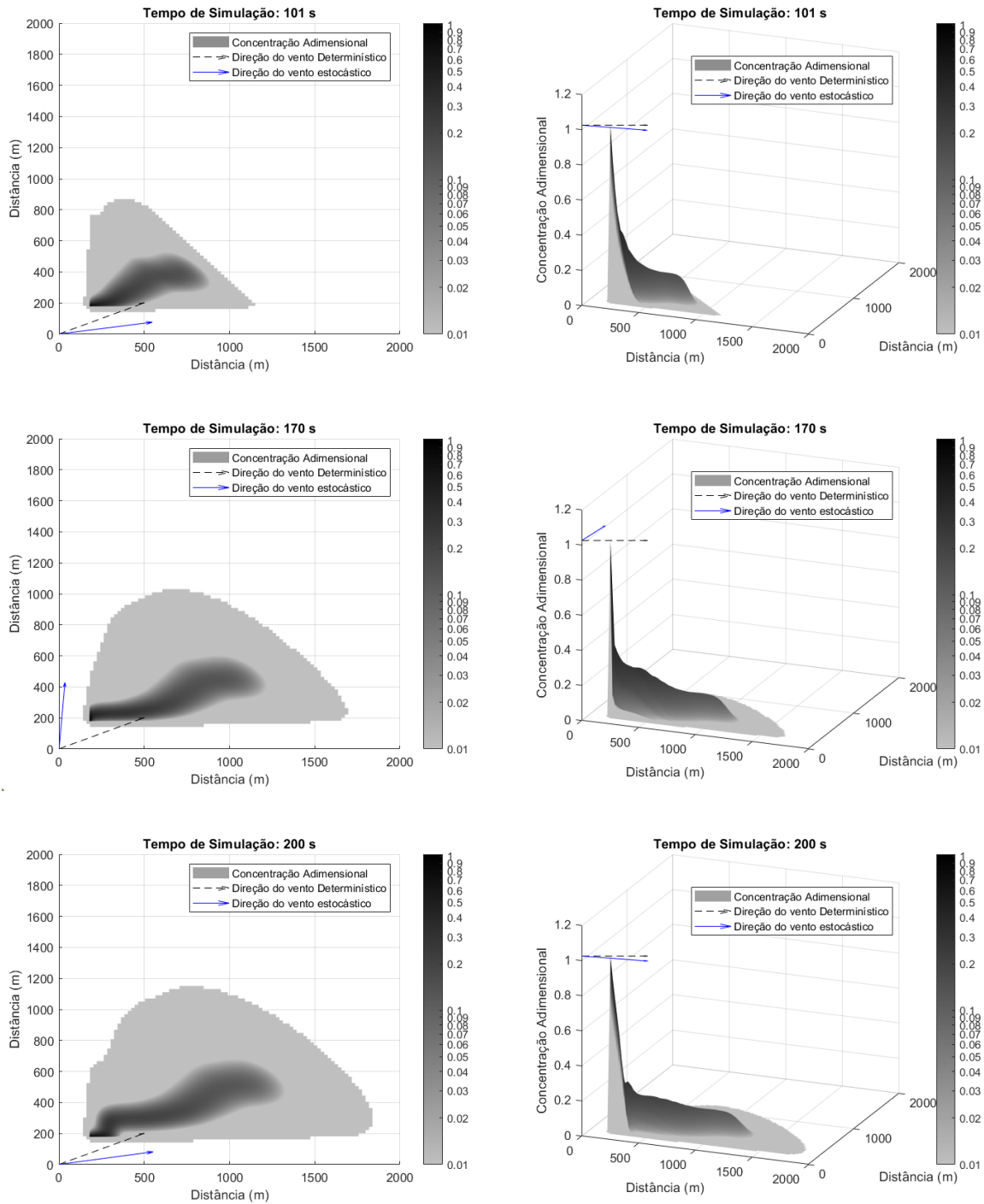


Figura 17 – Perfil de concentrações do modelo estocástico para o caso bidimensional, para $b = 5$ (AUTORIA PRÓPRIA; 2023)

probabilidade de inversão de direção do fator advectivo está mais alta e a equação foi discretizada em diferenças progressivas, o que leva a uma inconsistência no modelo criado para o presente estudo.

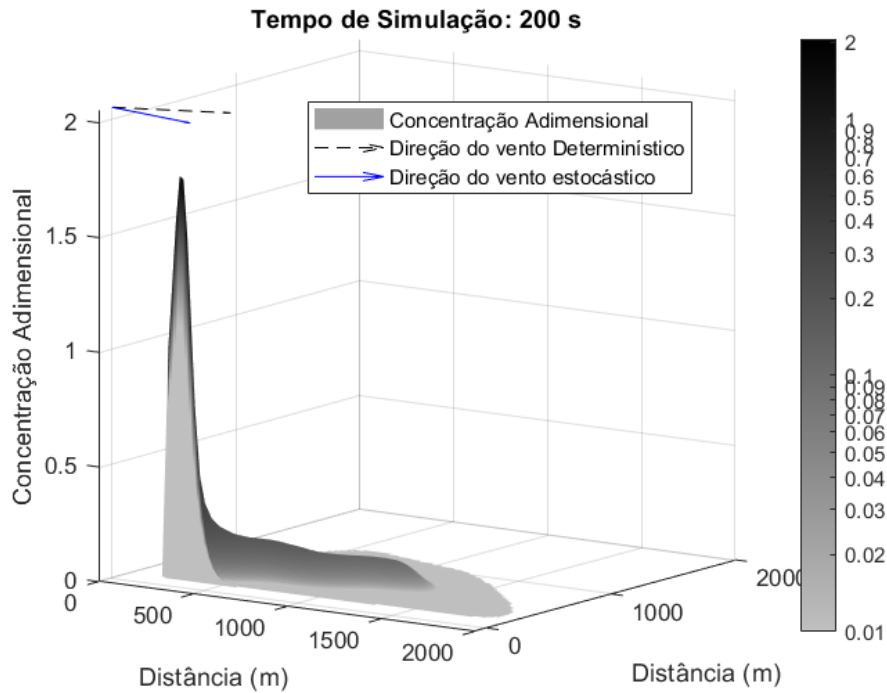


Figura 18 – Caso de acúmulo de radionuclídeos (AUTORIA PRÓPRIA; 2023)

4.3 Dose Efetiva Acumulada

A Eq. 3.31 mostra que o valor da dose efetiva acumulada é obtida por meio da distribuição do campo escalar de concentrações adimensionais multiplicada por parâmetros físicos previamente conhecidos, como coeficiente de dose do radionuclídeo e a concentração da fonte. Dessa forma, o perfil da dose efetiva acumulada, tende a seguir o padrão assumido pelo campo de concentrações, sendo mais representativo na direção preferencial do campo de velocidades do vento.

Sendo assim, baseado na quantidade de dose acumulada e nos potenciais riscos à saúde, tornam-se necessárias ações imediatas de proteção durante a fase inicial (ou de emergência) de um evento radiológico e/ou nuclear. Nesse estudo, foram tratadas as ações de abrigo e evacuação, cujos níveis genéricos de intervenção para cada situação são, respectivamente, 10 mSv e 50 mSv (CNEN, 2011). Além disso, foi considerado o valor de 3 mSv como referencial, em alusão ao limite anual de dose para um indivíduo de público para Rn^{222} (ICRP, 2017).

Para avaliar as diferentes áreas de ação de proteção, os parâmetros de simulação computacional desta seção foram os valores da Tabela 2, com exceção dos valores de comprimento do domínio espacial bidimensional (L), que passou a ser 5000 m, e do tempo total de simulação (t_f), que passou a ser 3600 s. Essa configuração hipotética objetiva oferecer uma visão inicial da periculosidade da região observada, o que oferece maior assertividade para a tomada de decisões de autoridades competentes, conforme mostram

as figuras 19, 20 e 21. Cabe ressaltar que, no caso dos valores estimados de dose efetiva acumulada, utilizou-se a abordagem estocástica, pelo fato de representar de forma mais realista uma situação de incidente/acidente com liberação de material para a atmosfera.

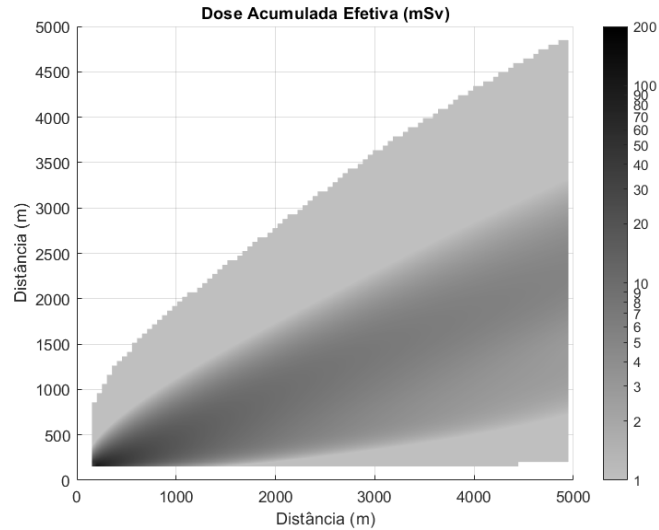


Figura 19 – Perfil de Dose Efetiva Acumulada (mSv) (AUTORIA PRÓPRIA; 2023)

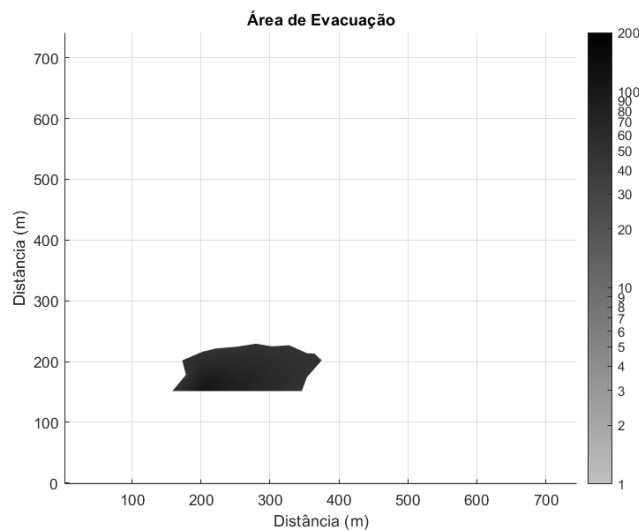


Figura 20 – Área de evacuação imediata (AUTORIA PRÓPRIA; 2023)

De acordo com os dados apresentados na Figura 21, que apresenta a evolução da área atingida pelas plumas de contaminação já dividida em zonas limites em função da distância ao termo fonte, os resultados indicam que essas zonas limites para adoção das ações de abrigagem e evacuação evoluem no tempo de forma individual e apresentam diferenças, quando comparadas entre si, apresentando também severa dependência com as classes do modelo de Pasquill, que neste estudo, guarda correlação direta com o parâmetro de relevância estocástica. Esta dependência se apresenta mais intensa para situações de menor turbulência na atmosfera.

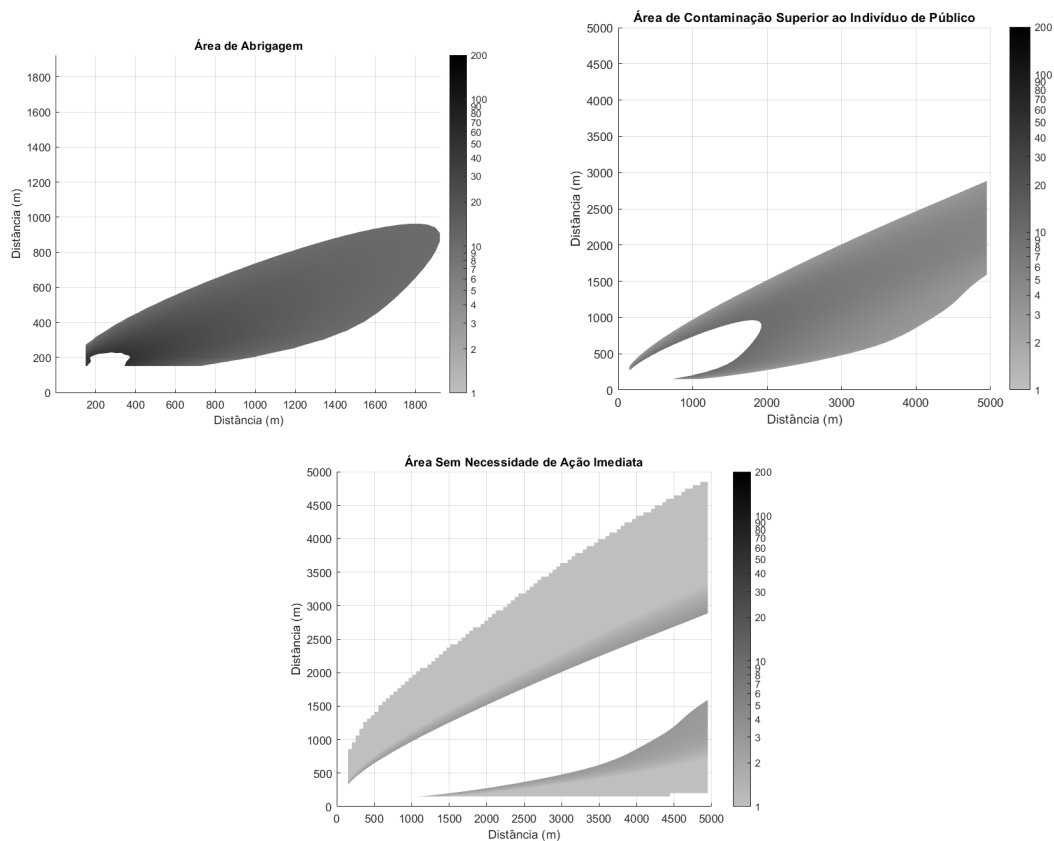


Figura 21 – Áreas de ação de proteção (AUTORIA PRÓPRIA; 2023)

Neste caso, as mudanças podem expandir as classificações de risco para áreas consideradas inicialmente seguras, alterando o mapa de risco tomado como base para a construção da estratégia de resposta. Este fato, caso não seja previsto antecipadamente, pode influenciar dramaticamente as estimativas de recursos e impacto na viabilidade das operações logísticas em geral, no que diz respeito à atuação de equipes de respostas a situações emergenciais envolvendo liberação de material radioativo para a atmosfera.

Além disso, cumpre também asseverar que os dados simulados sugerem que as áreas propostas para evacuação e abrigagem podem sofrer variações positivas (crescimento) sobretudo nas primeiras horas do evento radiológico, a depender do nível de turbulência na atmosfera. Esse achado é relevante para subsidiar o processo de tomada de decisão, uma vez que permite estimar o tamanho da população sob ameaça (taxa de dose), local e momentos específicos. Permite, ainda, uma avaliação conservadora da expectativa de crescimento de uma população sob risco em função do tempo, com impacto tanto sobre alocação de recursos, como ao meio ambiente, num estágio mais avançado.

4.4 Custo Computacional

Para finalizar a análise deste capítulo, nesta seção serão avaliados os custos computacionais para cada tipo de modelo citado no presente estudo, tomando como métrica o intervalo de tempo necessário para computação dos dados em função da quantidade de pontos presentes na malha. Por simplicidade, serão utilizados apenas os modelos determinísticos, visto que, dentro do mesmo número de dimensões espaciais, os modelos estocásticos devem seguir o mesmo comportamento.

Dessa forma, foram computados os tempos de execução dos métodos explícito unidimensional, implícito unidimensional para malhas com 100, 200, 400, 800, 1600, 3200, 6400 e 12800 pontos. Para o modelo explícito bidimensional, computou-se o tempo de execução para malhas com 100, 200, 400 e 800, visto que, a partir de 1000 pontos na malha bidimensional, o software MATLAB apresenta o erro de não conseguir alocar memória suficiente para criação da matriz tridimensional requerida.

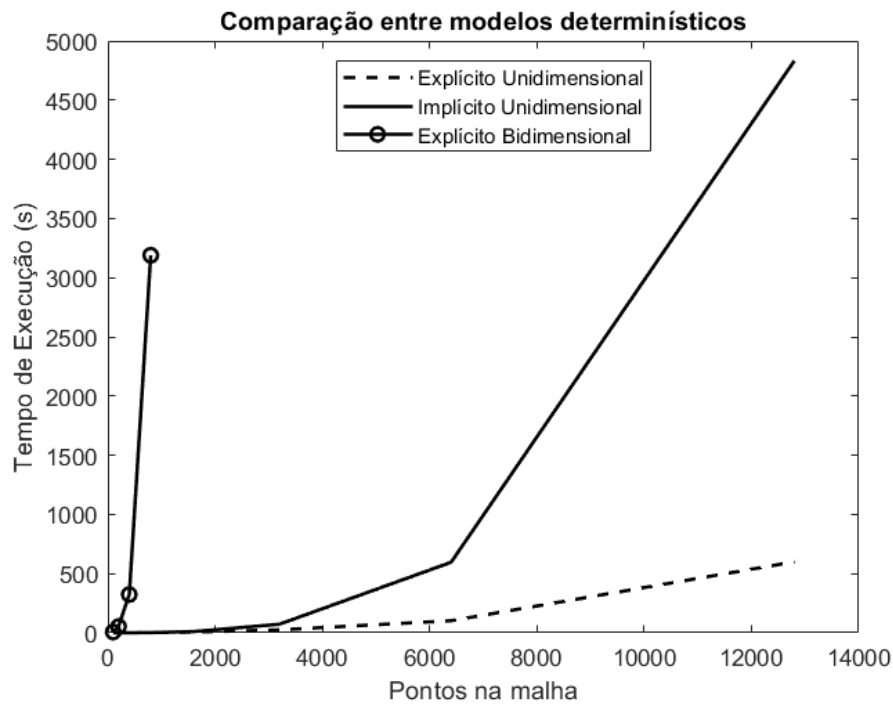


Figura 22 – Tempo de Execução por quantidade de pontos na malha (AUTORIA PRÓPRIA; 2023)

A partir da Figura 4.4, é possível notar que, em relação ao método explícito unidimensional, o método implícito unidimensional é muito mais custoso computacionalmente já que, para cada passo de tempo, um sistema algébrico precisa ser resolvido. Por outro lado, em relação ao modelo explícito bidimensional, é notável que o tempo de execução é significativamente maior do que o método implícito unidimensional. A inserção de outra dimensão espacial faz com que a quantidade de valores a serem computados seja multiplicado

por, pelo menos, o número de pontos da malha na direção y .

5 CONCLUSÃO

O presente estudo percorreu diversas etapas para atingir seu objetivo geral e seus objetivos específicos. No decorrer do texto, foram identificados os principais tópicos sobre a dispersão atmosférica de agentes radiológicos na atmosfera, sob a abordagem macroscópica descrita pela equação da Advecção-Difusão. No prosseguimento, abordou-se, nos casos unidimensional e bidimensional, a modelagem determinística e estocástica dessa equação, permitindo a investigação por simulações computacionais da dispersão de agentes radiológicos no meio atmosférico sob efeito de um vento estocástico.

Ademais, foi observado, por meio da análise dos números adimensionais (Peclet, Courant e Fourier), que o fenômeno de transporte de matéria majoritário é o advectivo, em detrimento ao difusivo. Isso ocorreu porque os parâmetros físicos adotados para o campo de velocidades e para o coeficiente de difusão, possuem uma diferença entre si de cerca de 5 ordens de grandeza, gerando um elevado valor para o número de Peclet, o que, favorece, portanto, a utilização do método explícito com o esquema Upwind, cuja restrição é que Pe seja maior do que 2.

No que se refere à performance dos modelos utilizados, os resultados obtidos mostraram-se fisicamente coerentes, respeitando premissas adotadas, como a hipótese da continuidade (conservação da massa). Apesar disso, discutiu-se sobre como o método explícito tende a apresentar a inconsistência da “difusão numérica”, gerando imprecisões, principalmente em locais de alto gradiente do campo escalar estudado. Dessa forma, o fato de o modelo computacional (abordagem estocástica) ser submetido à mudanças no módulo e direção do vento para determinados intervalos de tempo apresentou, em algumas simulações, desvios indesejados que, ocasionalmente, estavam relacionados a problemas de divergência. Apesar disso, na maior parte das vezes, o modelo apresentou resultados coerentes e concordantes com a fundamentação teórica e metodologia apresentadas nos capítulos 2 e 3.

Além disso, outra constatação relevante deste estudo se refere à dependência espacial da dispersão atmosférica em função das distâncias ao ponto de liberação, demonstrando forte relação com o nível de turbulência existente na atmosférica, que neste estudo, foi representado pelo parâmetro de relevância estocástica b , em analogia às condições impostas pelas classes de Pasquill-Gifford.

Dessa forma, as teorias dos modelos computacionais de dispersão foram apresentadas para simular a dispersão de Rn^{222} proveniente de um acidente hipotético em um reator nuclear de pequeno porte (SMR). O resultado das simulações foram discutidas no decorrer do Capítulo 4, de forma que foi possível avaliar e propor uma região de Predição Detalhada

de perigo QBRN (CDAEX, 2019), o que é de suma importância para o gerenciamento de informações e dos sistemas de alertas. Com isso, o estudo apoia a criação de estratégias complementares para lidar com situações que envolvam um possível evento radiológico com dispersão de material radioativo.

Como sugestão de trabalhos futuros na área de fluidodinâmica computacional, sugere-se a combinação do modelo computacional construído com sistemas que integrem dados meteorológicos locais e informações sobre o terreno. Essa conciliação permitiria determinar com maior precisão o comportamento dos campos escalares de concentração e dose efetiva acumulada.

Ressalta-se também que a metodologia apresentada neste estudo mostra condições de ser aplicada a outras áreas (não apenas à nuclear) que necessitam de ferramentas computacionais para avaliar desastres em condições de pouca informação inicial. Implantando-se as necessárias adaptações, resultados semelhantes poderiam servir de apoio à decisão em outras áreas que envolvam a liberação de materiais químicos ou biológicos.

Além disso, sugere-se a utilização de modelos estocásticos que favoreçam a continuidade do campo vetorial de velocidades, de forma que, inconsistências físicas sejam evitadas durante a simulação. Uma opção é a utilização do método do Polinômio Generalizado do Caos, que, além de gerar uma função contínua para a variável em questão, é um modelo mais eficiente para representar processos não-gaussianos, o que não foi abordado no presente estudo.

Diante do exposto, é seguro dizer que o objetivo geral deste trabalho foi atendido, visto que diferentes análises para a equação da Advecção-Difusão sob efeito de um vento estocástico foram realizadas, a partir de dados de concentração de um agente radiológico e de dose acumulada, obtidos por simulações computacionais.

REFERÊNCIAS

- ANCEY, C.; BOHORQUEZ, P.; HEYMAN, J. Stochastic interpretation of the advection-diffusion equation and its relevance to bed load transport. **Journal of Geophysical Research: Earth Surface**, v. 120, p. 2529–2551, 2015. doi: 10.1002/2014jf003421.
- ANDERSON, D.; TANNEHILL, J. C.; PLETCHER, R. H. **Computational fluid mechanics and heat transfer**. [S.l.]: Taylor & Francis, 2016.
- BILGIÇ, E.; GÜNDÜZ, O. Analysis of the impact of various vertical release patterns on the atmospheric dispersion and total deposition of 137cs from chernobyl nuclear power plant accident. **Environmental Science and Pollution Research**, Springer Science and Business Media LLC, v. 28, n. 47, p. 66864–66887, jul. 2021. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s11356-021-15211-8>>.
- BOÇON, F. T. *et al.* Modelagem matemática do escoamento e da dispersão de poluentes na microescala atmosférica. Florianópolis, SC, 1998.
- BRISTEAU, M.; GLOWINSKI, R.; PERIAUX, J. Numerical methods for the navier-stokes equations. applications to the simulation of compressible and incompressible viscous flows. **Computer Physics Reports**, Elsevier BV, v. 6, n. 1-6, p. 73–187, ago. 1987. doi: 10.1016/0167-7977(87)90011-6.
- CDAEX. **PLANO ESTRATÉGICO DO EXÉRCITO 2020-2023**. 2019. <http://www.ceadex.eb.mil.br/images/legislacao/XI/plano_estrategico_do_exercito_2020-2023.pdf>. Acessado em: 03/05/2023.
- CNEN. **Critérios de Intervenção em Situações de Emergência–PR 3.01/006**. [S.l.]: Brasília, 2011.
- COTER. **Manual de Campanha EB70-MC-10.233 Defesa Química, Biológica, Radiológica e Nuclear**. 2016. <<https://bdex.eb.mil.br/jspui/bitstream/123456789/63/1/EB70-MC-10.233.pdf>>. Acessado em: 26/07/2023.
- CURZIO, R. C. **Determinação da blindagem para proteção contra radiação proveniente da dispersão atmosférica provocada por evento radiológico**. Dissertação (Mestrado) — Instituto Militar de Engenharia, Praça General Tibúrcio, 80, Rio de Janeiro - RJ, 2020.
- DAUS, A.; FRIND, E.; SUDICKY, E. Comparative error analysis in finite element formulations of the advection-dispersion equation. **Advances in Water Resources**, Elsevier BV, v. 8, n. 2, p. 86–95, jun. 1985. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/0309-1708\(85\)90005-3](https://doi.org/10.1016/0309-1708(85)90005-3)>.
- DITLEVSEN, O. Stochastic models for atmospheric particle dispersion. **Probabilistic engineering mechanics**, Elsevier, v. 18, n. 2, p. 97–106, 2003.
- EL-KALLA, I.; EL-DESOUKY, B. S.; EL-BELTAGY, M. A. Numerical treatment of the stochastic advection-diffusion equation using the spectral stochastic techniques. **International Journal of Engineering Research and Science**, AD Publications, v. 4, n. 6, 2018.

- FORD, W. Algorithms. In: **Numerical Linear Algebra with Applications**. Elsevier, 2015. p. 163–179. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/b978-0-12-394435-1.00009-0>>.
- GAINES, J. G. Numerical experiments with s(p)DE's. In: **Stochastic Partial Differential Equations**. Cambridge University Press, 1995. p. 55–71. Disponível em: <<https://doi.org/10.1017/cbo9780511526213.005>>.
- GORAJ, R. Transformation of the navier-stokes equation to the cauchy momentum equation using a novel mathematical notation. **Applied Mathematics**, Scientific Research Publishing, Inc., v. 07, n. 10, p. 1068–1073, 2016.
- GREEN, A. R.; ERHARDT, L.; LEBEL, L.; DUKE, M. J. M.; JONES, T.; WHITE, D.; QUAYLE, D. Overview of the full-scale radiological dispersal device field trials. **Health physics**, v. 110, n. 5, p. 403–417, 2016.
- HIDAYAT, M. I. P. Meshless finite difference method with b-splines for numerical solution of coupled advection-diffusion-reaction problems. **International Journal of Thermal Sciences**, Elsevier, v. 165, p. 106933, 2021.
- IBE, O. **Markov processes for stochastic modeling**. [S.l.]: Newnes, 2013.
- ICRP. **1990 Recommendations of the International Commission on Radiological Protection**. [S.l.]: ICRP Publication 60. Ann. ICRP 21 (1-3), 1991.
- ICRP. **Lung Cancer Risk from Radon and Progeny and Statement on Radon**. [S.l.]: ICRP Publication 115, Ann. ICRP 40(1), 2010.
- ICRP. **Radiological Protection against Radon Exposure**. [S.l.]: ICRP Publication 126. Ann. ICRP 43(3), 2014.
- ICRP. **Occupational Intakes of Radionuclides: Part 3**. [S.l.]: ICRP Publication 137. Ann. ICRP 46(3/4), 2017.
- JIMENEZ, S.; ANA, H. Solución numérica de la ecuación advección-difusión. Universidad Nacional Mayor de San Marcos, 2016.
- LANGTANGEN, H. P.; PEDERSEN, G. K. **Scaling of differential equations**. [S.l.]: Springer Nature, 2016.
- MENDES, N.; CHHAY, M.; BERGER, J.; DUTYKH, D. Numerical methods for diffusion phenomena in building physics. **PUCPress, Curitiba, Brazil**, Springer, v. 1, p. 3, 2016.
- MICKENS, R. E. **Mathematical Modelling with Differential Equations**. [S.l.]: CRC Press, 2022.
- MITGCM. **Advective Diffusion Equation**. 2004. <http://mitgcm.org/~edhill/Tracer_work/papers/ch2.pdf>. Acessado em: 09/05/2023.
- NRC. **US Nuclear Regulatory Commission Regulatory Guide**. [S.l.]: The Office, 2007. v. 88.
- ØKSENDAL, B. **Stochastic differential equations**. [S.l.]: Springer, 2003.
- PASQUILL, F.; SMITH, F. B. **Atmospheric diffusion**. [S.l.]: E. Horwood New York, NY, USA, 1983. v. 437.

- RICHARDSON, R. A. Sparsity in nonlinear dynamic spatiotemporal models using implied advection. **Environmetrics**, Wiley, v. 28, n. 6, p. e2456, jul. 2017. doi: 10.1002/env.2456.
- SAUER, T. Computational solution of stochastic differential equations. **Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Statistics**, v. 5, n. 5, p. 362–371, 2013. doi: doi.org/10.1002/wics.1272.
- SCHLICHTING, A.; SEIS, C. Convergence rates for upwind schemes with rough coefficients. **SIAM Journal on Numerical Analysis**, Society for Industrial & Applied Mathematics (SIAM), v. 55, n. 2, p. 812–840, jan. 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.1137/16m1084882>>.
- WAN, X.; XIU, D.; KARNIADAKIS, G. E. Stochastic solutions for the two-dimensional advection-diffusion equation. **SIAM Journal on Scientific Computing**, Society for Industrial & Applied Mathematics (SIAM), v. 26, n. 2, p. 578–590, jan. 2004. doi: 10.1137/s106482750342684x.
- WELTY, J.; RORRER, G. L.; FOSTER, D. G. **Fundamentals of momentum, heat, and mass transfer**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2020.
- WYNGAARD, J. C. Atmospheric turbulence. **Annual Review of Fluid Mechanics**, Annual Reviews 4139 El Camino Way, PO Box 10139, Palo Alto, CA 94303-0139, USA, v. 24, n. 1, p. 205–234, 1992.
- YI, Y.; HU, Y.; ZHAO, J. Positivity preserving logarithmic euler-maruyama type scheme for stochastic differential equations. **Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation**, Elsevier, v. 101, p. 105895, 2021.

APÊNDICE A – SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL

A.1 Pré-requisitos

Para executar com sucesso os arquivos de código gerados, os softwares necessários são *git*, para versionamento de código, e MATLAB, para execução dos arquivos de extensão *m*. Para clonar o repositório, o seguinte comando deve ser utilizado:

```
git clone https://github.com/vini-machado/pfc.git
```

A.2 Estrutura do projeto

O código foi inserido na pasta *MATLAB/advection_diffusion* e distribuído nas subpastas, de acordo com a Tabela 3

Pasta	Descrição
.\mdf_1D	Arquivos referentes ao MDF Unidimensional
.\mdf_2D	Arquivos referentes ao MDF Bidimensional
.\playground	Arquivos <i>Live Script</i> (Pós-processamento interativo)
.\steps	Pré-processamento de parâmetros de simulação
.\stochastic	Arquivos responsáveis por gerar o ruído estocástico
.\utils	Arquivos auxiliares de pós-processamento
inputs.m	Pré-processamento de parâmetros físicos
main.m	Arquivo principal e executável

Tabela 3 – Estrutura de pastas do projeto

É importante destacar que, para que a simulação seja executada corretamente, basta que sejam modificados as variáveis contidas no arquivo *inputs.m*, conforme a necessidade e objetivos de cada simulação, e executar o arquivo *main.m*. Os arquivos que não estão na pasta raiz do projeto são apenas funções que são chamadas ao longo da computação dos valores de concentração desejados.

A pasta *steps* faz parte do pré-processamento dos modelos. Seus arquivos consultam variáveis contidas no arquivo *inputs.m* para definir parâmetros fundamentais para a simulação, como a distância entre os nós da malha espacial e temporal.

As pastas *mdf_1D* e *mdf_2D* contém os arquivos responsáveis pela resolução das equações discretizadas e pela construção dos gráficos do perfil do campo escalar de concentrações. No caso da simulação de modelos estocásticas, as funções da pasta *stochastic*

são chamadas para que, a partir da definição das variáveis básicas do processo de Wiener, possam compor no ruído estocástico inerente ao campo de velocidades.

A pasta *utils* faz parte do pré-processamento dos modelos. Seus arquivos auxiliam na definição de propriedades dos gráficos gerados, além de exportar no formato *.csv* as matrizes geradas pela simulação.

Por fim, a pasta *playground* não constitui parte fundamental do projeto, sendo apenas uma alternativa interativa para análise dos resultados gerados pelo código, sem necessidade de pausar a simulação ou de executar várias vezes utilizando os mesmos parâmetros utilizados no arquivo *inputs.m*.