

MIGRAÇÃO DE RADIONUCLÍDEOS EM MEIO FRATURADO: ESTUDO NUMÉRICO
DA CONVECÇÃO/DIFUSÃO NA FRATURA E DIFUSÃO NA ROCHA MATRIZ E
SOLUÇÃO NUMÉRICA PARA O MODELO DE DISSOLUÇÃO DE
SOLUBILIDADE LIMITADA

Claudia Siqueira da Silveira

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DA COORDENAÇÃO DOS
PROGRAMAS DE PÓS-GRADUAÇÃO DE ENGENHARIA DA UNIVERSIDADE
FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS
PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA
NUCLEAR.

Aprovada por:

Prof. Antonio Carlos Marques Alvim, Ph.D.

Prof. Eduardo Gomes Dutra do Carmo, D.Sc.

Prof. Marcos Oliveira de Pinho, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

FEVEREIRO DE 2008

SILVEIRA, CLAUDIA SIQUEIRA DA

Migração de Radionuclídeos em Meio Fraturado: Estudo Numérico da Convecção-Difusão na Fratura e Difusão na Rocha Matriz e Solução Numérica para o Modelo de Dissolução de Solubilidade Limitada [Rio de Janeiro] 2008

XII, 84 p. 29,7 cm (COPPE/UFRJ, M.Sc., Engenharia Nuclear, 2008)

Dissertação - Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE

1. Migração de Radionuclídeos
2. Método de Diferenças Finitas

I. COPPE/UFRJ II. Título (série)

Aos Bons Amigos...

AGRADECIMENTOS

Ao professor Antonio Carlos Marques Alvim, pela oportunidade que me deu ao orientar-me neste trabalho.

Ao corpo docente da Engenharia Nuclear da COPPE/UFRJ, com os quais tive a satisfação de aprender e evoluir.

Ao professor Aquilino Senra Martinez por possibilitar a minha utilização dos computadores do laboratório da H109. Agradeço também a todos da H109 pela simpatia com que me acolheram.

Ao Doutor Zelmo pela inestimável ajuda que me prestou e que muito me ajudou nas várias vezes que precisei.

A todos os funcionários do programa de Engenharia Nuclear da COPPE.

Aos amigos que tive a felicidade de encontrar nesta jornada, sempre dispostos a ajudar: Kally, Diego e Graciele.

As minhas crianças, pelos sorrisos e alegrias que sempre transmitem: George, Yasmin, Pedro e Yago (você por enquanto é só alegria!).

Aos meus familiares.

A todos que de alguma forma contribuíram positivamente com este trabalho.

E, por último e não menos importante, ao meu melhor amigo Edson Vieira.

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

MIGRAÇÃO DE RADIONUCLÍDEOS EM MEIO FRATURADO: ESTUDO NUMÉRICO
DA CONVECÇÃO/DIFUSÃO NA FRATURA E DIFUSÃO NA ROCHA MATRIZ E
SOLUÇÃO NUMÉRICA PARA O MODELO DE DISSOLUÇÃO DE
SOLUBILIDADE LIMITADA

Claudia Siqueira da Silveira

Fevereiro/2008

Orientador: Antonio Carlos Marques Alvim

Programa: Engenharia Nuclear

Para repositório definitivo dos rejeitos radioativos de alta atividade têm-se considerado os depósitos geológicos profundos, de baixa permeabilidade e estáveis. Um problema comum encontrado é a modelagem da migração dos radionuclídeos em um meio fraturado. Neste trabalho, o sistema físico adotado consiste na rocha matriz contendo uma fratura discreta em um meio poroso saturado de água. As equações diferenciais parciais que descrevem o movimento dos radionuclídeos foram discretizadas por diferenças finitas, sendo adotados os métodos: Euler Explícito, Euler Implícito e Crank-Nicolson. E, para cada um destes métodos, o termo convectivo foi discretizado pelos seguintes esquemas numéricos: diferenças atrasadas, diferenças centradas e diferenças progressivas.

O objetivo deste estudo foi avaliar como e em que condições estes tratamentos são representativos do problema em questão. E fazer uma comparação, para determinar qual discretização temporal e espacial tem o melhor desempenho em relação a uma solução de referência.

Os resultados obtidos mostram que o Método de Euler Explícito com discretização progressiva no termo convectivo tem uma boa acurácia.

Abstract of Dissertation presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

RADIONUCLIDE MIGRATION IN FRACTURED MEDIA: NUMERICAL STUDY OF ADVECTION/DIFFUSION IN A FRACTURE AND DIFFUSION IN THE ROCK MATRIX, AND NUMERICAL SOLUTION FOR A SOLUBILITY LIMITED DISSOLUTION MODEL

Claudia Siqueira da Silveira

February/2008

Advisor: Antonio Carlos Marques Alvim

Department: Nuclear Engineering

Final repositories of high-level radioactive waste have been considered in deep, low permeability and stable geological formations. A common problem found is the migration modeling of radionuclides in a fractured rock. In this work, the physical system adopted consists of the rock matrix containing a single planar fracture situated in water saturated porous rock. The partial differential equations that describe the radionuclide transport were discretized using finite differences techniques, of which the following methods were adopted: Explicit Euler, Implicit Euler and Crank-Nicolson. For each one of these methods, the advective term was discretized with the following numerical schemes: backward differences, centered differences and forward differences.

The proposal of this work is to evaluate how and under what conditions these treatments can be considered a representative of the problem, and to make a comparison to determine which temporal and space discretization has the best result in relation to a reference solution.

The obtained results show that the Explicit Euler Method with forward discretization in the advective term has a good accuracy.

ÍNDICE DO TEXTO

ÍNDICE DE FIGURAS.....	IX
ÍNDICE DE TABELAS.....	XI
1 INTRODUÇÃO.....	01
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	06
3 MIGRAÇÃO DE RADIONUCLÍDEOS.....	11
3.1 Descrição do Modelo Físico.....	11
3.2 Formulação do Problema.....	13
4 MÉTODOS NUMÉRICOS.....	17
4.1 Equações Diferenciais Parciais.....	17
4.2 Equações de Diferenças Finitas.....	18
4.3 Discretização Temporal das Equações de Movimento de Radionuclídeos.....	19
4.4 Discretizações Espaciais da Equação de Movimento de Radionuclídeos na Fratura e Rocha Matriz.....	20
4.5 Consistência, Estabilidade e Convergência.....	22
4.5.1 Consistência.....	23
4.5.2 Estabilidade.....	30
4.5.3 Convergência.....	38

5	ILUSTRAÇÃO NUMÉRICA.....	39
5.1	Resolução das Equações.....	39
5.2	Tratamento da Condição de Contorno.....	42
5.3	Implementação.....	44
5.4	Resultados Numéricos.....	44
5.4.1	Gráficos Comparativos das Discretizações.....	46
5.4.2	Tabelas Comparativas.....	53
5.4.3	Desacoplamento do Termo Fonte.....	58
5.4.4	Gráficos para 1000 e 10000 anos.....	61
6	CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES.....	66
	APÊNDICE A.....	68
	APÊNDICE B.....	73
7	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	81

ÍNDICE DE FIGURAS

Fig. 1.1 - O Método KBS-3 para armazenagem do combustível nuclear gasto.....	02
Fig. 1.2 - Processo de transporte a partir do repositório.....	03
Fig. 3.1 - Geometria do modelo com uma fratura singular, plana e de comprimento infinito.....	11
Fig. 4.1 - Relações entre consistência, estabilidade e convergência.....	23
Fig. 5.1 - Método de Euler Explícito – comparação da concentração normalizada na fratura nas discretizações do termo convectivo e a solução de referência.....	49
Fig. 5.2 - Método de Euler Explícito – comparação da concentração normalizada na rocha matriz nas discretizações do termo convectivo e a solução de referência, para $z=1\text{m}$ e $z=10\text{m}$	49
Fig. 5.3 - Método de Euler Implícito – comparação da concentração normalizada na fratura nas discretizações do termo convectivo e a solução de referência.....	50
Fig. 5.4 - Método de Euler Implícito – comparação da concentração normalizada na rocha matriz nas discretizações do termo convectivo e a solução de referência, para $z=1\text{m}$ e $z=10\text{m}$	50
Fig. 5.5 - Método de Crank-Nicolson – comparação da concentração normalizada na fratura nas discretizações do termo convectivo e a solução de referência.....	51
Fig. 5.6 - Método de Crank-Nicolson – comparação da concentração normalizada na rocha matriz nas discretizações do termo convectivo e a solução de referência, para $z=1\text{m}$ e $z=10\text{m}$	51
Fig. 5.7 - Diferenças Atrasadas no termo Convectivo – comparação da concentração normalizada na fratura nos métodos e a solução de referência.....	52

Fig. 5.8 - Diferenças Centradas no termo Convectivo – comparação da concentração normalizada na fratura nos métodos e a solução de referência.....	52
Fig. 5.9 - Diferenças Progressivas no termo Convectivo – comparação da concentração normalizada na fratura nos métodos e a solução de referência.....	52
Fig. 5.10 - Método de Euler Explícito – comparação da concentração normalizada na fratura nas discretizações do termo convectivo em 1000 e 10000 anos.....	62
Fig. 5.11 - Método de Euler Explícito – comparação da concentração normalizada na rocha matriz nas discretizações do termo convectivo para $z=1m$ e $z=10m$, em 1000 e 10000 anos.....	62
Fig. 5.12 - Método de Euler Implícito – comparação da concentração normalizada na fratura nas discretizações do termo convectivo em 1000 e 10000 anos.....	63
Fig. 5.13 - Método de Euler Implícito – comparação da concentração normalizada na rocha matriz nas discretizações do termo convectivo para $z=1m$ e $z=10m$, em 1000 e 10000 anos.....	63
Fig. 5.14 - Método de Crank-Nicolson – comparação da concentração normalizada na fratura nas discretizações do termo convectivo em 1000 e 10000 anos.....	68
Fig. 5.15 - Método de Euler Implícito – comparação da concentração normalizada na rocha matriz nas discretizações do termo convectivo para $z=1m$ e $z=10m$, em 1000 e 10000 anos.....	64
Fig. 5.16 - Diferenças Atrasadas no termo Convectivo – comparação da concentração normalizada na fratura nos métodos em 1000 e 10000 anos.....	65
Fig. 5.17 - Diferenças Centradas no termo Convectivo – comparação da concentração normalizada na fratura nos métodos em 1000 e 10000 anos.....	65
Fig. 5.18 - Diferenças Progressivas no termo Convectivo – comparação da concentração normalizada na fratura nos métodos em 1000 e 10000 anos.....	65

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 4.1 - Condições de estabilidade dos métodos numéricos para equação do poro.....	33
Tabela 4.2 - Parâmetros para a equação do fator de amplificação.....	35
Tabela 4.3 - Condições de estabilidade dos métodos numéricos sendo o termo convectivo discretizado por diferenças atrasadas.....	37
Tabela 4.4 - Condições de estabilidade dos métodos numéricos sendo o termo convectivo discretizado por diferenças centradas.....	37
Tabela 4.5 - Condições de estabilidade dos métodos numéricos sendo o termo convectivo discretizado por diferenças progressivas.....	38
Tabela 5.1 - Parâmetros físicos para a fratura e matriz rocha.....	44
Tabela 5.2 - Concentração normalizada na fratura.....	45
Tabela 5.3 - Concentração normalizada na rocha matriz sendo $z = 1$ m.....	46
Tabela 5.4 - Malhas utilizadas nos gráficos comparativos.....	47
Tabela 5.5 - Erro relativo percentual dos métodos de Euler Explícito, Implícito e Crank-Nicolson como a solução de referência em 100 anos.....	48
Tabela 5.6 - Erro relativo percentual na fratura para o método de Euler Explícito com a solução de referência em 10 anos.....	53
Tabela 5.7 - Erro relativo percentual na fratura para o método de Euler Implícito com a solução de referência em 10 anos.....	54
Tabela 5.8 - Erro relativo percentual na fratura para o método de Crank-Nicolson com a solução de referência em 10 anos.....	54
Tabela 5.9 - Erro relativo percentual na fratura para o método de Euler Explícito com a solução de referência em 100 anos.....	55

Tabela 5.10 - Erro relativo percentual na fratura para o método de Euler Implícito com a solução de referência em 100 anos.....	55
Tabela 5.11 - Erro relativo percentual na fratura para o método de Crank-Nicolson com a solução de referência em 100 anos.....	55
Tabela 5.12 - Erro relativo percentual na rocha matriz para $z = 1$ metro no método de Euler Explícito com a solução de referência em 100 anos.....	56
Tabela 5.13 - Erro relativo percentual na rocha matriz para $z = 1$ metro no método de Euler Implícito com a solução de referência em 100 anos.....	56
Tabela 5.14 - Erro relativo percentual na rocha matriz para $z = 1$ metro no método de Crank-Nicolson com a solução de referência em 100 anos.....	56
Tabela 5.15 - Erro relativo percentual na rocha matriz para $z = 10$ metros no método de Euler Explícito com a solução de referência em 100 anos.....	57
Tabela 5.16 - Erro relativo percentual na rocha matriz para $z = 10$ metros no método de Euler Implícito com a solução de referência em 100 anos.....	57
Tabela 5.17 - Erro relativo percentual na rocha matriz para $z = 10$ metros no método de Crank-Nicolson com a solução de referência em 100 anos.....	57
Tabela 5.18 - Malhas utilizadas na comparação dos métodos com a solução de referência em 100 anos.....	58
Tabela 5.19 - Comparação dos métodos de Euler Implícito e Crank-Nicolson desacoplados, sendo a discretização atrasada no termo convectivo, com a solução de referência em 100 anos.....	60
Tabela 5.20 - Comparação dos métodos de Euler Implícito e Crank-Nicolson desacoplados, sendo a discretização centrada no termo convectivo, com a solução de referência em 100 anos.....	60
Tabela 5.21 - Malhas utilizadas na comparação dos métodos em 1000 e 10000 anos.....	61

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

Com o advento da tecnologia nuclear, os países que a empregaram receberam muitos benefícios com o aumento na produção de energia, porém como em qualquer atividade relacionada com a industrialização, há inevitavelmente a produção de resíduos. A produção de resíduos radioativos é muito pequena, em termos de volume, quando comparada com outros resíduos industriais. As meias-vidas relativamente longas de alguns radionuclídeos presentes nesse material, bem como a alta atividade e toxicidade química, fazem com que a questão assuma uma importância pertinente, tanto para a geração atual quanto para as futuras.

Parte destes resíduos, os de alta atividade resultante de reprocessamento e combustível irradiado destinado à eliminação direta (HLW – High Level Waste), permanecem perigosos durante milhares de anos e, por isso, devem ser cuidadosamente armazenados, utilizando barreiras que retardem o retorno dos radioisótopos à biosfera.

Dessa forma, o maior desafio envolve o gerenciamento dos rejeitos de longa vida e alta atividade, que devem ser isolados do meio ambiente, sendo os locais de disposição desses rejeitos escolhidos de modo a garantir segurança por muitos milhares de anos, OECD (1999).

Embora não se conheça precisamente até que profundidade a biosfera possa atuar - a profundidade é necessária para eliminar riscos de intrusão humana, animais, plantas, etc; a tendência atual consiste em dispor os rejeitos radioativos em depósitos profundos e geologicamente estáveis. Nesse contexto, passa a assumir grande relevância o enfoque dado à questão do processo de movimentação da água subterrânea, pois o mecanismo pelo qual os radionuclídeos em um repositório com fraturas poderiam retornar à superfície é justamente o sistema de circulação das águas subterrâneas.

Desse modo, verifica-se que, além dos aspectos hidrológicos da possível área de disposição de rejeitos radioativos, é necessário conhecer como as litologias características do local podem absorver/adsorver os radionuclídeos transportados e estabelecer a sua composição mineralógica e química, uma vez que o próprio ambiente geológico pode atuar como uma barreira química. Ademais, como a maioria das rochas permitem a passagem de água, a barreira química que elas possam eventualmente apresentar torna-se mais importante que qualquer barreira física que venham a oferecer, CoRWM (2005).

O principal requisito para um depósito geológico de rejeito radioativo é a baixa permeabilidade e baixa porosidade da matriz rochosa. Assim, as mais variadas alternativas litológicas têm sido sugeridas e testadas, tais como granitos, depósitos e minas de sal, espessos pacotes argilosos, seqüências vulcânicas, basaltos, gnaisses e xistos, DAY et al.(1985). Porém, o consenso é que possivelmente nenhuma delas constitua uma barreira física perfeita para isolar o repositório do seu ambiente circundante, considerando-se, em vez disso, que um tipo seja mais apropriado do que o outro, dependendo do contexto em que esteja inserido.

Atualmente, a principal concepção para um reservatório final do combustível nuclear gasto é baseada no método KBS-3 (KBS-3, 1983), o qual implica que os radionuclídeos de alto nível de atividade são colocados num repositório à profundidade de 500m em rocha cristalina com várias barreiras de engenharia como mostra a figura 1.1.

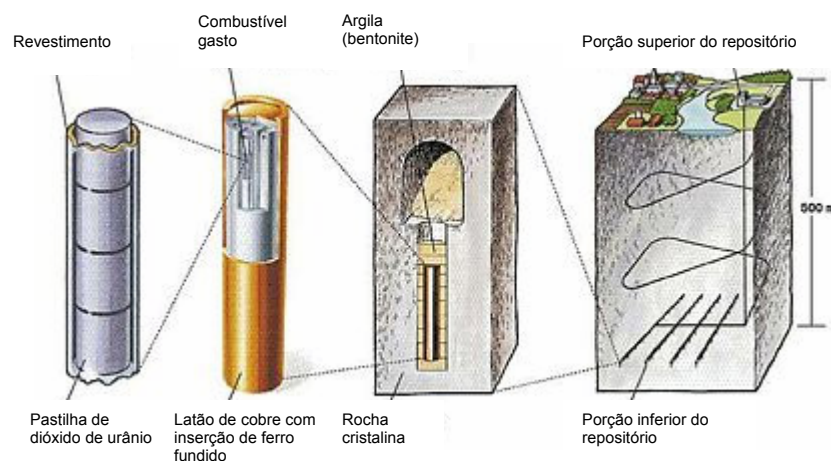


Fig.1.1 - O Método KBS-3 para armazenagem do combustível nuclear gasto.

A avaliação de desempenho do reservatório final para o combustível nuclear gasto inclui avaliação do transporte dos radionuclídeos que acidentalmente escapem através das barreiras locais de engenharia. A geosfera servirá de barreira exterior, que

retardará a migração dos radionuclídeos para a biosfera. Um minucioso entendimento dos mecanismos de migração e o efeito da heterogeneidade espacial das propriedades da rocha no transporte dos radionuclídeos na fratura é, portanto, essencial para a avaliação desse desempenho, JACOB (2004).

O combustível nuclear gasto é enclausurado em latões de cobre com a inserção de ferro fundido. Os latões são colocados em aberturas do piso no túnel de deposição. O latão é circundado por bentonite que irá isolar o latão do fluxo da água subterrânea, manterá o latão no lugar e retardará o transporte de radionuclídeo do latão para a rocha circundante. No pior cenário a se desenvolver, as barreiras de engenharia falharão e a eficiência da barreira para possíveis liberações de radioatividade para a biosfera, apenas dependerão do ambiente rochoso como mostra a figura (2).

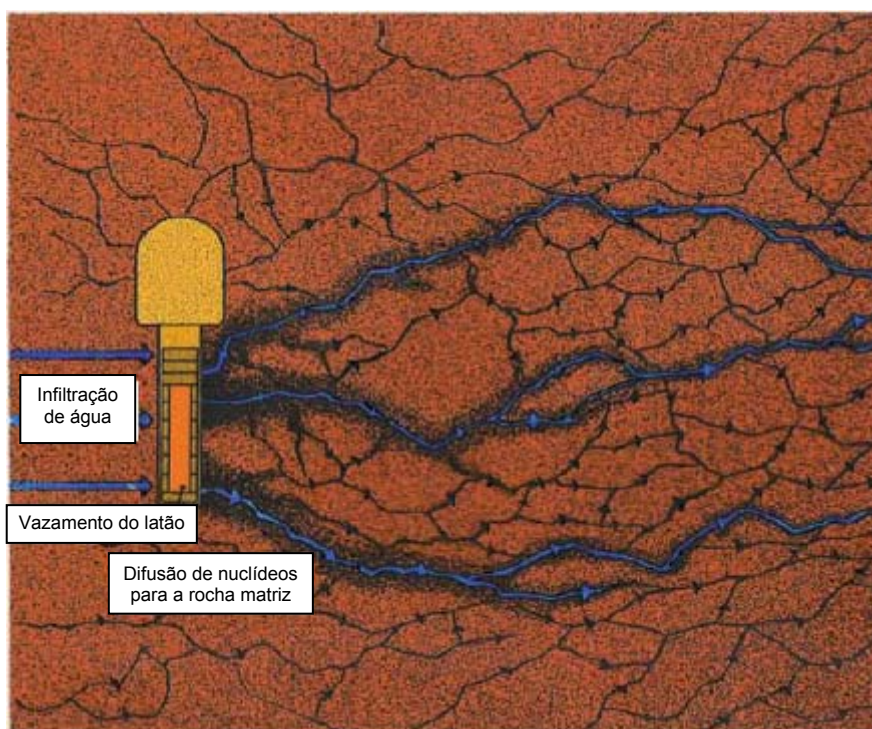


Fig.1.2 - Processo de transporte a partir do repositório.

O limite de solubilidade é um importante fator na liberação do radionuclídeos das barreiras de engenharia, pois limita eficazmente a liberação de muitos radionuclídeos. E conforme SULLIVAN (2004), GARISTO (1987), CHAMBRE (1982), o quanto de radionuclídeo será liberado para o ambiente rochoso dependerá de uma intrincada interação entre a taxa de lixiviação do rejeito, a quantidade de rejeito que estará exposto à água, a meia vida do radionuclídeo, o inventário do radionuclídeo, e a posição do radionuclídeo na cadeia de decaimento.

O modelo de liberação de solubilidade limitada permite uma instantânea liberação para a solução antes que o limite de solubilidade seja alcançado. Posteriormente, as liberações serão controladas pelas migrações dos radionuclídeos do rejeito para a solução. Um balanço é alcançado entre a taxa de liberação e a taxa de migração de tal forma que a concentração da solução permaneça no limite de solubilidade, ou seja, constante.

Este modelo pode ser aplicado para um nuclídeo específico e, freqüentemente é aplicado como taxa de controle no mecanismo de liberação para contaminantes que tem baixa solubilidade em águas subterrâneas, como urânio, plutônio, neptúncio e outros actínídeos. O ^{237}Np é um dos actínídeos mais importante no rejeito nuclear, devido à sua meia-vida longa e seu fator de dose alto.

O modelo de solubilidade limitada é freqüentemente aplicado em conjunto com outro mecanismo de liberação. Em tais casos, o mecanismo alternativo assume o controle da liberação a menos que, o limite de solubilidade seja excedido. Se isso ocorrer, a precipitação do contaminante ocorrerá de forma que a concentração da solução será igual ao limite de solubilidade. A massa do precipitado se dissolverá conforme os mecanismos de transporte removerem o contaminante do rejeito para o meio rochoso.

Se o limite de solubilidade for negligenciado, isto acarretará a superestimação da concentração máxima deste nuclídeo.

Este trabalho analisa alguns dos possíveis métodos numéricos que se aplicam às equações diferenciais parciais (EDP) que modelam o problema de migração, sendo dominante na fratura o transporte convectivo/difusivo e nos poros o transporte difusivo.

O Capítulo 2 tem por finalidade posicionar o trabalho no contexto da literatura, fazendo uma revisão bibliográfica onde são abordados alguns trabalhos que desenvolveram soluções analíticas e numéricas para estudar a migração de radionuclídeos em fratura de rocha porosa e cita também alguns trabalhos experimentais para melhor entender o comportamento de mobilização dos radionuclídeos em fraturas de rocha.

No Capítulo 3 são expostas as equações diferenciais parciais que descrevem o transporte de radionuclídeos em uma fratura discreta, baseada em um modelo físico de solubilidade limitada na entrada da fratura.

No Capítulo 4, as equações governantes serão discretizadas por diferenças finitas, onde os seguintes métodos serão adotados: Euler Explícito, Euler Implícito e Crank-Nicolson. Para cada um desses métodos, o termo convectivo será discretizado pelos

seguintes esquemas numéricos: diferenças atrasadas, diferenças centradas e diferenças progressivas.

Ainda neste capítulo, para realizar a análise numérica, estudou-se a consistência dos métodos numéricos adotados, aplicando a expansão em série de Taylor nos termos discretizados, para obter o erro local de truncamento. Em seguida, para a análise da estabilidade numérica das equações, foi determinado o fator de amplificação pelo conhecido Método de von Neumann. E, finalmente, analisou-se a convergência pelo Teorema de Equivalência de Lax.

No Capítulo 5 são apresentados os resultados numéricos para o ^{237}Np onde uma solução de referência é obtida para 10 e 100 anos, e assim, realizada uma comparação das discretizações temporais e espaciais. É realizado um procedimento de desacoplamento do termo fonte e, também, são traçados gráficos ilustrativos para 1000 e 10000 anos.

O Capítulo 6 finaliza com a apresentação das conclusões do trabalho e de recomendações para estudos futuros.

CAPÍTULO 2

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

A migração de radionuclídeo em fratura discreta tem sido estudada desde a década de 70, sendo primeiramente idealizada como uma fratura singular, sem difusão, o que se assemelha ao escoamento em uma tubulação. A difusão na rocha matriz foi então incluída nos modelos, como por exemplo, em NERETNIEKS (1980), RASMUSON (1981), TANG et al.(1981), CHIOU (1992), LI (1993), que contribuiu para retardar a migração do radionuclídeo na matriz de rocha porosa.

Em NERETNIEKS (1980) analisou-se a acessibilidade da rocha matriz para o radionuclídeo na extensão da fratura, que aumenta os mecanismos de retardo na migração de radionuclídeo. Este autor ainda sugeriu que a migração dos nuclídeos, da água na fratura para a água nos poros da rocha matriz por difusão nos poros, pode aumentar o retardo em muitas ordens de magnitude quando comparado com o retardo pela reação na superfície da fratura apenas. O retardo, por outro lado, pode ser muitas ordens de magnitude menor que o valor máximo que poderia ser obtido se toda rocha matriz estivesse acessível. Isto dependerá muito da largura da fratura e do espaçamento entre poros.

Em RASMUSON (1981) estendeu-se o modelo para incluir a dispersão radial e discutiu-se o modelo de migração unidimensional com a solução analítica, a qual é dada em termos de uma integral infinita. O integrando é, às vezes, uma função altamente oscilatória dos parâmetros do sistema. Um método especial de integração foi desenvolvido para calcular a integral infinita. Os autores constataram que a dispersão longitudinal pode afetar significativamente a quantidade de material radioativo que alcança a biosfera. Os radionuclídeos, que podem decair completamente sem dispersão longitudinal, podem chegar a concentrações insignificantes. Os efeitos de dispersão de magnitude podem reduzir significativamente os efeitos de retardo da difusão na matriz.

Uma solução analítica geral foi desenvolvida em TANG et al. (1981) para o problema

da migração do soluto ao longo de uma fratura discreta numa rocha matriz porosa. Os referidos autores mostraram que a difusão na matriz pode ser vista como um valioso mecanismo de segurança nos problemas de contaminação em potencial envolvendo uma fonte concentrada em rocha fraturada. Este mecanismo de segurança dependerá fortemente dos parâmetros de migração; por exemplo, em um sistema com uma matriz largamente porosa e pequena velocidade no fluido da fratura, isto será muito mais efetivo que um sistema com baixa porosidade na matriz e alta velocidade de fluido na fratura.

Em CHIOU (1992) foi desenvolvida uma solução analítica baseada na transformada de Laplace com condição de contorno de entrada tipo fluxo (flux-type boundary condition). Uma comparação entre os perfis de concentração com uma condição de contorno de entrada tipo fluxo e aquelas com uma condição de contorno de entrada tipo concentração mostrou que o perfil da concentração é fortemente influenciado pela condição de contorno de entrada quando o fator de retardo da rocha matriz é alto.

Em LI (1993) foi desenvolvida uma solução analítica baseada na transformada de Laplace, utilizando como condição de contorno de entrada o modelo cinético de solubilidade limitada. À medida que a taxa de dissolução constante se aproxima do infinito, a condição de contorno de entrada do modelo de dissolução de solubilidade limitada pode ser substituída pela condição de contorno de concentração constante. Reafirmando, a condição de contorno de concentração constante representa um limite superior conservativo para a taxa de dissolução de solubilidade limitada. Difusão na matriz aumenta a taxa de dissolução, ainda que este possa também aumentar o retardo no transporte do soluto na fratura.

Todos estes modelos foram baseados em aproximações analíticas. Para representar numericamente a migração de radionuclídeos, citam-se aqui alguns modelos que foram apresentados por GRISAK (1980), BUCKLEY (1994, 1992a, 1992b, 1993a, 1993b) e BOBBA (1989).

Em GRISAK (1980) foi desenvolvido um modelo de elementos finitos para simular a migração do soluto reativo e não-reativo num campo de escoamento unidirecional. O efeito líquido dos coeficientes de difusão na matriz e/ou dos coeficientes de distribuição na matriz foi reduzir significativamente a velocidade efetiva do soluto na fratura.

Em BUCKLEY (1994) foi modificado o coeficiente de dispersão padrão para que a solução da equação média lateral apresentasse concordância com a mais detalhada

análise. Em particular, os efeitos da difusão lateral com reações ocorrendo na interface fratura-matriz foram investigados. Os autores realizaram uma análise numérica detalhada do problema utilizando uma técnica explícita de diferenças finitas envolvendo geometria cilíndrica não-reativa e pratos paralelos. Este estudo forneceu resultados satisfatórios quando comparados com outras publicações.

Em BUCKLEY (1992a), os referidos pesquisadores exploraram várias técnicas numéricas para a solução da equação de transporte. Os métodos utilizados foram: upwind, método Smolarkiewicz e o esquema NND (não oscilatório, sem parâmetros livres e dissipativo) de ZHANG (1992), todos explícitos. Estas técnicas foram também aplicadas para o caso multidirecional onde a solução exata não pode ser obtida.

Em BUCKLEY (1992b), estes autores descrevem a solução numérica da equação de transporte para os dois casos: um modelo "picket fence", no qual f (função redistribuição), é na forma de uma onda quadrada, e um modelo de fratura angular no qual f e Σ (função de espalhamento), são dependentes do ângulo no qual a partícula pode viajar.

Em BUCKLEY (1993a), estes pesquisadores comparam os resultados numéricos da modelagem da equação de difusão com decaimento radioativo unidimensional com a obtida com a equação de transporte, que inclui dependência direcional e, portanto, tem aplicação no poro e na fratura.

Em BUCKLEY (1993b), os autores utilizaram o esquema NND para a equação convectiva-difusiva na fratura junto com o esquema explícito de diferenças finitas (primeira ordem no tempo e de segunda ordem no espaço) para a difusão no poro e aplicaram em dois problemas típicos: para a condição de contorno tipo fluxo sem decaimento radioativo e para a condição de contorno tipo concentração considerando o decaimento radioativo.

Em BOBBA (1989), o autor descreve um modelo matemático para determinar a concentração do soluto num ponto dentro de um sistema simetricamente cilíndrico de matriz porosa (cylindrically symmetrical conduit-porous matrix system). A equação de transporte foi resolvida utilizando a técnica ADI (método implícito de direções alternadas).

Nestes modelos um mecanismo exato da difusão na matriz não foi plenamente considerado devido a sua complexidade matemática. Em vez disso, estes modelos focalizaram o efeito de um sistema de fraturas que interceptam outras fraturas para

criar caminhos para o escoamento de águas subterrâneas e a migração dos radionuclídeos.

Para representar investigações em laboratório, citam-se aqui alguns estudos realizados visando determinar parâmetros básicos relacionados com as litologias selecionadas, como barreiras física e química para a migração de radionuclídeos e para melhor entender o comportamento de mobilização dos radionuclídeos em fraturas de rocha.

O objetivo do estudo de VANDERGRAAF et al.(1996) foi examinar migração de radionuclídeos em uma fratura natural, em bloco de granito, em laboratório. A experiência demonstrou que a sorção e comportamento de migração de radionuclídeos quimicamente simples são muito complexos. E que, após o experimento, a análise do material que revestia a fratura demonstrou uma clara associação dos radionuclídeos com outros grupos minerais.

HÖLTTÄ et al. (1996) realizaram experimentos para examinar os efeitos da difusão na matriz e dispersão hidrodinâmica na migração de radionuclídeos em escala de laboratório.

WILLIAMS (1996) explica e compara os modelos matemáticos usualmente empregados para estudar a migração de radionuclídeos em rocha com fraturas. As vantagens e desvantagens destes modelos são abordadas e uma nova aproximação baseada em uma analogia com transporte de nêutron é introduzida.

Em HÖLTTÄ et al. (1997), as características do escoamento e o comportamento do transporte dos traçadores foram interpretados usando um modelo numérico de compartimento (numerical compartment model) para a dispersão. Também foi calculado o efeito da difusão na matriz usando uma solução analítica ao problema de convecção-difusão, onde a superfície de retardo foi levada em conta. O comportamento do transporte de radionuclídeos nas fraturas foi explicado com base na estrutura rochosa.

Como a escala de tempo envolvida nos estudos de laboratório constitui uma limitação, diante da incerteza de que os resultados obtidos nas medidas de curto intervalo de tempo possam ser extrapolados para os períodos de 10^4 a 10^5 anos, pesquisas também foram direcionadas na avaliação de sistemas naturais constituindo análogos da situação ao redor de um repositório eventualmente fraturado.

A mina de urânio de Koongarra ao norte da Austrália, a mina de urânio Osamu Utsumi

ao sudeste do Brasil, provêem um 'análogo natural' para processos que são de relevância para avaliar a segurança de depósitos de rejeitos radioativos. Em PAYNE (2006) é abordado um projeto internacional que se estende por mais de duas décadas onde Koongarra foi estudado para aumentar a compreensão e o entendimento da migração de radionuclídeos e dos mecanismos de absorção/adsorção que poderiam acontecer nas proximidades de um repositório geológico profundo. Esta pesquisa incluiu extensiva caracterização das condições geológicas, hidrológicas e geoquímicas do local. E também foram estudados padrões da distribuição de radionuclídeos nas rochas e na água subterrânea.

Neste trabalho, o objetivo foi primeiramente fazer uma análise numérica das equações de migração de radionuclídeos dada em LI (1993), que utiliza como condição de contorno de entrada o modelo cinético de solubilidade limitada. Na literatura, encontraram-se trabalhos de análise de estabilidade para a equação convectiva-difusiva para vários esquemas numéricos, WESSELING (1996), BECKERS (1992) e CHAN (1984). Utilizou-se neste trabalho o tratamento mais simples possível para as equações de migração, o método de diferenças finitas nas discretizações, sendo os métodos estudados: Euler Explícito, Euler Implícito e o semi-implícito de Crank-Nicolson. E esta análise teve como foco principal o comportamento do termo convectivo da equação na fratura, sendo este termo discretizado de forma progressiva, centrada e atrasada. O objetivo deste estudo foi avaliar como e em que condições estes tratamentos são representativos do problema em questão. E fazer uma comparação para se determinar qual discretização temporal e espacial tem o melhor desempenho em relação a uma solução de referência dada por um software computacional.

CAPÍTULO 3

MIGRAÇÃO DE RADIONUCLÍDEOS

3.1 Descrição do Modelo Físico

A formulação proposta neste estudo é similar ao modelo utilizado por LI (1993) e TANG et al.(1981). A partir das considerações feitas nestas publicações é que serão realizadas as análises numéricas das equações governantes.

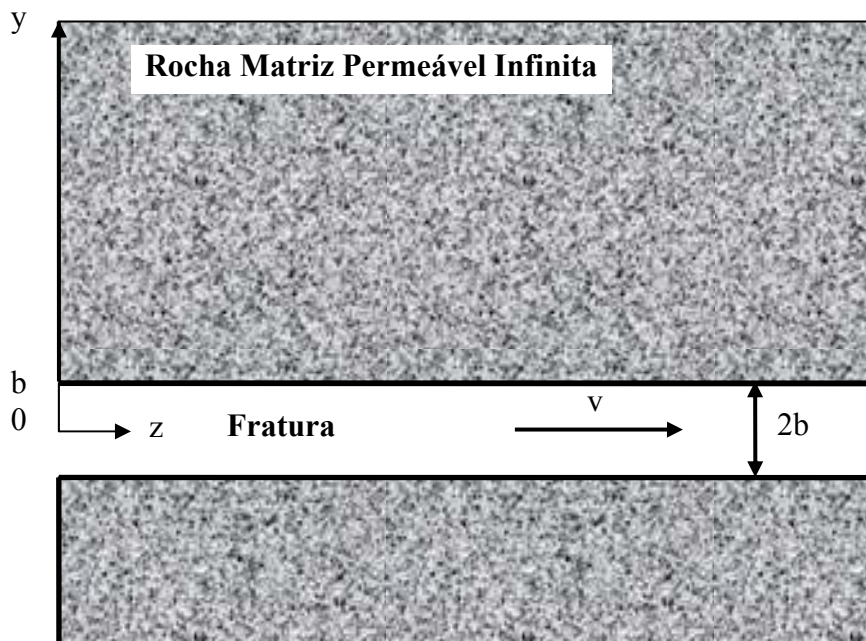


Fig. 3.1 - Geometria do modelo com uma fratura singular, plana e de comprimento infinito.

O sistema físico foi idealizado como mostra a figura 3.1.

Considerou-se que a rocha contém uma fratura plana, com largura $2b$. A rocha matriz foi simplificada como sendo um ambiente poroso plenamente saturado, de porosidade θ . A velocidade da água foi assumida constante com o tempo, especialmente

uniforme dentro da fratura e zero dentro dos poros da rocha matriz. Os mecanismos de transporte na fratura e nos poros considerados no problema foram os seguintes:

1. transporte advectivo ao longo da fratura
2. dispersão hidrodinâmica longitudinal na fratura, na direção do eixo da fratura
3. difusão molecular na rocha matriz
4. adsorção sobre a superfície interna da fratura
5. adsorção na rocha matriz
6. decaimento radioativo sem precursores (neste modelo a cadeia de decaimento não é considerada).

A dispersão hidrodinâmica significa a disseminação das partículas, que é o resultado da dispersão mecânica e da difusão molecular. A dispersão mecânica é causada pela variação da velocidade, e a difusão molecular é causada pelo gradiente da concentração no espaço. No caso do fluxo uniforme e do meio isotrópico, o coeficiente de dispersão hidrodinâmico D_f pode ser expresso como:

$$D_f = a_L v + D^*$$

onde:

a_L = dispersividade na direção do eixo da fratura (m)

v = velocidade da água na fratura (m/ano)

D^* = coeficiente de difusão molecular na água (m²/ano)

No interior da rocha matriz (poros), somente a difusão molecular foi considerada, por causa da baixa permeabilidade do meio. Igualmente, a difusão longitudinal nos poros da rocha matriz é tão pequena que se assumiu não contribuir para a migração do soluto no meio poroso. Visto que a fratura está inteiramente repleta de água, não é considerada a sorção na fratura, exceto na interface fratura com o meio poroso. Dentro da rocha matriz, de certo modo, forte sorção ocorre.

Resumindo, as considerações realizadas para a geometria do problema e suas propriedades hidráulicas foram as seguintes:

1. A largura da fratura é muito menor que seu comprimento.
2. A água da fratura está bem misturada, de forma que a concentração é uniforme em qualquer plano perpendicular à direção do fluxo.
3. O transporte ao longo da fratura é muito mais rápido que o transporte nos poros da rocha matriz.
4. A permeabilidade da rocha matriz é irrisória, de forma que o transporte nos poros é dominado pela difusão molecular.
5. O fluxo de água na fratura é laminar.

Em vista das considerações 1 e 2, a transferência de massa ao longo da fratura pode ser descrita por coordenada retangular unidimensional. Em vista das considerações 3 e 4, o fluxo de massa nos poros da rocha pode ser tomado na direção perpendicular ao plano da fratura. A consideração 5 permite o uso da lei de Darcy, CHAMBRE et al. (1982). Do ponto de vista geoquímico, o equilíbrio químico é assumido entre a água e o soluto. O modelo matemático se encontra descrito no Apêndice A, sendo a partir da equação da convecção/difusão para a fratura e da equação da difusão para a rocha matriz.

3.2 Formulação do Problema

Da teoria do balanço de massa e das considerações feitas para o problema, a equação diferencial parcial que descreve o movimento dos radionuclídeos em uma fratura é dada por:

$$R_f \frac{\partial C_f(z,t)}{\partial t} - D_f \frac{\partial^2 C_f(z,t)}{\partial z^2} + v \frac{\partial C_f(z,t)}{\partial z} + R_f \lambda C_f(z,t) + \frac{q(z,t)}{b} = 0 \quad (3.1)$$

para $z > 0, t > 0$

onde:

$C_f(z,t)$ → concentração do radionuclídeo na água da fratura (Kg-nuclídeo/m³-água)

R_f → fator de retardo na fratura (adimensional), definido como:

$$R_f = 1 + \frac{K_f}{b}$$

K_f → coeficiente de distribuição superficial de soluto por unidade de área da interface da fratura sobre a unidade de volume (m)

t → tempo (ano)

D_f → coeficiente de dispersão longitudinal (m² /ano)

v → velocidade da água na fratura (m /ano)

z → coordenada ao longo da fratura (m)

λ → constante de decaimento (1/ano)

b → metade da largura da fratura (m)

Podemos definir:

$q(z,t)$ → fluxo difusivo da fratura para rocha matriz (Kg-nuclídeo/ m² . ano), como:

$$q(z,t) = -\theta D_p \left. \frac{\partial C_p}{\partial y} \right|_{y=b} \quad (3.2)$$

para $z > 0, t > 0$

Esta última equação fornece o acoplamento entre as equações (3.1) e a do poro, que será vista mais adiante.

θ → porosidade da rocha (adimensional)

$C_p(z,y,t)$ → concentração do radionuclídeo na água do poro (Kg-nuclídeo/m³-água)

D_p → coeficiente de difusão no poro (m² /ano)

y → coordenada perpendicular ao eixo da fratura (m)

Similarmente, a equação que descreve o movimento dos radionuclídeos no poro é:

$$R_p \frac{\partial C_p(z, y, t)}{\partial t} - D_p \frac{\partial^2 C_p(z, y, t)}{\partial y^2} + R_p \lambda C_p(z, y, t) = 0 \quad (3.3)$$

para $|y| \geq b, z > 0, t > 0$

onde:

R_p → coeficiente de retardo na rocha (adimensional), definido como:

$$R_p = 1 + \frac{1-\theta}{\theta} \rho_p K_p$$

K_p → coeficiente de distribuição na rocha, (m³ /Kg)

ρ_p → densidade da rocha, (Kg/m³)

As condições iniciais para as equações (3.1) e (3.3), são:

$$C_f(z, 0) = 0 \quad , \text{para } z > 0$$

e

$$C_p(z, y, 0) = 0 \quad , \text{para } |y| \geq b, z > 0$$

As condições de contorno na fratura são dadas por:

$$-D_f \frac{\partial C_f(z, t)}{\partial z} + v C_f(z, t) = k [C_0 - C_f(z, t)] \quad (3.4)$$

para $z = 0, t > 0$

e

$$C_f(\infty, t) = 0 \quad , \text{para, } t > 0$$

onde:

k → taxa constante (m/ano)

C_0 → solubilidade do soluto (Kg/m³)

Na equação (3.4), os termos do lado esquerdo representam os fluxos de convecção e dispersão, enquanto o termo do lado direito representa a taxa de dissolução cinética de solubilidade-limitada. As condições de contorno na rocha matriz são:

$$C_p(z, b, t) = C_f(z, t) \text{ , para } z > 0, t > 0 \quad (3.5)$$

e

$$C_p(z, \infty, t) = 0 \text{ , para, } z > 0, t > 0$$

A equação (3.5), que especifica a concentração na interface fratura-poro, fornece um outro acoplamento entre as equações.

CAPÍTULO 4

MÉTODOS NUMÉRICOS

4.1 Equações Diferenciais Parciais

De acordo com FORTUNA (2000), para estudar uma vasta gama de fenômenos da natureza, são utilizadas Equações Diferenciais Parciais (EDP), nas mais diversas áreas de aplicações. Para a resolução numérica, é necessário discretizar o domínio, com a criação de uma malha de pontos.

As EDP podem ser classificadas em três categorias básicas: Elípticas (associadas a problemas estacionários, em estado de equilíbrio), Hiperbólicas e Parabólicas, evolutivas com características difusiva e/ou convectiva. As equações estudadas neste trabalho são evolutivas, pois consideram o fenômeno da difusão na matriz e na fratura, o fenômeno convectivo-difusivo, como fator de modificação do estado do sistema, estando associados à denominação EDP parabólica.

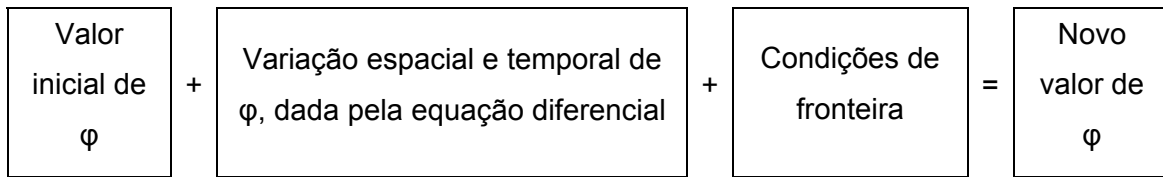
Os problemas evolutivos, transientes ou de propagação, envolvem a variação temporal das grandezas físicas de interesse. A partir dos valores iniciais dessas grandezas em um certo tempo t_0 , calculam-se, pela solução numérica da EDP, seus novos valores em sucessivos intervalos de tempo Δt , até alcançarmos o instante final t_f :

$$t_0 + \Delta t, t_0 + 2\Delta t, t_0 + 3\Delta t, \dots, t_f - \Delta t, t_f$$

Note-se que estamos caminhando (marchando) na dimensão temporal em “passos” de tamanho Δt , desde t_0 até t_f . Por isso, problemas transientes são também denominados “problemas de marcha”.

Os problemas transientes necessitam de valores para a variável dependente em $t = 0$ (condições iniciais), além de condições de fronteira para $t > 0$.

Podemos escrever, esquematicamente:



em que φ é a variável dependente.

Para tratar computacionalmente um problema diferencial é necessário expressar de forma adequada a região (domínio) onde o problema será resolvido. Como usualmente não é possível obter soluções numéricas sobre o domínio, uma região contínua, devido à infinidade de pontos envolvida, inicialmente o domínio é discretizado, isto é, substituído por um conjunto finito de pontos representativos. Somente nesses pontos é que as soluções serão obtidas. Logo, intuitivamente, percebe-se que, quanto maior for o número de pontos da discretização, mais fiel será o resultado numérico obtido. Obviamente, maior será também o custo computacional.

As condições de fronteira que são comumente encontradas na solução de equações diferenciais parciais são:

Condição de fronteira tipo *Dirichlet*: especifica o valor da função no contorno.

Condição de fronteira tipo *Neumann*: especifica uma derivada normal à função no domínio.

Condição de fronteira tipo *Robin*: especifica uma combinação dos dois tipos anteriores.

Neste trabalho se analisam algumas soluções para o problema de transporte de radionuclídeo numa fratura discreta baseadas no modelo de solubilidade limitada na entrada da fratura. Esta condição de fronteira é tida como condição de contorno tipo *Robin*.

4.2 Equações de Diferenças Finitas

Os métodos de diferenças finitas consistem em substituir as derivadas parciais presentes na equação diferencial por *aproximações por diferenças finitas*. O resultado final desse processo é uma *equação algébrica*, denominada *equação de diferenças*

finitas (EDF) que tem em sua composição as expressões em estudo em função dos pontos da malha. A EDF é escrita para cada ponto da região discretizada em que se deseja calcular a solução do problema. Resolvendo-se a EDF, encontra-se a solução *aproximada* do problema. Esta solução não é exata, devido a erros:

- inerentes ao processo de discretização.
- de arredondamento nos cálculos feitos no computador.
- na aproximação numérica das condições auxiliares.

Todavia, quando a malha é refinada, a solução da EDP se aproxima da solução analítica do problema, embora um grande número de pontos possa acarretar um elevado custo computacional.

4.3 Discretização Temporal das Equações de Movimento de Radionuclídeos

Os métodos analisados neste trabalho foram:

- Método de Euler Explícito
- Método de Euler Implícito
- Método de Crank-Nicolson

Sendo que para o termo convectivo, $v \frac{\partial C_f(z,t)}{\partial z}$, foram utilizados as seguintes

discretizações:

- por diferenças atrasadas ($v > 0$ - upwind).
- por diferenças progressivas.
- por diferenças centrais.

Os termos difusivos, $\frac{\partial^2 C_f(z,t)}{\partial z^2}$ e $\frac{\partial^2 C_p(z,y,t)}{\partial y^2}$, foram discretizados por diferenças

centrais de segunda ordem.

Os termos temporais, $\frac{\partial C_f(z,t)}{\partial t}$ e $\frac{\partial C_p(z,y,t)}{\partial t}$, foram discretizados por diferenças progressivas de primeira ordem no Método de Euler Explícito e discretizados por diferenças atrasadas de primeira ordem no Método de Euler Implícito (lembrando que aqui o $t = t_{n+1}$). O Método de Crank-Nicolson é semi-implícito de segunda ordem.

A notação utilizada para a concentração na fratura será:

$$C_f(z,t) = C_{f_i}^n$$

e para a rocha matriz:

$$C_p(z,y,t) = C_{p_{i,j}}^n$$

onde o índice n se refere a discretização temporal e os subscritos i e j se referem aos pontos de malha espaciais nas direções z e y , respectivamente.

4.4 Discretizações Espaciais das Equações de Movimento de Radionuclídeos na Fratura e Rocha Matriz

Para as discretizações espaciais das três formulações em estudo na fratura, Euler Explícito, Euler Implícito e Crank-Nicolson foram generalizadas por uma expressão, sendo que para a discretização do termo convectivo por diferenças centrais, tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{C_{f,i}^{n+1} - C_{f,i}^n}{\Delta t} = & (1 - \Theta) \left[\frac{D_f}{R_f} \left(\frac{C_{f,i-1}^n - 2C_{f,i}^n + C_{f,i+1}^n}{\Delta z^2} \right) - \frac{v}{R_f} \left(\frac{C_{f,i+1}^n - C_{f,i-1}^n}{2\Delta z} \right) - \lambda C_{f,i}^n + \frac{1}{R_f b} q_i^n \right] + \\ & + \Theta \left[\frac{D_f}{R_f} \left(\frac{C_{f,i-1}^{n+1} - 2C_{f,i}^{n+1} + C_{f,i+1}^{n+1}}{\Delta z^2} \right) - \frac{v}{R_f} \left(\frac{C_{f,i+1}^{n+1} - C_{f,i-1}^{n+1}}{2\Delta z} \right) - \lambda C_{f,i}^{n+1} + \frac{1}{R_f b} q_i^{n+1} \right] \end{aligned} \quad (4.1)$$

em que Θ é uma constante real que varia entre 0 e 1. Para $\Theta = 0$ e $\Theta = 1$, obtém-se os métodos de Euler Explícito e Implícito, respectivamente, que são de $O(\Delta t)$. Para $\Theta = \frac{1}{2}$, obtém-se o método semi-implícito de Crank-Nicolson de ordem de $O(\Delta t)^2$.

Para a discretização do termo convectivo por diferenças atrasadas, tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{C_{f,i}^{n+1} - C_{f,i}^n}{\Delta t} = & (1 - \Theta) \left[\frac{D_f}{R_f} \left(\frac{C_{f,i-1}^n - 2C_{f,i}^n + C_{f,i+1}^n}{\Delta z^2} \right) - \frac{v}{R_f} \left(\frac{C_{f,i}^n - C_{f,i-1}^n}{\Delta z} \right) - \lambda C_{f,i}^n - \frac{1}{R_f b} q_i^n \right] + \\ & + \Theta \left[\frac{D_f}{R_f} \left(\frac{C_{f,i-1}^{n+1} - 2C_{f,i}^{n+1} + C_{f,i+1}^{n+1}}{\Delta z^2} \right) - \frac{v}{R_f} \left(\frac{C_{f,i}^{n+1} - C_{f,i-1}^{n+1}}{\Delta z} \right) - \lambda C_{f,i}^{n+1} - \frac{1}{R_f b} q_i^{n+1} \right] \end{aligned} \quad (4.2)$$

E para a discretização do termo convectivo por diferenças progressivas:

$$\begin{aligned} \frac{C_{f,i}^{n+1} - C_{f,i}^n}{\Delta t} = & (1 - \Theta) \left[\frac{D_f}{R_f} \left(\frac{C_{f,i-1}^n - 2C_{f,i}^n + C_{f,i+1}^n}{\Delta z^2} \right) - \frac{v}{R_f} \left(\frac{C_{f,i+1}^n - C_{f,i}^n}{\Delta z} \right) - \lambda C_{f,i}^n - \frac{1}{R_f b} q_i^n \right] + \\ & + \Theta \left[\frac{D_f}{R_f} \left(\frac{C_{f,i-1}^{n+1} - 2C_{f,i}^{n+1} + C_{f,i+1}^{n+1}}{\Delta z^2} \right) - \frac{v}{R_f} \left(\frac{C_{f,i+1}^{n+1} - C_{f,i}^{n+1}}{\Delta z} \right) - \lambda C_{f,i}^{n+1} - \frac{1}{R_f b} q_i^{n+1} \right] \end{aligned} \quad (4.3)$$

Lembrando que aqui também se realiza a aproximação:

$$q_i^{n+1} \approx q_i^n = \frac{-\theta D_p}{\Delta y} (C_{p,i,2}^n - C_{f,i}^n)$$

Para o poro a equação geral para se obter os três métodos é:

$$\begin{aligned} \frac{C_{p,i,j}^{n+1} - C_{p,i,j}^n}{\Delta t} = & (1 - \Theta) \left[\frac{D_p}{R_p} \left(\frac{C_{p,i,j-1}^n - 2C_{p,i,j}^n + C_{p,i,j+1}^n}{\Delta y^2} \right) - \lambda C_{p,i,j}^n \right] + \\ & + \Theta \left[\frac{D_p}{R_p} \left(\frac{C_{p,i,j-1}^{n+1} - 2C_{p,i,j}^{n+1} + C_{p,i,j+1}^{n+1}}{\Delta y^2} \right) - \lambda C_{p,i,j}^{n+1} \right] \end{aligned} \quad (4.4)$$

No Apêndice A encontram-se as discretizações mencionadas na seção 4.3 para cada equação em cada método na fratura e rocha matriz, separadamente.

4.5 Consistência, Estabilidade e Convergência

Aqui é feita uma análise que tem por objetivo determinar quando e sob que condições a solução das equações lineares formadas pelos Métodos de Euler (explícito e implícito) e Crank-Nicolson, são representativos da solução real das EDP de migração dos radionuclídeos.

Como será apresentado, vai depender da consistência das equações de diferenças finitas e da estabilidade a convergência do método numérico empregado. Estas três condições, segundo HIRSCH (1992), abrangem diferentes aspectos da relação entre as equações discretizadas, a solução numérica e a exata, a solução analítica e a da equação diferencial. Os resultados preliminares deste estudo podem ser encontrados em SILVEIRA et al. (2007a).

Na figura (4.1), estão representados, em resumo, que a condição de consistência define a relação entre a equação diferencial e sua formulação discretizada; que a condição de estabilidade estabelece uma relação entre a solução calculada e a solução exata da equação discretizada; enquanto a condição de convergência compara a solução calculada com a solução exata da equação diferencial.

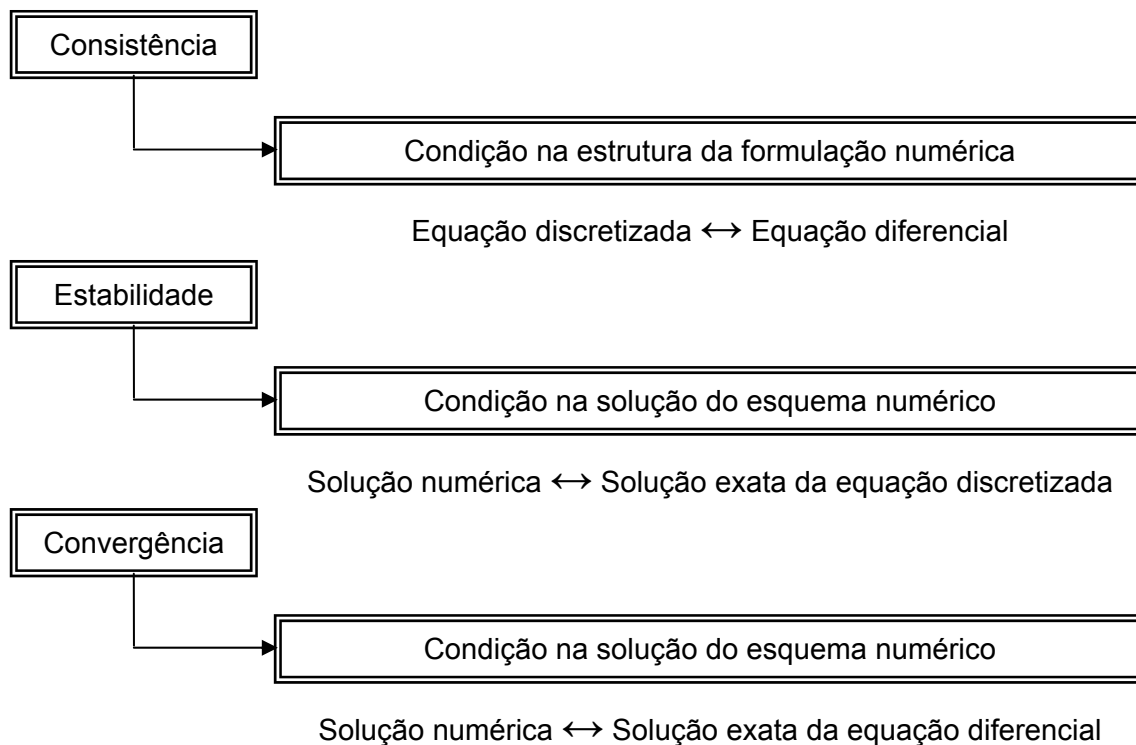


Fig. 4.1 - Relações entre consistência, estabilidade e convergência.

4.5.1 Consistência

Uma característica importante de uma dada aproximação de diferenças finitas é que ela seja consistente com a equação diferencial parcial que ela discretiza. Desprezando erros de arredondamento nos cálculos, quanto menor Δz melhor a aproximação para as derivadas da função. Isso equivale a afirmar que, quando $\Delta z \rightarrow 0$, o erro local de truncamento (ELT) tende a zero e recuperamos, a partir da expressão discretizada, a EDP original, HIRSCH (1992).

Para que as discretizações do problema em questão sejam consistentes com as equações diferenciais parciais, seus ELT devem tender a zero quando $\Delta z, \Delta y, \Delta t \rightarrow 0$. Para verificar a consistência de uma discretização, expandiram-se os termos da discretização em série de Taylor e faz-se $\Delta z, \Delta y, \Delta t \rightarrow 0$. Caso o ELT tenda a zero, a discretização é consistente com a EDP.

Para a discretização do termo convectivo por diferenças centrais, partindo da equação (4.1), onde pela substituição dos valores de Θ , obteremos discretizações explícitas, implícitas ou semi-implícitas, e reorganizando seus termos para a substituição das expansões em séries de Taylor nas equações, temos:

$$\begin{aligned}
\frac{C_{f,i}^{n+1} - C_{f,i}^n}{\Delta t} &= (1 - \Theta) \left(\frac{D_f}{R_f} \right) \left(\frac{C_{f,i-1}^n - 2C_{f,i}^n + C_{f,i+1}^n}{\Delta z^2} \right) - (1 - \Theta) \left(\frac{v}{R_f} \right) \left(\frac{C_{f,i+1}^n - C_{f,i-1}^n}{2\Delta z} \right) + \\
&- (1 - \Theta)(\lambda)C_{f,i}^n + \Theta \left(\frac{D_f}{R_f} \right) \left(\frac{C_{f,i-1}^{n+1} - 2C_{f,i}^{n+1} + C_{f,i+1}^{n+1}}{\Delta z^2} \right) + \\
&- \Theta \left(\frac{v}{R_f} \right) \left(\frac{C_{f,i+1}^{n+1} - C_{f,i-1}^{n+1}}{2\Delta z} \right) - \Theta(\lambda)C_{f,i}^{n+1} - \frac{q_i^n}{R_f b}
\end{aligned} \tag{4.5}$$

Para a discretização do termo convectivo por diferenças atrasadas, equação (4.2), tem-se:

$$\begin{aligned}
\frac{C_{f,i}^{n+1} - C_{f,i}^n}{\Delta t} &= (1 - \Theta) \left(\frac{D_f}{R_f} \right) \left(\frac{C_{f,i-1}^n - 2C_{f,i}^n + C_{f,i+1}^n}{\Delta z^2} \right) - (1 - \Theta) \left(\frac{v}{R_f} \right) \left(\frac{C_{f,i}^n - C_{f,i-1}^n}{\Delta z} \right) + \\
&- (1 - \Theta)(\lambda)C_{f,i}^n + \Theta \left(\frac{D_f}{R_f} \right) \left(\frac{C_{f,i-1}^{n+1} - 2C_{f,i}^{n+1} + C_{f,i+1}^{n+1}}{\Delta z^2} \right) + \\
&- \Theta \left(\frac{v}{R_f} \right) \left(\frac{C_{f,i}^{n+1} - C_{f,i-1}^{n+1}}{\Delta z} \right) - \Theta(\lambda)C_{f,i}^{n+1} - \frac{q_i^n}{R_f b}
\end{aligned} \tag{4.6}$$

E para a discretização do termo convectivo por diferenças progressivas, equação (4.3):

$$\begin{aligned}
\frac{C_{f,i}^{n+1} - C_{f,i}^n}{\Delta t} &= (1 - \Theta) \left(\frac{D_f}{R_f} \right) \left(\frac{C_{f,i-1}^n - 2C_{f,i}^n + C_{f,i+1}^n}{\Delta z^2} \right) - (1 - \Theta) \left(\frac{v}{R_f} \right) \left(\frac{C_{f,i+1}^n - C_{f,i}^n}{\Delta z} \right) + \\
&\quad - (1 - \Theta)(\lambda)C_{f,i}^n + \Theta \left(\frac{D_f}{R_f} \right) \left(\frac{C_{f,i-1}^{n+1} - 2C_{f,i}^{n+1} + C_{f,i+1}^{n+1}}{\Delta z^2} \right) + \tag{4.7} \\
&\quad - \Theta \left(\frac{v}{R_f} \right) \left(\frac{C_{f,i+1}^{n+1} - C_{f,i}^{n+1}}{\Delta z} \right) - \Theta(\lambda)C_{f,i}^{n+1} - \frac{q_i^n}{R_f b}
\end{aligned}$$

Para verificarmos se as equações anteriores são consistentes com a equação (3.1), expandimos os termos $C_{f,i}^{n+1}$, $C_{f,i+1}^n$, $C_{f,i-1}^n$, $C_{f,i+1}^{n+1}$ e $C_{f,i-1}^{n+1}$ em torno do ponto (z_i, t_n) :

$$C_{f,i}^{n+1} = C_{f,i}^n + \Delta t \frac{\partial C_f}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 C_f}{\partial t^2} + \frac{\Delta t^3}{6} \frac{\partial^3 C_f}{\partial t^3} + \dots$$

$$C_{f,i\pm 1}^n = C_{f,i}^n \pm \Delta z \frac{\partial C_f}{\partial z} + \frac{\Delta z^2}{2} \frac{\partial^2 C_f}{\partial z^2} \pm \frac{\Delta z^3}{6} \frac{\partial^3 C_f}{\partial z^3} + \dots$$

$$C_{f,i\pm 1}^{n+1} = C_{f,i}^n \pm \Delta z \frac{\partial C_f}{\partial z} + \Delta t \frac{\partial C_f}{\partial t} + \frac{1}{2} \left(\Delta z^2 \frac{\partial^2 C_f}{\partial z^2} \pm 2\Delta z \Delta t \frac{\partial^2 C_f}{\partial z \partial t} + \Delta t^2 \frac{\partial^2 C_f}{\partial t^2} \right) +$$

$$\frac{1}{6} \left(\pm \Delta z^3 \frac{\partial^3 C_f}{\partial z^3} + 3\Delta z^2 \Delta t \frac{\partial^3 C_f}{\partial z^2 \partial t} \pm 3\Delta z \Delta t^2 \frac{\partial^3 C_f}{\partial z \partial t^2} + \Delta t^3 \frac{\partial^3 C_f}{\partial t^3} \right) + \dots$$

e simplificando, tem-se:

$$\frac{C_{f,i}^{n+1} - C_{f,i}^n}{\Delta t} = \frac{\partial C_f}{\partial t} \Big|_i^n + \left[\frac{\Delta t}{2} \right] \frac{\partial^2 C_f}{\partial t^2} \Big|_i^n + \left[\frac{\Delta t^2}{6} \right] \frac{\partial^3 C_f}{\partial t^3} \Big|_i^n + \dots$$

$$\frac{C_{f,i-1}^n - 2C_{f,i}^n + C_{f,i+1}^n}{\Delta z^2} = \frac{\partial^2 C_f}{\partial z^2} \Big|_i^n + \dots$$

$$\frac{C_{f,i-1}^{n+1} - 2C_{f,i}^{n+1} + C_{f,i+1}^{n+1}}{\Delta z^2} = \frac{\partial^2 C_f}{\partial z^2} + \Delta t \frac{\partial^3 C_f}{\partial z^2 \partial t} + \dots$$

Para a discretização do termo convectivo por diferenças centrais:

$$\frac{C_{f,i+1}^n - C_{f,i-1}^n}{2\Delta z} = \frac{\partial C_f}{\partial z} \Big|_i^n + \left[\frac{\Delta z^2}{6} \right] \frac{\partial^3 C_f}{\partial z^3} \Big|_i^n + \dots$$

$$\frac{C_{f,i+1}^{n+1} - C_{f,i-1}^{n+1}}{2\Delta z} = \frac{\partial C_f}{\partial z} + \Delta t \frac{\partial^2 C_f}{\partial z \partial t} + \frac{\Delta z^2}{6} \frac{\partial^3 C_f}{\partial z^3} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^3 C_f}{\partial z \partial t^2} + \dots$$

Para a discretização do termo convectivo por diferenças atrasadas:

$$\frac{C_{f,i}^n - C_{f,i-1}^n}{\Delta z} = \frac{\partial C_f}{\partial z} \Big|_i^n - \left[\frac{\Delta z}{2} \right] \frac{\partial^2 C_f}{\partial z^2} \Big|_i^n + \left[\frac{\Delta z^2}{6} \right] \frac{\partial^3 C_f}{\partial z^3} \Big|_i^n + \dots$$

$$\begin{aligned} \frac{C_{f,i}^{n+1} - C_{f,i-1}^{n+1}}{\Delta z} &= \frac{\partial C_f}{\partial z} - \frac{\Delta z}{2} \frac{\partial^2 C_f}{\partial z^2} + \Delta t \frac{\partial^2 C_f}{\partial z \partial t} + \frac{\Delta z^2}{6} \frac{\partial^3 C_f}{\partial z^3} + \\ &\quad - \frac{\Delta z \Delta t}{2} \frac{\partial^3 C_f}{\partial z^2 \partial t} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^3 C_f}{\partial z \partial t^2} + \dots \end{aligned}$$

Para a discretização do termo convectivo por diferenças progressivas:

$$\frac{C_{f,i+1}^n - C_{f,i}^n}{\Delta z} = \frac{\partial C_f}{\partial z} \Big|_i^n + \left[\frac{\Delta z}{2} \right] \frac{\partial^2 C_f}{\partial z^2} \Big|_i^n + \left[\frac{\Delta z^2}{6} \right] \frac{\partial^3 C_f}{\partial z^3} \Big|_i^n + \dots$$

$$\begin{aligned} \frac{C_{f,i+1}^{n+1} - C_{f,i}^{n+1}}{\Delta z} &= \frac{\partial C_f}{\partial z} + \frac{\Delta z}{2} \frac{\partial^2 C_f}{\partial z^2} + \Delta t \frac{\partial^2 C_f}{\partial z \partial t} + \frac{\Delta z^2}{6} \frac{\partial^3 C_f}{\partial z^3} + \\ &\quad + \frac{\Delta z \Delta t}{2} \frac{\partial^3 C_f}{\partial z^2 \partial t} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^3 C_f}{\partial z \partial t^2} + \dots \end{aligned}$$

Fazendo as substituições anteriores na equação (4.5), obtém-se para discretização do termo convectivo por diferenças centradas:

$$\begin{aligned}
& \underbrace{\left. \frac{\partial C_f}{\partial t} \right|_i^n - \frac{D_f}{R_f} \frac{\partial^2 C_f}{\partial z^2} \Big|_i^n + \frac{v}{R_f} \frac{\partial C_f}{\partial z} \Big|_i^n + \lambda C_f \Big|_i^n + \frac{1}{R_f b} q \Big|_i^n}_{EDP} = \\
& \quad \left[-\Theta \lambda \Delta t \right] \frac{\partial C_f}{\partial t} \Big|_i^n + \left[-\frac{\Delta t}{2} - \Theta \frac{\lambda \Delta t^2}{2} \right] \frac{\partial^2 C_f}{\partial t^2} \Big|_i^n + \left[-\frac{\Delta t^2}{6} - \Theta \frac{\lambda \Delta t^3}{6} \right] \frac{\partial^3 C_f}{\partial t^3} \Big|_i^n + \\
& \quad + \left[-\Theta \frac{v}{R_f} \Delta t \right] \frac{\partial^2 C_f}{\partial z \partial t} \Big|_i^n + \left[\Theta \Delta t \frac{D_f}{R_f} \right] \frac{\partial^3 C_f}{\partial z^2 \partial t} \Big|_i^n + \left[-\Theta \frac{v}{R_f} \frac{\Delta t^2}{2} \right] \frac{\partial^3 C_f}{\partial z \partial t^2} \Big|_i^n + \\
& \quad + \underbrace{\left[-\frac{v}{R_f} \frac{\Delta z^2}{6} \right] \frac{\partial^3 C_f}{\partial z^3} \Big|_i^n + O[(\Delta z)^3, (\Delta z)^2 \Delta t, \Delta z (\Delta t)^2, (\Delta t)^3]}_{\text{Erro local de truncamento}}
\end{aligned} \tag{4.8}$$

Realizando as expansões em série de Taylor e substituindo na equação (4.6), tem-se para discretização do termo convectivo por diferenças atrasadas:

$$\begin{aligned}
& \underbrace{\left. \frac{\partial C_f}{\partial t} \right|_i^n - \frac{D_f}{R_f} \frac{\partial^2 C_f}{\partial z^2} \Big|_i^n + \frac{v}{R_f} \frac{\partial C_f}{\partial z} \Big|_i^n + \lambda C_f \Big|_i^n + \frac{1}{R_f b} q \Big|_i^n}_{EDP} = \\
& \quad + \left[-\Theta \lambda \Delta t \right] \frac{\partial C_f}{\partial t} \Big|_i^n + \left[-\Theta \lambda \frac{\Delta t^2}{2} - \frac{\Delta t}{2} \right] \frac{\partial^2 C_f}{\partial t^2} \Big|_i^n + \left[-\frac{\Delta t^2}{6} - \Theta \lambda \frac{\Delta t^3}{6} \right] \frac{\partial^3 C_f}{\partial t^3} \Big|_i^n + \\
& \quad + \left[-\Theta \Delta t \frac{v}{R_f} \right] \frac{\partial^2 C_f}{\partial z \partial t} \Big|_i^n + \left[\Theta \frac{v}{R_f} \frac{\Delta z \Delta t}{2} + \Theta \Delta t \frac{D_f}{R_f} \right] \frac{\partial^3 C_f}{\partial z^2 \partial t} \Big|_i^n + \left[-\Theta \frac{v}{R_f} \frac{\Delta t^2}{2} \right] \frac{\partial^3 C_f}{\partial z \partial t^2} \Big|_i^n + \\
& \quad + \underbrace{\left[\frac{v}{R_f} \frac{\Delta z}{2} \right] \frac{\partial^2 C_f}{\partial z^2} \Big|_i^n + \left[-\frac{v}{R_f} \frac{\Delta z^2}{6} \right] \frac{\partial^3 C_f}{\partial z^3} \Big|_i^n + O[(\Delta z)^3, (\Delta z)^2 \Delta t, \Delta z (\Delta t)^2, (\Delta t)^3]}_{\text{Erro local de truncamento}}
\end{aligned} \tag{4.8}$$

Fazendo as substituições anteriores na equação (4.7), obtém-se para discretização do termo convectivo por diferenças progressivas:

$$\begin{aligned}
& \underbrace{\frac{\partial C_f}{\partial t} \Big|_i^n - \frac{D_f}{R_f} \frac{\partial^2 C_f}{\partial z^2} \Big|_i^n + \frac{v}{R_f} \frac{\partial C_f}{\partial z} \Big|_i^n + \lambda C_f \Big|_i^n + \frac{1}{R_f b} q \Big|_i^n}_{EDP} = \\
& + \left[-\Theta \lambda \Delta t \right] \frac{\partial C_f}{\partial t} \Big|_i^n + \left[-\frac{\Delta t}{2} - \Theta \frac{\lambda \Delta t^2}{2} \right] \frac{\partial^2 C_f}{\partial t^2} \Big|_i^n + \left[-\frac{\Delta t^2}{6} - \Theta \frac{\lambda \Delta t^3}{6} \right] \frac{\partial^3 C_f}{\partial t^3} \Big|_i^n + \\
& + \left[-\Theta \Delta t \frac{v}{R_f} \right] \frac{\partial^2 C_f}{\partial z \partial t} \Big|_i^n + \left[\Theta \Delta t \frac{D_f}{R_f} - \Theta \frac{v}{R_f} \frac{\Delta z \Delta t}{2} \right] \frac{\partial^3 C_f}{\partial z^2 \partial t} \Big|_i^n + \left[-\Theta \frac{v}{R_f} \frac{\Delta t^2}{2} \right] \frac{\partial^3 C_f}{\partial z \partial t^2} \Big|_i^n + \\
& + \underbrace{\left[-\frac{v}{R_f} \frac{\Delta z}{2} \right] \frac{\partial^2 C_f}{\partial z^2} \Big|_i^n + \left[-\frac{v}{R_f} \frac{\Delta z^2}{6} \right] \frac{\partial^3 C_f}{\partial z^3} \Big|_i^n}_{\text{Erro local de truncamento}} + O\left[(\Delta z)^3, (\Delta z)^2 \Delta t, \Delta z (\Delta t)^2, (\Delta t)^3\right]
\end{aligned} \tag{4.10}$$

Assim, quando $\Delta z, \Delta t \rightarrow 0$ os erros locais de truncamento presentes nas equações (4.8), (4.9) e (4.10) tendem a zero e este fato nos mostra que, independente dos valores de Θ , as equações são consistentes.

Para o poro, equação (4.4), tem-se:

$$\begin{aligned}
\frac{C_{p,i,j}^{n+1} - C_{p,i,j}^n}{\Delta t} &= (1 - \Theta) \left(\frac{D_p}{R_p} \right) \left(\frac{C_{p,i,j-1}^n - 2C_{p,i,j}^n + C_{p,i,j+1}^n}{\Delta y^2} \right) - (1 - \Theta) (\lambda) C_{p,i,j}^n + \\
& + \Theta \left(\frac{D_p}{R_p} \right) \left(\frac{C_{p,i,j-1}^{n+1} - 2C_{p,i,j}^{n+1} + C_{p,i,j+1}^{n+1}}{\Delta y^2} \right) - \Theta (\lambda) C_{p,i,j}^{n+1}
\end{aligned} \tag{4.11}$$

Para verificarmos se a equação discretizada para o poro é consistente com a equação (3.2), expandimos em série de Taylor os termos $C_{p,i,j}^{n+1}$, $C_{p,i,j+1}^n$, $C_{p,i,j-1}^n$, $C_{p,i,j+1}^{n+1}$ e $C_{p,i,j-1}^{n+1}$ em torno do ponto (z_i, y_j, t_n) :

$$C_{p,i,j}^{n+1} = C_{p,i,j}^n + \Delta t \frac{\partial C_p}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 C_p}{\partial t^2} + \frac{\Delta t^3}{6} \frac{\partial^3 C_p}{\partial t^3} + \dots$$

$$C_{p,i,j\pm 1}^n = C_{p,i,j}^n \pm \Delta y \frac{\partial C_p}{\partial y} + \frac{\Delta y^2}{2} \frac{\partial^2 C_p}{\partial y^2} \pm \frac{\Delta y^3}{6} \frac{\partial^3 C_p}{\partial y^3} + \dots$$

$$C_{p,i,j\pm 1}^{n+1} = C_{p,i,j}^n \pm \Delta y \frac{\partial C_p}{\partial y} + \Delta t \frac{\partial C_p}{\partial t} + \frac{1}{2} \left(\Delta y^2 \frac{\partial^2 C_p}{\partial y^2} \pm 2\Delta y \Delta t \frac{\partial^2 C_p}{\partial y \partial t} + \Delta t^2 \frac{\partial^2 C_p}{\partial t^2} \right) +$$

$$\frac{1}{6} \left(\pm \Delta y^3 \frac{\partial^3 C_p}{\partial y^3} + 3\Delta y^2 \Delta t \frac{\partial^3 C_p}{\partial y^2 \partial t} \pm 3\Delta y \Delta t^2 \frac{\partial^3 C_p}{\partial y \partial t^2} + \Delta t^3 \frac{\partial^3 C_p}{\partial t^3} \right) + \dots$$

e para simplificar as substituições, tem-se:

$$\frac{C_{p,i,j}^{n+1} - C_{p,i,j}^n}{\Delta t} = \left. \frac{\partial C_p}{\partial t} \right|_{i,j}^n + \left[\frac{\Delta t}{2} \right] \left. \frac{\partial^2 C_p}{\partial t^2} \right|_{i,j}^n + \left[\frac{\Delta t^2}{6} \right] \left. \frac{\partial^3 C_p}{\partial t^3} \right|_{i,j}^n + \dots$$

$$\frac{C_{p,i,j-1}^n - 2C_{p,i,j}^n + C_{p,i,j+1}^n}{\Delta y^2} = \left. \frac{\partial^2 C_p}{\partial y^2} \right|_{i,j}^n + \dots$$

$$\frac{C_{p,i,j}^{n+1} - C_{p,i,j}^n}{\Delta t} = \frac{\partial C_p}{\partial t} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 C_p}{\partial t^2} + \frac{\Delta t^2}{6} \frac{\partial^3 C_p}{\partial t^3} + \dots$$

$$\frac{C_{p,i,j-1}^{n+1} - 2C_{p,i,j}^{n+1} + C_{p,i,j+1}^{n+1}}{\Delta y^2} = \frac{\partial^2 C_p}{\partial y^2} + \Delta t \frac{\partial^3 C_p}{\partial y^2 \partial t} + \dots$$

Realizando estas substituições na equação (4.11), obtém-se para o poro:

$$\begin{aligned}
& \underbrace{\left. \frac{\partial C_p}{\partial t} \right|_{i,j}^n - \frac{D_p}{R_p} \frac{\partial^2 C_p}{\partial y^2} \right|_{i,j}^n + \lambda C_p \Big|_{i,j}^n}_{EDP} = \\
& + \left[-\Theta \lambda \Delta t \right] \frac{\partial C_p}{\partial t} \Big|_{i,j}^n + \left[-\frac{\Delta t}{2} - \Theta \lambda \frac{\Delta t^2}{2} \right] \frac{\partial^2 C_p}{\partial t^2} \Big|_{i,j}^n + \left[-\frac{\Delta t^2}{6} - \Theta \lambda \frac{\Delta t^3}{6} \right] \frac{\partial^3 C_p}{\partial t^3} \Big|_{i,j}^n + \\
& + \underbrace{\left[\Theta \Delta t \frac{D_p}{R_p} \right] \frac{\partial^3 C_p}{\partial y^2 \partial t} \Big|_{i,j}^n + O\left[(\Delta t)^3, \Delta t (\Delta y)^2, (\Delta y)^3 \right]}_{\text{Erro local de truncamento}}
\end{aligned} \tag{4.12}$$

Como pode-se observar, quando $\Delta z, \Delta y, \Delta t \rightarrow 0$ erro local de truncamento presente na equação (4.12) tende a zero e nos mostra também que, independentemente dos valores de Θ , a equação do poro é consistente com a equação original.

4.5.2 Estabilidade

O conceito de estabilidade de um método numérico está relacionado com os erros ou perturbações que são inseridos nos cálculos e comprometem a solução. Nos esquemas que tratam de problemas evolutivos, a estabilidade condicional proporciona uma solução numérica limitada. Os erros mais comuns introduzidos na solução são provenientes de condições de fronteira ou iniciais aproximadas de forma incorreta, e também, devido ao acúmulo de erros de arredondamento cometidos pelo computador durante os cálculos.

Em relação à estabilidade dos métodos numéricos, segundo FORTUNA (2000), eles podem ser classificados em:

Condicionalmente estáveis: para fornecerem soluções numéricas estáveis, devem satisfazer uma condição de estabilidade. Métodos explícitos, em geral, são desse tipo.

Incondicionalmente estáveis: não necessitam satisfazer quaisquer critérios de estabilidade para produzirem soluções estáveis. Em geral, métodos implícitos

(incluindo os métodos semi-implícitos) e alguns métodos explícitos muito particulares pertencem a essa categoria.

Instáveis: não existem valores de Δt que permitem a eles fornecerem soluções estáveis. Em princípio, não devem ser utilizados.

Neste trabalho será utilizada uma das técnicas mais empregadas no estudo da estabilidade de equações de diferenças finitas, conhecida como *análise de estabilidade de von Neumann*, que foi desenvolvido em Los Alamos durante a Segunda Guerra por von Neumann, HIRSCH (1992). Este método é obtido a partir da expansão em série de Fourier das soluções, neste caso, de $C_{f,i}^n$ para a fratura e, $C_{p,i,j}^n$ para o poro:

$$C_{f,i}^n = \Phi^n e^{iQz_i} \quad \text{e} \quad C_{p,i,j}^n = \Phi^n e^{iQz_i} e^{iRy_j}$$

onde $i = \sqrt{-1}$ e, Φ^n é a sua amplitude no instante n , Q e R são os números de onda na direção z e y , FORTUNA (2000).

Para os demais termos, tem-se:

$$C_{f,i}^{n+1} = \Phi^{n+1} e^{iQz_i} \quad \text{e} \quad C_{p,i,j}^{n+1} = \Phi^{n+1} e^{iQz_i} e^{iRy_j}$$

$$C_{f,i\pm 1}^n = \Phi^n e^{iQz_i} e^{\pm iQ\Delta z_i} \quad \text{e} \quad C_{p,i,j\pm 1}^n = \Phi^n e^{iQz_i} e^{iRy_j} e^{\pm iR\Delta y_j}$$

$$C_{f,i\pm 1}^{n+1} = \Phi^{n+1} e^{iQz_i} e^{\pm iQ\Delta z_i} \quad \text{e} \quad C_{p,i,j\pm 1}^{n+1} = \Phi^{n+1} e^{iQz_i} e^{iRy_j} e^{\pm iR\Delta y_j}$$

Partindo da equação no poro, equação (4.11), tem-se:

$$C_{p,i,j}^{n+1} = C_{p,i,j}^n + (1 - \Theta) \left[\frac{D_p \Delta t}{R_p (\Delta y)^2} \right] (C_{p,i,j-1}^n - 2C_{p,i,j}^n + C_{p,i,j+1}^n) + (1 - \Theta)(-\lambda \Delta t) C_{p,i,j}^n + \\ + \Theta \left[\frac{D_p \Delta t}{R_p (\Delta y)^2} \right] (C_{p,i,j-1}^{n+1} - 2C_{p,i,j}^{n+1} + C_{p,i,j+1}^{n+1}) + \Theta(-\lambda \Delta t) C_{p,i,j}^{n+1}$$

Substituindo pelas expressões anteriores:

$$\begin{aligned}
\Phi^{n+1} e^{iQz_i} e^{iRy_j} &= \Phi^n e^{iQz_i} e^{iRy_j} + \\
&+ (1 - \Theta) \left[\frac{D_p \Delta t}{R_p (\Delta y)^2} \right] \left(\Phi^n e^{iQz_i} e^{iRy_j} e^{-iR\Delta y_j} - 2\Phi^n e^{iQz_i} e^{iRy_j} + \Phi^n e^{iQz_i} e^{iRy_j} e^{iR\Delta y_j} \right) + \\
&+ (1 - \Theta)(-\lambda\Delta t) \Phi^n e^{iQz_i} e^{iRy_j} + \\
&+ \Theta \left[\frac{D_p \Delta t}{R_p (\Delta y)^2} \right] \left(\Phi^{n+1} e^{iQz_i} e^{iRy_j} e^{-iR\Delta y_j} - 2\Phi^{n+1} e^{iQz_i} e^{iRy_j} + \Phi^{n+1} e^{iQz_i} e^{iRy_j} e^{iR\Delta y_j} \right) + \\
&+ \Theta(-\lambda\Delta t) \Phi^{n+1} e^{iQz_i} e^{iRy_j}
\end{aligned}$$

Dividindo os dois lados da equação pelos fatores comuns e^{iQz_i} e e^{iRy_j} e agrupando os termos, obtém-se:

$$\begin{aligned}
\Phi^{n+1} \left\{ 1 - \Theta \left[\frac{D_p \Delta t}{R_p (\Delta y)^2} \right] \left(e^{-iR\Delta y_j} - 2 + e^{iR\Delta y_j} \right) + \Theta \lambda \Delta t \right\} = \\
\Phi^n \left\{ 1 + (1 - \Theta) \left[\frac{D_p \Delta t}{R_p (\Delta y)^2} \right] \left(e^{-iR\Delta y_j} - 2 + e^{iR\Delta y_j} \right) + (1 - \Theta)(-\lambda\Delta t) \right\}
\end{aligned}$$

Os termos com exponenciais complexas podem ser simplificados pela identidade:

$$e^{-iR \Delta y_j} + e^{iR \Delta y_j} = 2 \cos (R \Delta y_j)$$

Substituindo na expressão anterior e fatorando os termos comuns:

$$\frac{\Phi^{n+1}}{\Phi^n} = \frac{\left\{ 1 - (1 - \Theta) \left[2 \frac{D_p \Delta t}{R_p (\Delta y)^2} \right] (1 - \cos(R\Delta y_j)) + (1 - \Theta)(-\lambda\Delta t) \right\}}{\left\{ 1 + \Theta \left[2 \frac{D_p \Delta t}{R_p (\Delta y)^2} \right] (1 - \cos(R\Delta y_j)) + \Theta \lambda \Delta t \right\}}$$

Onde $\frac{\Phi^{n+1}}{\Phi^n}$ é conhecido como fator de amplificação. Observe que depende dos

parâmetros discretizados do sistema. A condição a ser satisfeita é:

$$\left| \frac{\Phi^{n+1}}{\Phi^n} \right| \leq 1$$

Sendo a condição a ser respeitada:

$$\frac{D_p \Delta t}{R_p (\Delta y)^2} (1 - 2\Theta) + \frac{\lambda \Delta t}{4} (1 - 2\Theta) \leq \frac{1}{2}$$

Fazendo as substituições dos valores de Θ , tem-se:

Tabela 4.1
Condições de estabilidade dos métodos numéricos para equação do poro

Esquema	Condição de Estabilidade
Euler Explícito ($\Theta = 0$)	$\left\{ \frac{D_p \Delta t}{R_p (\Delta y)^2} + \frac{\lambda \Delta t}{4} \leq \frac{1}{2} \right.$
Euler Implícito ($\Theta = 1$)	Incondicionalmente Estável
Crank-Nicolson ($\Theta = 1/2$)	Incondicionalmente Estável

Para a fratura foi desenvolvida uma equação geral, por causa dos diferentes modos de discretizar o termo convectivo e desprezou-se o termo do fluxo difusivo q_i^n - pois seria introduzido e^{iRy_j} tornando difícil a substituição por uma forma trigonométrica - tem-se:

$$C_{f,i-1}^{n+1}(a) + C_{f,i}^{n+1}(b) + C_{f,i+1}^{n+1}(c) = C_{f,i-1}^n(d) + C_{f,i}^n(e) + C_{f,i+1}^n(f)$$

onde os coeficientes (a) , (b) , (c) , (d) , (e) e (f) são dados na tabela (4.2).

Substituindo pelas expressões anteriores:

$$\Phi^{n+1} e^{iQz_i} e^{-iQ\Delta z} (a) + \Phi^{n+1} e^{iQz_i} (b) + \Phi^{n+1} e^{iQz_i} e^{iQ\Delta z} (c) = \Phi^n e^{iQz_i} e^{-iQ\Delta z} (d) + \Phi^n e^{iQz_i} (e) + \\ + \Phi^n e^{iQz_i} e^{iQ\Delta z} (f)$$

Dividindo os dois lados da equação pelo fator comum e^{iQz_i} obtém-se:

$$\Phi^{n+1} (ae^{-iQ\Delta z} + b + ce^{iQ\Delta z}) = \Phi^n (de^{-iQ\Delta z} + e + fe^{iQ\Delta z})$$

e, agrupando os termos:

$$\frac{\Phi^{n+1}}{\Phi^n} = \frac{de^{-iQ\Delta z} + e + fe^{iQ\Delta z}}{ae^{-iQ\Delta z} + b + ce^{iQ\Delta z}}$$

Os termos com exponenciais complexas podem ser substituídos, ficando:

$$\frac{\Phi^{n+1}}{\Phi^n} = \frac{d[\cos(Q\Delta z) - i\text{sen}(Q\Delta z)] + e + f[\cos(Q\Delta z) + i\text{sen}(Q\Delta z)]}{a[\cos(Q\Delta z) - i\text{sen}(Q\Delta z)] + b + c[\cos(Q\Delta z) + i\text{sen}(Q\Delta z)]}$$

reagrupando:

$$\frac{\Phi^{n+1}}{\Phi^n} = \frac{e + (d + f)\cos(Q\Delta z) + i[(f - d)\text{sen}(Q\Delta z)]}{b + (a + c)\cos(Q\Delta z) + i[(c - a)\text{sen}(Q\Delta z)]}$$

A condição a ser respeitada é:

$$\left| \frac{\Phi^{n+1}}{\Phi^n} \right| = \frac{[e + (d + f)\cos(Q\Delta z)]^2 + [(f - d)\text{sen}(Q\Delta z)]^2}{[b + (a + c)\cos(Q\Delta z)]^2 + [(c - a)\text{sen}(Q\Delta z)]^2} \leq 1$$

Tabela 4.2
Parâmetros para a equação do fator de amplificação

Termos	Diferenças Progressivas	Diferenças Centradas	Diferenças Atrasadas
<i>a</i>	$-\Theta \frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2}$	$-\Theta \frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} - \Theta \frac{v \Delta t}{R_f 2 \Delta z^2}$	$-\Theta \frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} - \Theta \frac{v \Delta t}{R_f \Delta z^2}$
<i>b</i>	$1 + 2\Theta \frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} - \Theta \frac{v \Delta t}{R_f \Delta z} + \Theta \lambda \Delta t$	$1 + 2\Theta \frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} + \Theta \lambda \Delta t$	$1 + 2\Theta \frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} - \Theta \frac{v \Delta t}{R_f \Delta z} + \Theta \lambda \Delta t$
<i>c</i>	$\Theta \frac{v \Delta t}{R_f \Delta z} - \Theta \frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2}$	$\Theta \frac{v \Delta t}{R_f 2 \Delta z} - \Theta \frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2}$	$-\Theta \frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2}$
<i>d</i>	$(1 - \Theta) \frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2}$	$(1 - \Theta) \frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} + (1 - \Theta) \frac{v \Delta t}{R_f 2 \Delta z^2}$	$(1 - \Theta) \frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} + (1 - \Theta) \frac{v \Delta t}{R_f \Delta z^2}$
<i>e</i>	$1 - 2(1 - \Theta) \frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} + (1 - \Theta) \frac{v \Delta t}{R_f \Delta z} - (1 - \Theta) \lambda \Delta t$	$1 - 2(1 - \Theta) \frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} - (1 - \Theta) \lambda \Delta t$	$1 - 2(1 - \Theta) \frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} - (1 - \Theta) \frac{v \Delta t}{R_f \Delta z} - (1 - \Theta) \lambda \Delta t$
<i>f</i>	$(1 - \Theta) \frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} - (1 - \Theta) \frac{v \Delta t}{R_f \Delta z}$	$(1 - \Theta) \frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} - (1 - \Theta) \frac{v \Delta t}{R_f 2 \Delta z}$	$(1 - \Theta) \frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2}$

Efetuada as substituições listadas na tabela (4.2) e, em função dos valores máximos e mínimos de $\cos(Q\Delta z)$ e $\sin(Q\Delta z)$, encontram-se as seguintes condições a serem respeitadas:

- **Diferenças Progressivas:**

$$2 \frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} - \frac{v \Delta t}{R_f \Delta z} + \frac{\lambda \Delta t}{2} \geq 0$$

$$\left(2 \frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} - \frac{v \Delta t}{R_f \Delta z} + \frac{\lambda \Delta t}{2} \right) (1 - 2\Theta) \leq 1$$

$$\left[1 - \frac{\lambda \Delta t}{2} (1 - 2\Theta) \right] \left[-2 \frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} + \frac{v \Delta t}{R_f \Delta z} - \lambda \Delta t \right] + \left(\frac{v \Delta t}{R_f \Delta z} \right)^2 (1 - 2\Theta) \leq 0$$

- **Diferenças Centradas:**

$$\left(\frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} + \frac{\lambda \Delta t}{4} \right) (1 - 2\Theta) \leq \frac{1}{2}$$

$$\left[1 - \frac{\lambda \Delta t}{2} (1 - 2\Theta) \right] \left[-2 \frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} - \lambda \Delta t \right] + \left(\frac{v \Delta t}{R_f \Delta z} \right)^2 (1 - 2\Theta) \leq 0$$

- **Diferenças Atrasadas:**

$$\left(2 \frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} + \frac{v \Delta t}{R_f \Delta z} + \frac{\lambda \Delta t}{2} \right) (1 - 2\Theta) \leq 1$$

$$\left[1 - \frac{\lambda \Delta t}{2} (1 - 2\Theta) \right] \left[-2 \frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} - \frac{v \Delta t}{R_f \Delta z} - \lambda \Delta t \right] + \left(\frac{v \Delta t}{R_f \Delta z} \right)^2 (1 - 2\Theta) \leq 0$$

Efetuada a substituição dos valores de Θ em busca dos métodos em estudo, montaram-se as tabelas (4.3), (4.4) e (4.5) das condições de estabilidade, listadas logo abaixo.

Tabela 4.3

Condições de estabilidade dos métodos numéricos sendo o termo convectivo discretizado por diferenças atrasadas

Esquema	Condição de Estabilidade
Euler Explícito ($\Theta = 0$)	$\left\{ \begin{array}{l} \frac{D_f \Delta t}{R_f (\Delta z)^2} + \frac{v \Delta t}{2 R_f \Delta z} + \frac{\lambda \Delta t}{4} \leq \frac{1}{2} \\ \left(\frac{v \Delta t}{R_f \Delta z} \right)^2 - \left[1 - \left(\frac{\lambda \Delta t}{2} \right)^2 \right] \leq 0 \end{array} \right.$
Euler Implícito ($\Theta = 1$)	Incondicionalmente Estável
Crank-Nicolson ($\Theta = 1/2$)	Incondicionalmente Estável

Tabela 4.4

Condições de estabilidade dos métodos numéricos sendo o termo convectivo discretizado por diferenças centradas

Esquema	Condição de Estabilidade
Euler Explícito ($\Theta = 0$)	$\left\{ \begin{array}{l} \frac{D_f \Delta t}{R_f (\Delta z)^2} + \frac{\lambda \Delta t}{4} \leq \frac{1}{2} \\ \left(\frac{v \Delta t}{R_f \Delta z} \right)^2 - \left[1 - \left(\frac{\lambda \Delta t}{2} \right)^2 \right] \leq 0 \end{array} \right.$
Euler Implícito ($\Theta = 1$)	Incondicionalmente Estável
Crank-Nicolson ($\Theta = 1/2$)	Incondicionalmente Estável

Tabela 4.5

Condições de estabilidade dos métodos numéricos sendo o termo convectivo discretizado por diferenças progressivas

Esquema	Condição de Estabilidade
Euler Explícito ($\Theta = 0$)	$\left\{ \begin{array}{l} 0 \leq \frac{2D_f \Delta t}{R_f (\Delta z)^2} - \frac{v \Delta t}{R_f \Delta z} + \frac{\lambda \Delta t}{2} \leq 1 \\ \left(1 - \frac{\lambda \Delta t}{2} \right) \left(-\frac{2D_f \Delta t}{R_f (\Delta z)^2} + \frac{v \Delta t}{R_f \Delta z} - \lambda \Delta t \right) + \left(\frac{v \Delta t}{R_f \Delta z} \right)^2 \leq 0 \end{array} \right.$
Euler Implícito ($\Theta = 1$)	$\left\{ \frac{2D_f \Delta t}{R_f (\Delta z)^2} - \frac{v \Delta t}{R_f \Delta z} + \frac{\lambda \Delta t}{2} \geq -1 \right.$
Crank-Nicolson ($\Theta = 1/2$)	$\left\{ \frac{2D_f \Delta t}{R_f (\Delta z)^2} - \frac{v \Delta t}{R_f \Delta z} + \frac{\lambda \Delta t}{2} \geq 0 \right.$

4.5.3 Convergência

A convergência é uma qualidade importante e difícil de ser demonstrada diretamente, e de acordo com FORTUNA (2000), em geral, utiliza-se uma técnica indireta para demonstrar a convergência de um método numérico, baseada no Teorema de Equivalência de Lax: *para a solução de um problema linear de valor inicial bem posto, por uma discretização consistente, a estabilidade do método numérico é condição necessária e suficiente para a convergência*. Sintetizando:

$$\text{Consistência} + \text{Estabilidade} \rightarrow \text{Convergência}$$

Desta forma, como foi visto, todas as discretizações são consistentes com as EDP e, para os métodos estáveis e para os que têm critérios de estabilidade, se obedecidos, todos os métodos numéricos serão convergentes.

CAPÍTULO 5

ILUSTRAÇÃO NUMÉRICA

5.1 Resolução das Equações

As equações resultantes do processo de discretização descritos na seção 4.4 podem ser sintetizadas, obtendo:

$$\begin{aligned} \frac{C_{f,i}^{n+1} - C_{f,i}^n}{\Delta t} = & (1 - \Theta) \left[\frac{D_f}{R_f} \left(\frac{C_{f,i-1}^n - 2C_{f,i}^n + C_{f,i+1}^n}{\Delta z^2} \right) - \frac{v}{R_f} \left(\frac{C_{f,i+r}^n - C_{f,i-s}^n}{(r+s)\Delta z} \right) - \lambda C_{f,i}^n - \frac{1}{R_f b} q_i^n \right] + \\ & + \Theta \left[\frac{D_f}{R_f} \left(\frac{C_{f,i-1}^{n+1} - 2C_{f,i}^{n+1} + C_{f,i+1}^{n+1}}{\Delta z^2} \right) - \frac{v}{R_f} \left(\frac{C_{f,i+r}^{n+1} - C_{f,i-s}^{n+1}}{(r+s)\Delta z} \right) - \lambda C_{f,i}^{n+1} - \frac{1}{R_f b} q_i^{n+1} \right] \end{aligned} \quad (5.1)$$

onde que para $r = s = 1$ o termo convectivo é discretizado por diferenças centradas, para $r = 0$ e $s = 1$ é por diferenças atrasadas (upwind) e para $r = 1$ e $s = 0$ corresponde ao diferenças avançadas, e onde pela substituição dos valores de Θ (0, 1, $\frac{1}{2}$), obtêm-se, respectivamente, discretizações explícitas, implícitas ou semi-implícitas (Crank-Nicolson). Realizando a aproximação, $q_i^{n+1} \approx q_i^n$, e organizando os termos, obtêm-se:

$$aC_{f,i-1}^{n+1} + bC_{f,i}^{n+1} + cC_{f,i+1}^{n+1} = dC_{f,i-1}^n + eC_{f,i}^n + fC_{f,i+1}^n + gq_i^n \quad (5.2)$$

onde os coeficientes são assim definidos:

$$a = -\Theta \left(\frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} + \frac{v \Delta t}{R_f \Delta z} \left(\frac{s}{r+s} \right) \right)$$

$$b = 1 - \Theta \left(-2 \frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} - \frac{v \Delta t}{R_f \Delta z} \left(\frac{r-s}{r+s} \right) - \lambda \Delta t \right)$$

$$c = -\Theta \left(\frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} - \frac{v \Delta t}{R_f \Delta z} \left(\frac{r}{r+s} \right) \right)$$

$$d = (1 - \Theta) \left(\frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} + \frac{v \Delta t}{R_f \Delta z} \left(\frac{s}{r+s} \right) \right)$$

$$e = 1 + (1 - \Theta) \left(-2 \frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} + \frac{v \Delta t}{R_f \Delta z} \left(\frac{r-s}{r+s} \right) - \lambda \Delta t \right)$$

$$f = (1 - \Theta) \left(\frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} - \frac{v \Delta t}{R_f \Delta z} \left(\frac{r}{r+s} \right) \right)$$

$$g = -\frac{\Delta t}{R_f b}$$

Para $i = 1, 2, \dots, I$, pode-se escrever o sistema linear na forma matricial:

$$\begin{bmatrix} b & c & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ a & b & c & & & & \vdots \\ 0 & a & b & c & & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & & & a & b & c \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & a & b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{f,1}^{n+1} \\ C_{f,2}^{n+1} \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ C_{f,I-1}^{n+1} \\ C_{f,I}^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e & f & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ d & e & f & & & & \vdots \\ 0 & d & e & f & & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & & & d & e & f \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & d & e \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{f,1}^n \\ C_{f,2}^n \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ C_{f,I-1}^n \\ C_{f,I}^n \end{bmatrix} + g \begin{bmatrix} q_1^n \\ q_2^n \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ q_{I-1}^n \\ q_I^n \end{bmatrix}$$

(5.3)

Já para a equação do poro tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{C_{p,i,j}^{n+1} - C_{p,i,j}^n}{\Delta t} = & (1 - \Theta) \left[\frac{D_p}{R_p} \left(\frac{C_{p,i,j-1}^n - 2C_{p,i,j}^n + C_{p,i,j+1}^n}{\Delta y^2} \right) - \lambda C_{p,i,j}^n \right] + \\ & + \Theta \left[\frac{D_p}{R_p} \left(\frac{C_{p,i,j-1}^{n+1} - 2C_{p,i,j}^{n+1} + C_{p,i,j+1}^{n+1}}{\Delta y^2} \right) - \lambda C_{p,i,j}^{n+1} \right] \end{aligned} \quad (5.4)$$

organizando os termos:

$$hC_{p,i,j-1}^{n+1} + kC_{p,i,j}^{n+1} + lC_{p,i,j+1}^{n+1} = mC_{p,i,j-1}^n + nC_{p,i,j}^n + oC_{p,i,j+1}^n \quad (5.5)$$

e seus coeficientes:

$$h = -\Theta \frac{D_p \Delta t}{R_p \Delta y^2}$$

$$k = 1 - \Theta \left(-2 \frac{D_p \Delta t}{R_p \Delta y^2} - \lambda \Delta t \right)$$

$$l = -\Theta \frac{D_p \Delta t}{R_p \Delta y^2}$$

$$m = (1 - \Theta) \frac{D_p \Delta t}{R_p \Delta y^2}$$

$$n = 1 + (1 - \Theta) \left(-2 \frac{D_p \Delta t}{R_p \Delta y^2} - \lambda \Delta t \right)$$

$$o = (1 - \Theta) \frac{D_p \Delta t}{R_p \Delta y^2}$$

Para $j = 1, 2, \dots, J$, escreve-se o sistema linear na forma matricial:

$$\begin{bmatrix} k & l & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ h & k & l & & & & \vdots \\ 0 & h & k & l & & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & & & h & k & l \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & h & k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{p,i,1}^{n+1} \\ C_{p,i,2}^{n+1} \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ C_{p,i,J-1}^{n+1} \\ C_{p,i,J}^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} n & o & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ m & n & o & & & & \vdots \\ 0 & m & n & o & & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & & & m & n & o \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & m & n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{p,i,1}^n \\ C_{p,i,2}^n \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ C_{p,i,J-1}^n \\ C_{p,i,J}^n \end{bmatrix} \quad (5.6)$$

Os sistemas de equações lineares em (5.3) e (5.6) são resolvidos diretamente em cada passo Δt no tempo, sendo:

- $\Theta = 0$, tem-se o método de Euler Explícito que fornece um conjunto independente de equações que podem ser facilmente calculadas, FORTUNA (2000).
- $\Theta = 1$ e $\Theta = 1/2$ têm-se, respectivamente, os métodos de Euler Implícito e de Crank-Nicolson, que dão origem a sistemas tridiagonais que, na sua solução utilizou-se o algoritmo de Thomas - decomposição LU e substituição progressiva e regressiva, PRESS et al. (1992).

5.2 Tratamento da Condição de Contorno

Para a condição de contorno será considerado o modo de faixa de liberação (band release mode), LI. (1993), onde se assume que todo o material do rejeito começa a se dissolver no $t = 0$. A dissolução se completa após o tempo de lixívia, $T(ano)$, (leach time).

Assim, a condição de contorno de solubilidade limitada na entrada da fratura, equação (3.4):

$$-D_f \frac{\partial C_f(z,t)}{\partial z} + vC_f(z,t) = k[C_0 - C_f(z,t)]$$

para $z = 0, t > 0$

pode ser reescrita em função do “leach time”:

$$-D_f \frac{\partial C_f}{\partial z} \Big|_{z=0} + v C_f(0,t) = k [C_0 - C_f(0,t)] [U(t) - U(t-T)] \quad (5.7)$$

para $t > 0$

onde $U(t)$ é a função degrau, assim definida:

$$U(t) \begin{cases} 1, & t > 0 \\ 0, & t \leq 0 \end{cases}$$

Para a representação por diferenças finitas da condição de contorno, a derivada espacial será discretizada por diferenças avançadas:

$$\frac{\partial C_f}{\partial z} \Big|_{z=0} \approx \left(\frac{C_f(\Delta z, t) - C_f(0, t)}{\Delta z} \right)$$

onde

$$C_f(0, t) \equiv C_{f,1}^n$$

$$C_f(\Delta z, t) \equiv C_{f,2}^n$$

rearranjando a equação para $C_{f,1}^n$, na equação (5.7) discretizada, tem-se:

$$C_{f,1}^n = \frac{D_f C_{f,2}^n + k \Delta z (U(t^n) - U(t^n - T))}{D_f + v \Delta z + k \Delta z (U(t^n) - U(t^n - T))}$$

para $z = 0, t^n > 0$

onde

t^n é o tempo no ponto de malha temporal n , ou seja, $t^n = n \Delta t$.

e $C_{f,2}^n$ será aproximado pelo seu valor disponível, isto é, $C_{f,2}^n \approx C_{f,2}^{n-1}$

5.3 Implementação

Para implementar os métodos em estudo foi criado um programa em linguagem Fortran 90 que gerou os dados para análise, sendo os dados de entrada listados na tabela (5.1) e o radionuclídeo analisado o ^{237}Np .

Tabela 5.1

Parâmetros físicos para a fratura e matriz rocha

Espécie			^{237}Np		
D_f	(m^2 / ano)	1,0	b	(m)	0,0005
D_p	(m^2 / ano)	0,01	θ	$(-)$	0,01
R_f	$(-)$	1,0	k	(m / ano)	0,1
R_p	$(-)$	1,0	$T_{1/2}$	(ano)	$2,14 \times 10^6$
v	(m / ano)	1,0	T	(ano)	30.000

5.4 Resultados Numéricos

Para fins de comparação, no trabalho de LI (1993), é dada uma tabela de valores da concentração normalizada em 100 anos para a fratura e rocha matriz a 1 metro do início da fratura. A partir da solução numérica que os autores descrevem, e com auxílio de um software computacional, foi possível obter as soluções de referência para comparação em 100 anos com erros relativos aceitáveis, como mostram as tabelas 5.2 e 5.3. Para tempos maiores, a solução é oscilatória e, deduz-se daí, que através deste software computacional não é possível conseguir soluções para tempos maiores via equação da inversão numérica da transformada de Laplace.

Tabela 5.2**Concentração normalizada na fratura**

Distância z (m)	Solução Analítica	Solução de Referência	Erro Relativo
1,000	7,26160E-02	7,26160E-02	0,000%
1,500	6,80490E-02	6,80490E-02	0,000%
2,250	6,14570E-02	6,14570E-02	0,000%
3,375	5,22190E-02	5,22210E-02	-0,004%
5,063	3,99850E-02	3,99930E-02	-0,020%
7,594	2,54900E-02	2,54900E-02	0,000%
11,391	1,16050E-02	1,16050E-02	0,000%
17,086	2,79600E-03	2,79600E-03	0,000%
25,629	1,96330E-04	1,96320E-04	0,005%
38,443	1,22040E-06	1,22030E-06	0,008%
57,665	6,17740E-11	6,17710E-11	0,005%
86,498	2,09090E-19	2,09130E-19	-0,019%

Tabela 5.3**Concentração normalizada na rocha matriz sendo $z = 1$ m**

Distância y (m)	Solução Analítica	Solução de Referência	Erro Relativo
0,00050	7,26160E-02	7,26160E-02	0,000%
0,00113	7,25850E-02	7,25850E-02	0,000%
0,00253	7,25170E-02	7,25170E-02	0,000%
0,00570	7,23650E-02	7,23650E-02	0,000%
0,01281	7,20210E-02	7,20210E-02	0,000%
0,02883	7,12490E-02	7,12490E-02	0,000%
0,06487	6,95210E-02	6,95210E-02	0,000%
0,14596	6,56800E-02	6,56800E-02	0,000%
0,32842	5,73220E-02	5,73220E-02	0,000%
0,73895	4,04110E-02	4,04110E-02	0,000%
1,66260	1,45500E-02	1,45500E-02	0,000%
3,74090	3,93620E-04	3,93610E-04	0,003%
8,41710	7,94830E-11	7,94830E-11	0,000%
12,62600	8,90370E-21	8,29780E-21	6,805%

Embora tenha sido encontrado um erro relativo de 6,805% na concentração normalizada na rocha matriz, este resultado não irá influenciar as análises comparativas, uma vez que essas análises se limitarão a uma concentração normalizada na ordem de 10^{-6} , como no trabalho de LI (1993).

5.4.1 Gráficos Comparativos das Discretizações

Primeiramente, vamos traçar gráficos comparativos para cada método em 100 anos, onde o objetivo é observar o comportamento das diferentes formas de discretizar o termo convectivo numa mesma malha, espacial e temporal, e comparar com a solução dada pelo software computacional. A escolha das malhas foi de acordo com os

critérios de estabilidade dos métodos e estão listados na tabela 5.4.

Tabela 5.4
Malhas utilizadas nos gráficos comparativos

Malhas espacial e temporal usadas		
Δz	(m)	1,0
Δy	(m)	0,1
Δt	(ano)	0,1

Nas figuras 5.1 e 5.2 estão os gráficos comparativos para o Método Euler Explícito, sendo o 5.1 para a concentração normalizada na fratura. Como se pode observar, a discretização progressiva no termo convectivo é a que alcança valores similares a solução dada pelo software computacional, sendo o erro relativo máximo de 6,00%. Para a discretização centrada no termo convectivo, o erro relativo aumenta monotonicamente, alcançando ao final da comparação, -483,48%. Na discretização atrasada no termo convectivo tem-se o mesmo comportamento, alcançando ao fim da comparação, o erro relativo de -1576,90%.

Na figura 5.2 tem-se a concentração normalizada na rocha matriz, sendo os valores de concentração extraídos a 1 metro e a 10 metros do início da fratura. Na comparação a 1 metro do início da fratura, os três tipos de discretização no termo convectivo têm comportamentos similares, sendo os maiores erros relativos, -12,66% na discretização progressiva, -22,49% na discretização centrada e -29,76% na discretização atrasada no termo convectivo. Na comparação a 10 metros, já temos um distanciamento nos valores, porém a discretização progressiva continua com os menores erros relativos, alcançando -13,01% nesta comparação, para a discretização centrada alcança o valor de -99,32% e para a discretização atrasada chega aos 190,44%.

Como nos Métodos de Euler Implícito e Crank-Nicolson obtiveram-se os mesmos comportamentos, para simplificar, os resultados foram apenas listados na tabela 5.5.

Na tabela 5.5 estão listados os maiores valores de erro relativos no Método de Euler Explícito em conjunto com os valores de Euler Implícito referentes às figuras 5.3 e 5.4 (fratura e rocha matriz, respectivamente), e as de Crank-Nicolson referentes às figuras 5.5 e 5.6 (fratura e rocha matriz, respectivamente).

Tabela 5.5

Erro relativo percentual dos métodos de Euler Explícito, Implícito e Crank-Nicolson com a solução de referência em 100 anos.

Erro Relativo Percentual				
Discretização Temporal	Discretização Espacial	Fratura	Poros $z = 1m$	Poros $z = 10m$
Euler Explícito	Atrasada	-1576,90%	-29,76%	-190,44%
	Centrada	-483,48%	-22,49%	-99,32%
	Progressiva	6,00%	-12,66%	-13,01%
Euler Implícito	Atrasada	-1406,20%	-35,76%	-187,76%
	Centrada	-412,61%	-28,17%	-97,05%
	Progressiva	14,54%	-17,91%	-11,35%
Crank Nicolson	Atrasada	-1488,92%	-32,75%	-189,06%
	Centrada	-446,71%	-25,33%	-98,16%
	Progressiva	9,91%	-15,28%	-12,16%

Nas figuras 5.7, 5.8 e 5.9 estão os mesmos dados só que separados de acordo com a discretização espacial. O objetivo destes gráficos é mostrar que todos os três métodos têm valores similares de concentração normalizada e que a discretização progressiva é a que mais se aproxima da solução dada pelo software computacional.

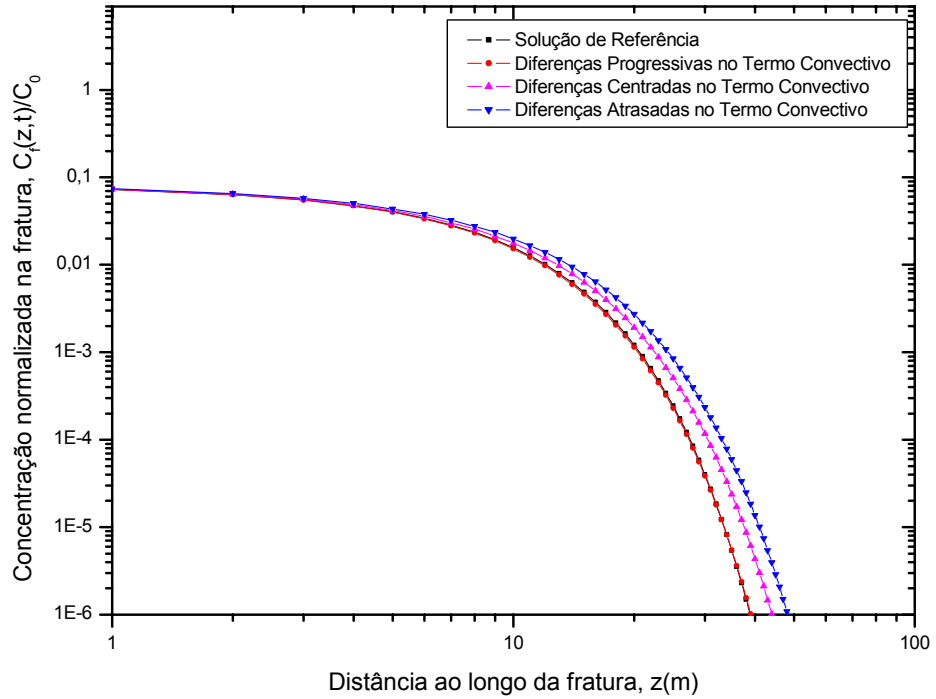


Fig.5.1 – Método de Euler Explícito – comparação da concentração normalizada na fratura nas discretizações do termo convectivo e a solução de referência.

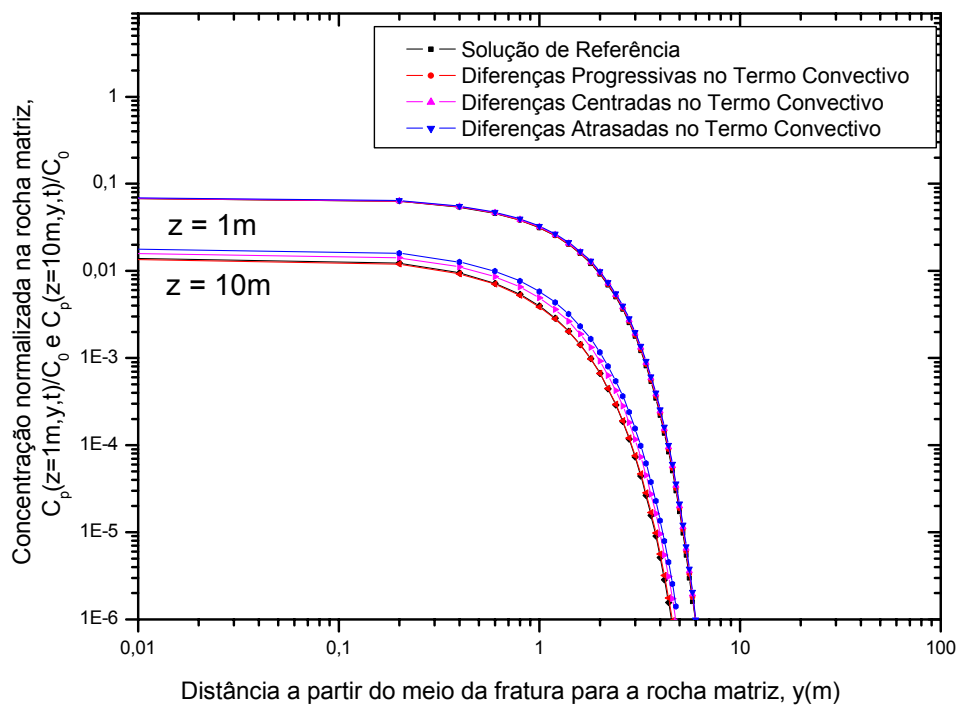


Fig.5.2 – Método de Euler Explícito – comparação da concentração normalizada na rocha matriz nas discretizações do termo convectivo e a solução de referência, para z=1m e z=10m.

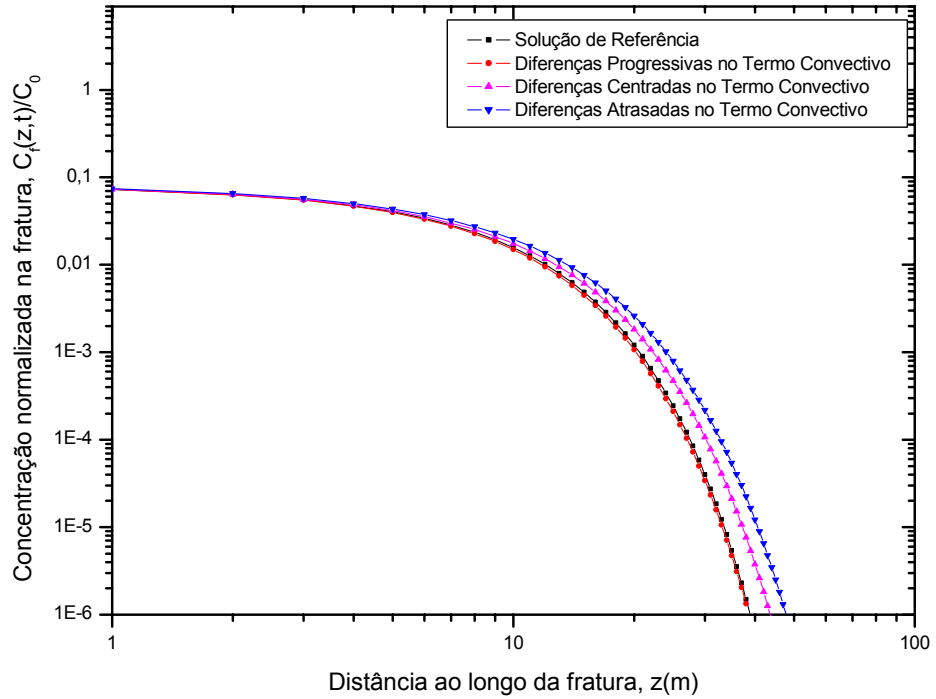


Fig.5.3 – Método de Euler Implícito – comparação da concentração normalizada na fratura nas discretizações do termo convectivo e a solução de referência.

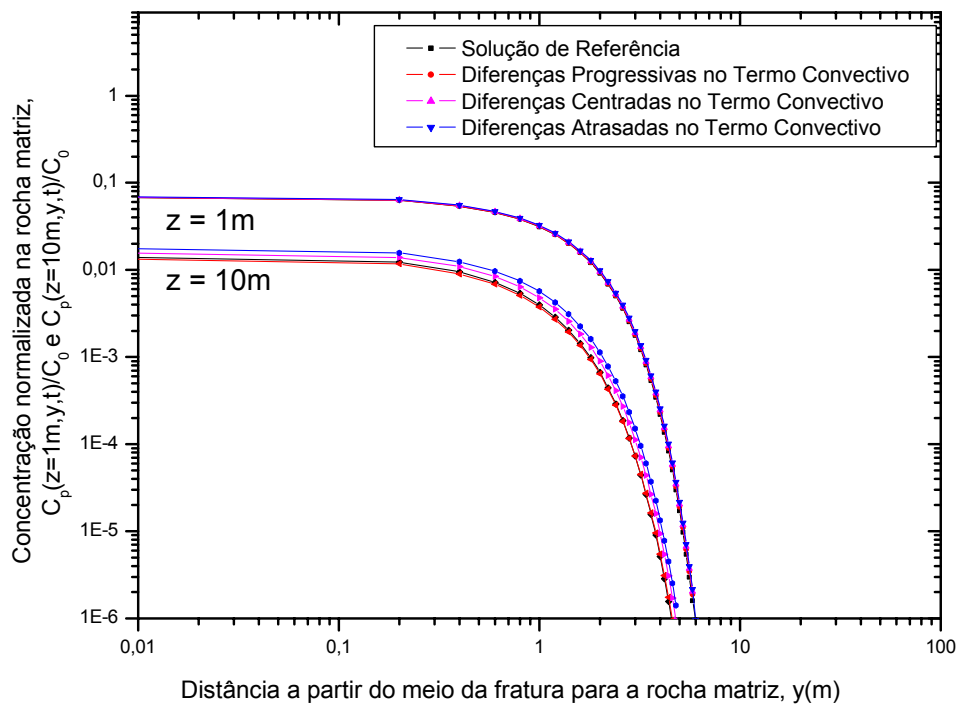


Fig.5.4 – Método de Euler Implícito – comparação da concentração normalizada na rocha matriz nas discretizações do termo convectivo e a solução de referência, para z=1m e z=10m.

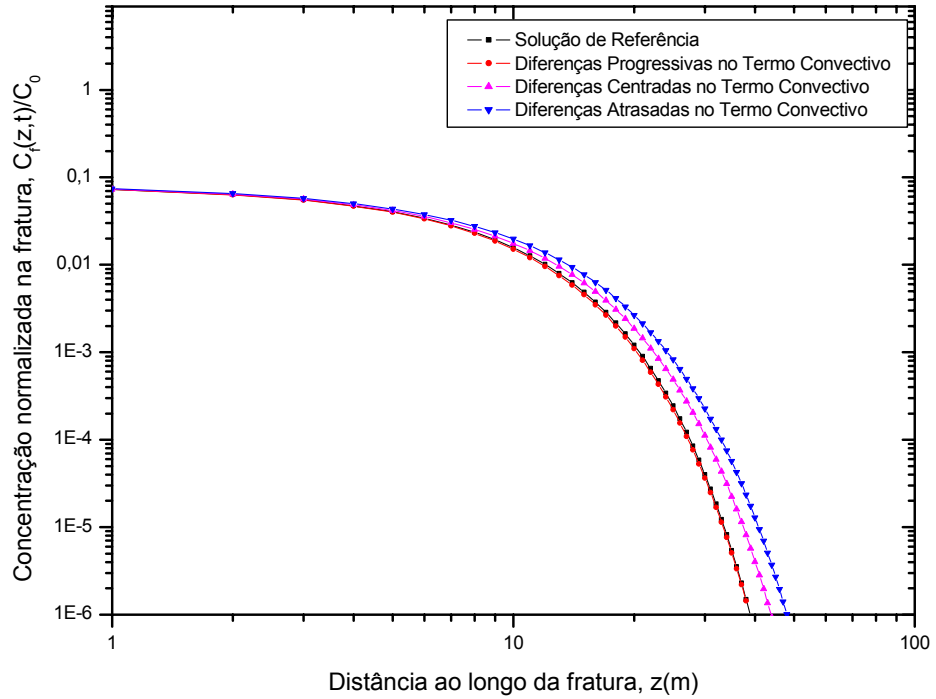


Fig.5.5 – Método de Crank-Nicolson – comparação da concentração normalizada na fratura nas discretizações do termo convectivo e a solução de referência.

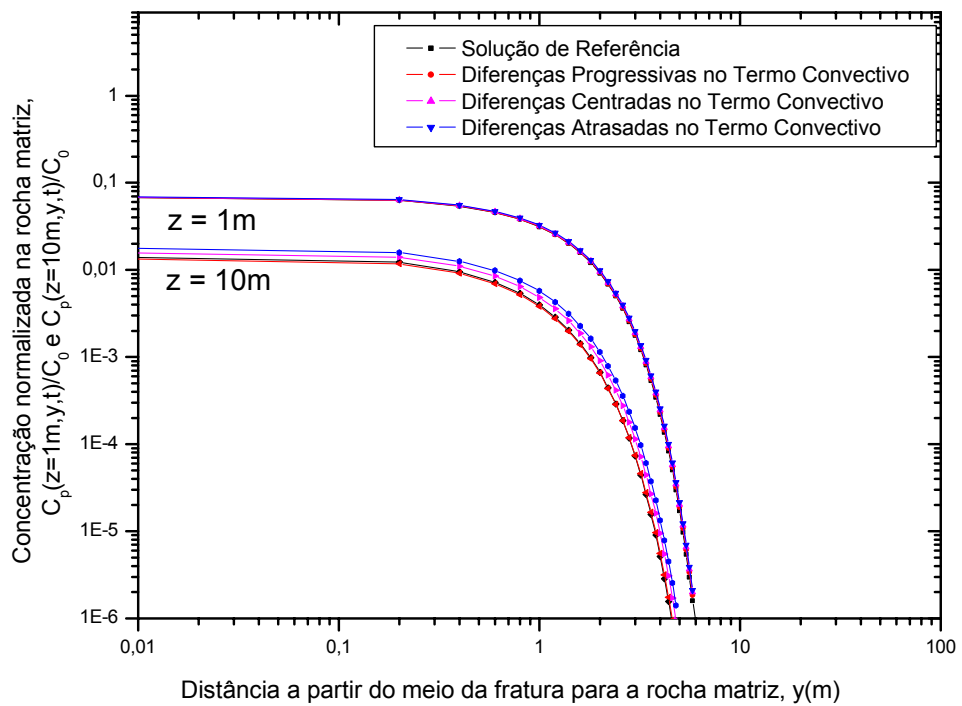


Fig.5.6 – Método de Crank-Nicolson – comparação da concentração normalizada na rocha matriz nas discretizações do termo convectivo e a solução de referência, para z=1m e z=10m.

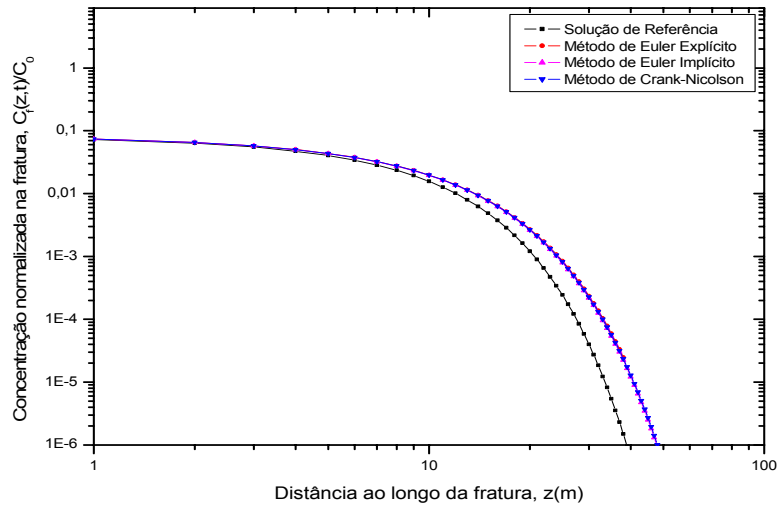


Fig.5.7 – Diferenças Atrasadas no termo Convectivo – comparação da concentração normalizada na fratura nos métodos e a solução de referência.

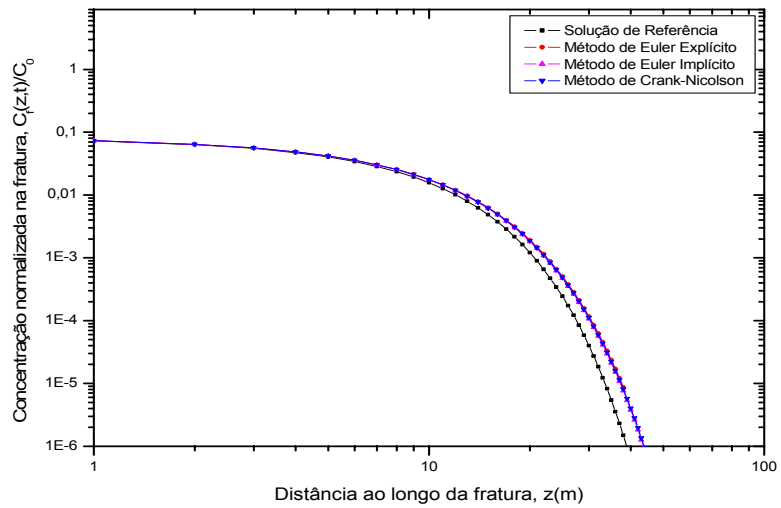


Fig.5.8 – Diferenças Centradas no termo Convectivo – comparação da concentração normalizada na fratura nos métodos e a solução de referência.

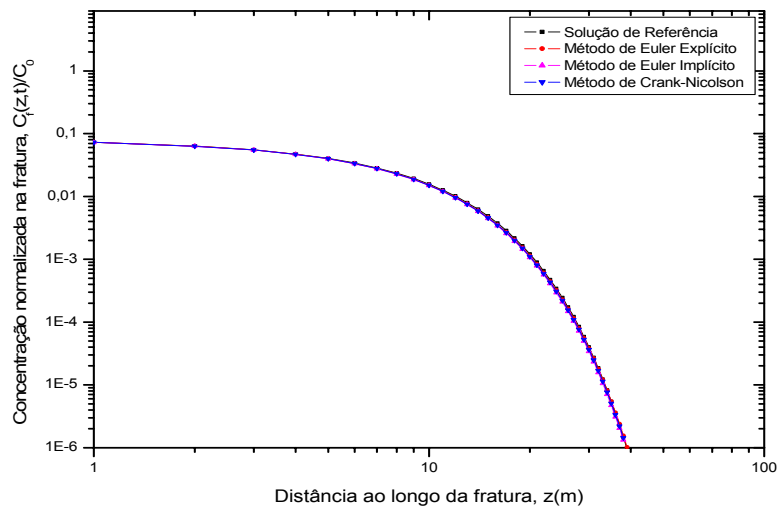


Fig.5.9 – Diferenças Progressivas no termo Convectivo – comparação da concentração normalizada na fratura nos métodos e a solução de referência.

5.4.2 Tabelas Comparativas

Como foi visto, o software computacional nos forneceu dados confiáveis para um tempo de 100 anos. Desta forma, vamos considerar que para 10 anos também este software produz valores de concentração normalizada confiáveis e, assim, vamos encontrar uma malha com menor erro relativo possível para um tempo de 10 anos e 100 anos. Para 1000 anos e 10000 anos a resposta deste software foi oscilatória e, deste modo, concluímos que este software computacional não é capaz de calcular com eficácia nestes intervalos de tempo maiores.

Inicialmente, para o tempo de 10 anos, a discretização progressiva no termo convectivo foi a que obteve os menores erros relativos nas três discretizações temporais estudadas. Porém foi encontrada a mesma malha espacial e temporal nos três métodos: $\Delta z = 1,0m$, $\Delta y = 0,05m$ e $\Delta t = 0,001 \text{ ano}$. Se diminuir Δt , o erro relativo percentual aumenta um pouco nos anunciando que chegamos ao limite dos cálculos, onde os erros de arredondamento da máquina começam a interferir na nossa solução. Conforme se altera Δy , o erro relativo diminui numa parte, mas aumenta noutra, pois a solução numérica cruza a solução dada pelo software computacional. E, ao se alterar Δz , obtém-se o mesmo comportamento nos resultados.

Nas tabelas 5.6, 5.7 e 5.8 estão alguns pontos significativos, mostrando a evolução do erro, sendo o ponto $z = 8$ metros, o de maior erro nos três métodos em estudo.

Tabela 5.6

Erro relativo percentual na fratura para o método de Euler Explícito com a solução de referência em 10 anos.

z (m)	Solução De Referência	Euler Explícito	Erro Relativo	Tempo de CPU
1	4,63E-02	4,61E-02	0,47%	
4	9,99E-03	9,09E-03	9,05%	
8	5,73E-04	4,85E-04	15,38%	19,25 seg.
10	9,79E-05	8,51E-05	13,12%	
13	4,59E-06	4,65E-06	-1,43%	

Tabela 5.7

Erro relativo percentual na fratura para o método de Euler Implícito com a solução de referência em 10 anos.

z (m)	Solução de Referência	Euler Implícito	Erro Relativo	Tempo de CPU
1	4,63E-02	4,61E-02	0,50%	
4	9,99E-03	9,08E-03	9,15%	
8	5,73E-04	4,84E-04	15,57%	19,96 seg.
10	9,79E-05	8,49E-05	13,35%	
13	4,59E-06	4,64E-06	-1,16%	

Tabela 5.8

Erro relativo percentual na fratura para o método de Crank-Nicolson com a solução de referência em 10 anos.

z (m)	Solução de Referência	Crank-Nicolson	Erro Relativo	Tempo de CPU
1	4,63E-02	4,61E-02	0,48%	
4	9,99E-03	9,08E-03	9,10%	
8	5,73E-04	4,84E-04	15,47%	19,78 seg.
10	9,79E-05	8,50E-05	13,24%	
13	4,59E-06	4,64E-06	-1,29%	

Para o tempo de 100 anos, foi analisada além da fratura, a rocha matriz em $z = 1$ metro e $z = 10$ metros. A discretização progressiva foi a que mais próximo alcançou a solução dada pelo software computacional, também a cruzando. Foi possível a utilização de uma malha mais grossa espacial e temporal sem prejuízo ao resultado. As tabelas 5.9, 5.10 e 5.11 são para a comparação na fratura. As tabelas 5.12, 5.13 e 5.14 são para a comparação na rocha matriz sendo os dados retirados a 1 metro do início da fratura. E as tabelas 5.15, 5.16 e 5.17 são para a rocha matriz sendo os dados retirados a 10 metros do início da fratura.

A tabela 5.18 mostra as malhas espaciais e temporais utilizadas para obtenção destes resultados.

Tabela 5.9

Erro relativo percentual na fratura para o método de Euler Explícito com a solução de referência em 100 anos.

z (m)	Solução de Referência	Euler Explícito	Erro Relativo	Tempo de CPU
1	7,262E-02	7,26E-02	0,03%	
13	7,992E-03	7,67E-03	4,07%	
22	6,535E-04	6,14E-04	6,00%	8,47 seg.
29	5,839E-05	5,60E-05	4,16%	
35	5,411E-06	5,47E-06	-1,06%	

Tabela 5.10

Erro relativo percentual na fratura para o método de Euler Implícito com a solução de referência em 100 anos.

z (m)	Solução de Referência	Euler Implícito	Erro Relativo	Tempo de CPU
1	7,262E-02	7,25E-02	0,20%	
13	7,992E-03	7,47E-03	6,49%	
22	6,535E-04	5,90E-04	9,65%	6,58 seg.
29	5,839E-05	5,42E-05	7,22%	
35	5,411E-06	5,44E-06	-0,49%	

Tabela 5.11

Erro relativo percentual na fratura para o método de Crank-Nicolson com a solução de referência em 100 anos.

z (m)	Solução de Referência	Crank-Nicolson	Erro Relativo	Tempo de CPU
1	7,262E-02	7,26E-02	0,08%	
13	7,992E-03	7,61E-03	4,79%	
22	6,535E-04	6,07E-04	7,15%	6,14 seg.
29	5,839E-05	5,53E-05	5,29%	
35	5,411E-06	5,43E-06	-0,45%	

Tabela 5.12

Erro relativo percentual na rocha matriz para z=1metro no método de Euler Explícito com a solução de referência em 100 anos.

y (m)	Solução de Referência	Euler Explícito	Erro Relativo	Tempo de CPU
0,0005	7,262E-02	7,26E-02	0,03%	
2,0005	9,187E-03	9,34E-03	-1,66%	
3,4005	8,103E-04	8,45E-04	-4,23%	8,47 seg.
4,8005	2,960E-05	3,21E-05	-8,38%	
5,8005	1,592E-06	1,79E-06	-12,66%	

Tabela 5.13

Erro relativo percentual na rocha matriz para z=1metro no método de Euler Implícito com a solução de referência em 100 anos.

y (m)	Solução de Referência	Euler Implícito	Erro Relativo	Tempo de CPU
0,0005	7,262E-02	7,25E-02	0,20%	
2,0005	9,187E-03	9,28E-03	-0,97%	
3,4005	8,103E-04	8,48E-04	-4,62%	6,58 seg.
4,8005	2,960E-05	3,37E-05	-13,86%	
5,8005	1,592E-06	2,02E-06	-26,93%	

Tabela 5.14

Erro relativo percentual na rocha matriz para z=1metro no método de Crank-Nicolson com a solução de referência em 100 anos.

y (m)	Solução de Referência	Crank-Nicolson	Erro Relativo	Tempo de CPU
0,0005	7,262E-02	7,26E-02	0,08%	
2,0005	9,187E-03	9,31E-03	-1,36%	
3,4005	8,103E-04	8,43E-04	-4,04%	6,14 seg.
4,8005	2,960E-05	3,23E-05	-9,21%	
5,8005	1,592E-06	1,84E-06	-15,38%	

Tabela 5.15

Erro relativo percentual na rocha matriz para z = 10 metros no método de Euler Explícito com a solução de referência em 100 anos.

y (m)	Solução de Referência	Euler Explícito	Erro Relativo	Tempo de CPU
0,0005	1,57E-02	1,53E-02	2,90%	
1,4005	2,04E-03	2,01E-03	1,42%	
2,2005	4,42E-04	4,45E-04	-0,69%	8,47 seg.
3,2005	4,44E-05	4,66E-05	-4,96%	
4,4005	1,56E-06	1,76E-06	-13,01%	

Tabela 5.16

Erro relativo percentual na rocha matriz para z = 10 metros no método de Euler Implícito com a solução de referência em 100 anos.

y (m)	Solução de Referência	Euler Implícito	Erro Relativo	Tempo de CPU
0,0005	1,57E-02	1,50E-02	4,68%	
1,4005	2,04E-03	1,96E-03	3,57%	
2,2005	4,42E-04	4,39E-04	0,60%	6,58 seg.
3,2005	4,44E-05	4,74E-05	-6,80%	
4,4005	1,56E-06	1,94E-06	-24,13%	

Tabela 5.17

Erro relativo percentual na rocha matriz para z = 10 metros no método de Crank-Nicolson com a solução de referência em 100 anos.

y (m)	Solução de Referência	Crank-Nicolson	Erro Relativo	Tempo de CPU
0,0005	1,57E-02	1,52E-02	3,42%	
1,4005	2,04E-03	1,99E-03	2,16%	
2,2005	4,42E-04	4,42E-04	-0,07%	6,14 seg.
3,2005	4,44E-05	4,66E-05	-4,97%	
4,4005	1,56E-06	1,79E-06	-15,04%	

Tabela 5.18

Malhas utilizadas na comparação dos métodos com a solução de referência em 100 anos.

Esquema	Δz (m)	Δy (m)	Δt (ano)
Euler Explícito	1,0	0,1	0,1
Euler Implícito	1,0	0,1	0,3
Crank-Nicolson	1,0	0,1	0,15

No método de Euler Explícito a diminuição do passo temporal nos leva aos erros advindos do arredondamento computacional, onde o erro relativo aumenta levemente. Mexer com Δy , a solução que cruza a do software computacional fica pior, e mexer com Δz o resultado fica acima ou abaixo da solução de referência, e o erro aumenta monotonicamente.

Nos Métodos de Euler Implícito e Crank-Nicolson, ao aumentar o passo temporal a solução fica melhor em uma parte, mas piora em outra por causa do cruzamento das soluções. Para Δy e Δz obteve-se o mesmo comportamento do Método Explícito.

Com relação ao tempo de CPU, por não ser possível a utilização de uma malha temporal maior nos métodos de Euler Implícito e Crank-Nicolson sem comprometer a resposta do sistema, e ficando todos praticamente com o mesmo tempo, o Método de Euler Explícito é o melhor por utilizar menos operações por passo no tempo.

Com relação ao erro relativo, o método de Euler Explícito foi o que obteve o menor erro relativo não só na fratura como também na rocha matriz a 1 metro e a 10 metros do início da fratura.

5.4.3 Desacoplamento do termo fonte

Como foi visto anteriormente, a discretização progressiva foi a que obteve os melhores resultados e tem condições de estabilidade que devem ser respeitadas nos métodos,

não só o de Euler Explícito, como também o de Euler Implícito e o de Crank-Nicolson. Em FORTUNA (2000), para a equação de convecção, o melhor tratamento é a discretização upwind, onde se leva em conta o sinal da velocidade do fluido para a discretização. Nos trabalhos de CHAN (1984) e BECKERS (1992) sobre análise de estabilidade da equação de difusão-convecção, estes autores utilizam a discretização centrada no espaço. Com o objetivo de melhorar a resposta dos métodos de Euler Implícito e Crank-Nicolson vamos desacoplar o termo fonte, o fluxo difusivo, de forma que ele atue o mais implicitamente possível nestes métodos e, assim, se aproximar da solução de referência fornecida.

Inicialmente, o fluxo difusivo $q(z,t)$, nos métodos de Euler Implícito e Crank-Nicolson foi considerado constante, ou seja, em suas soluções foi realizada a aproximação: $q_i^{n+1} \approx q_i^n$. Para melhorar a ação deste termo fonte, deve-se procurar torná-lo o mais implícito possível. Uma forma de fazer isto é desacoplá-lo, CUNHA (1993), para isto, o Método de Picard é o mais simples, onde a partir de um valor disponível do fluxo difusivo, é calculado o valor de uma função dependente deste fluxo, e este valor será o utilizado na próxima iteração. A equação generalizada deste método é apresentada a seguir:

$$q_i^{n+1} = f(q_i^n)$$

O procedimento adotado foi a extrapolação do fluxo difusivo, onde a partir dos valores disponíveis de q_i^{n-1} e q_i^n obtemos o fluxo difusivo extrapolado $q_{i,ext}^{n+1}$:

$$q_{i,ext}^{n+1} = 2q_i^n - q_i^{n-1}$$

e, em seguida, fez-se a média aritmética do fluxo difusivo extrapolado $q_{i,ext}^{n+1}$ e o fluxo difusivo no tempo anterior q_i^n , obtendo assim a função para q_i^{n+1} :

$$q_i^{n+1} = \frac{3q_i^n - q_i^{n-1}}{2}$$

Os resultados preliminares deste procedimento estão em SILVEIRA et al. (2007b), onde foi analisado o comportamento do fluxo difusivo nos métodos de Euler Explícito, Euler Implícito e Crank-Nicolson nas três discretizações utilizadas no termo convectivo.

Nas tabelas 5.19 e 5.20 estão listados os menores erros relativos encontrados e as

respectivas malhas espaciais e temporais utilizadas no desacoplamento. Como se pode observar, os erros estão altos nos mostrando que este procedimento de desacoplamento não foi eficaz, pois superestima o fluxo difusivo, ou melhor, este termo fonte não é tão expressivo na solução destas equações.

Tabela 5.19

Comparação dos métodos de Euler Implícito e Crank-Nicolson desacoplados, sendo a discretização atrasada no termo convectivo, com a solução de referência em 100 anos.

z (m)	Solução de Referência	Euler Implícito		Crank-Nicolson	
		$\Delta z = 1,0m$ $\Delta y = 0,22m$ $\Delta t = 0,01 \text{ ano}$	Erro Relativo	$\Delta z = 1,0m$ $\Delta y = 0,046m$ $\Delta t = 0,01 \text{ ano}$	Erro Relativo
1	7,262E-02	6,80E-02	6,35%	7,03E-02	3,18%
10	1,572E-02	1,08E-02	31,57%	1,29E-02	17,69%
18	2,167E-03	1,33E-03	38,75%	1,68E-03	22,37%
28	8,446E-05	6,21E-05	26,47%	7,29E-05	13,71%
38	1,486E-06	1,96E-06	-32,14%	1,80E-06	-21,48%

Tabela 5.20

Comparação dos métodos de Euler Implícito e Crank-Nicolson desacoplados, sendo a discretização centrada no termo convectivo, com a solução de referência em 100 anos.

z (m)	Solução de Referência	Euler Implícito		Crank-Nicolson	
		$\Delta z = 1,0m$ $\Delta y = 0,3m$ $\Delta t = 1,0 \text{ ano}$	Erro Relativo	$\Delta z = 1,0m$ $\Delta y = 0,1m$ $\Delta t = 0,65 \text{ ano}$	Erro Relativo
1	7,262E-02	6,71E-02	7,55%	6,98E-02	3,86%
10	1,572E-02	9,81E-03	37,57%	1,23E-02	22,04%
19	1,626E-03	8,63E-04	46,96%	1,16E-03	28,54%
28	8,446E-05	5,40E-05	36,05%	6,84E-05	18,97%
38	1,486E-06	1,87E-06	-25,59%	1,88E-06	-26,35%

5.4.4 Gráficos para 1000 e 10000 anos

No intuito de demonstrar o comportamento dos métodos em estudo para tempos maiores foi realizada a simulação para 1000 e 10000 anos com as seguintes malhas temporais e espaciais listadas na tabela 5.21.

Tabela 5.21

Malhas utilizadas na comparação dos métodos em 1000 e 10000 anos.

Esquema	Δz (m)	Δy (m)	Δt (ano)		
			Disc. Atrasada	Disc. Centrada	Disc. Progressiva
Euler Explícito	1,0	0,1	0,2	0,2	0,5
Euler Implícito	1,0	0,1	0,5	0,5	0,5
Crank-Nicolson	1,0	0,1	0,5	0,5	0,5

Nas figuras 5.10 e 5.11 estão os gráficos comparativos para o Método Euler Explícito, sendo o 5.10 para a concentração normalizada na fratura. Como se pode observar, conforme aumenta o período de simulação, as respostas dos três métodos em estudo são bastante semelhantes.

Na figura 5.11 tem-se a concentração normalizada na rocha matriz, sendo os valores de concentração extraídos a 1 metro e a 10 metros do início da fratura. Na comparação em 1000 anos notam-se as duas extrações, já em 10000 anos, os valores de concentração estão bem próximos, pois o particulado se encontra bem difundido pela rocha matriz.

Comportamentos similares foram encontrados para os Métodos de Euler Implícito, figuras 5.12 e 5.13 (fratura e rocha matriz, respectivamente), e de Crank-Nicolson, figuras 5.14 e 5.15 (fratura e rocha matriz, respectivamente).

Nas figuras 5.16, 5.17 e 5.18 estão os mesmos dados só que separados de acordo com a discretização espacial. O objetivo destes gráficos é mostrar que os Métodos de Euler Explícito, Implícito e Crank-Nicolson têm valores similares de concentração normalizada quando realizada, principalmente, simulação para tempos longos.

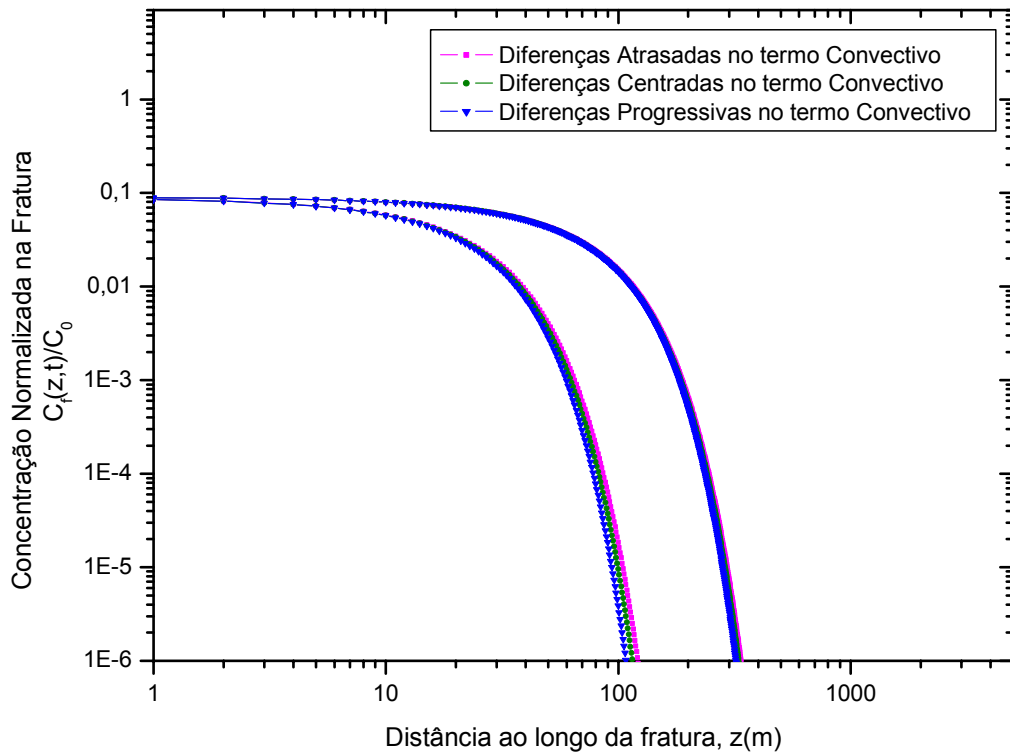


Fig.5.10 – Método de Euler Explícito – comparação da concentração normalizada na fratura nas discretizações do termo convectivo em 1000 e 10000 anos.

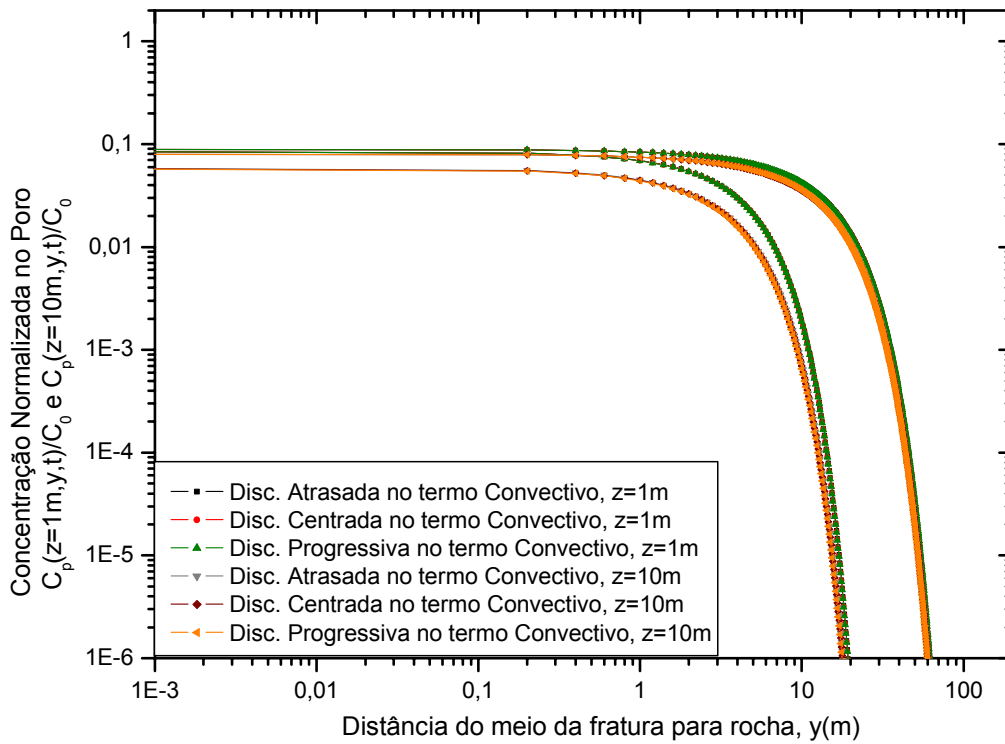


Fig.5.11 – Método de Euler Explícito – comparação da concentração normalizada na rocha matriz nas discretizações do termo convectivo para $z=1$ m e $z=10$ m, em 1000 e 10000 anos.

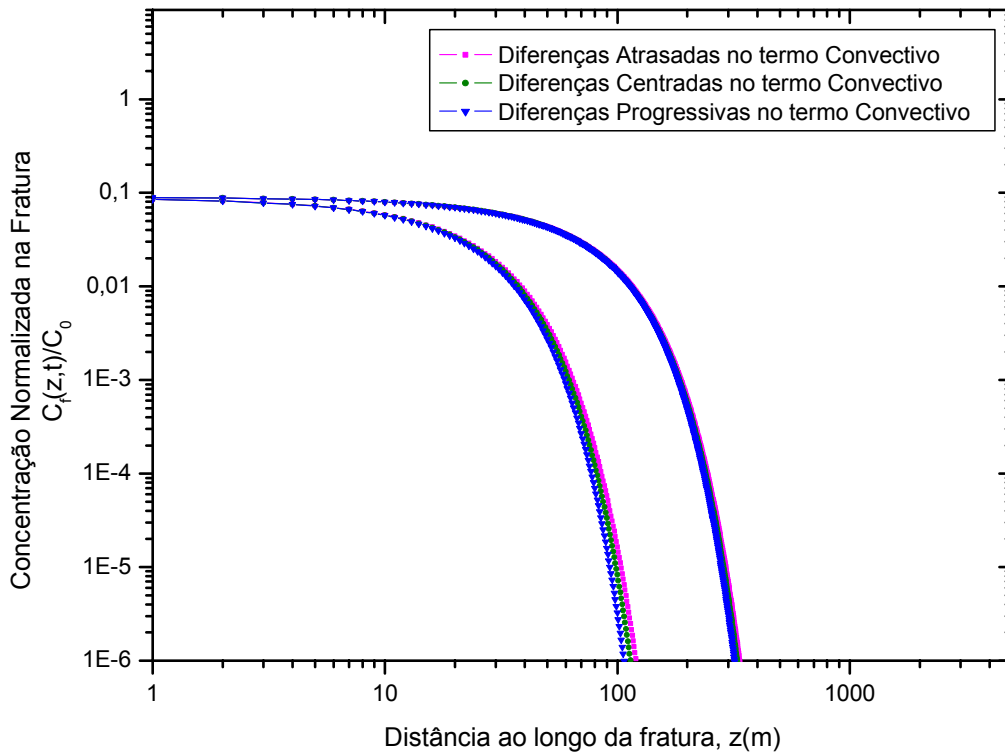


Fig.5.12 – Método de Euler Implícito – comparação da concentração normalizada na fratura nas discretizações do termo convectivo em 1000 e 10000 anos.

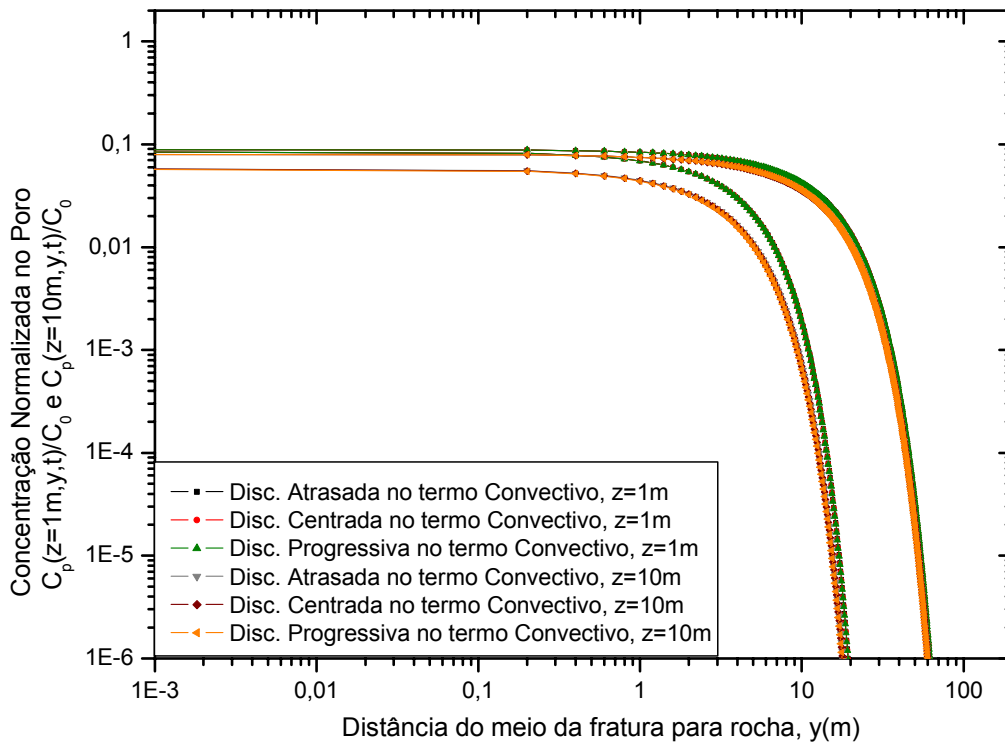


Fig.5.13 – Método de Euler Implícito – comparação da concentração normalizada na rocha matriz nas discretizações do termo convectivo para z=1m e z=10m, em 1000 e 10000 anos.

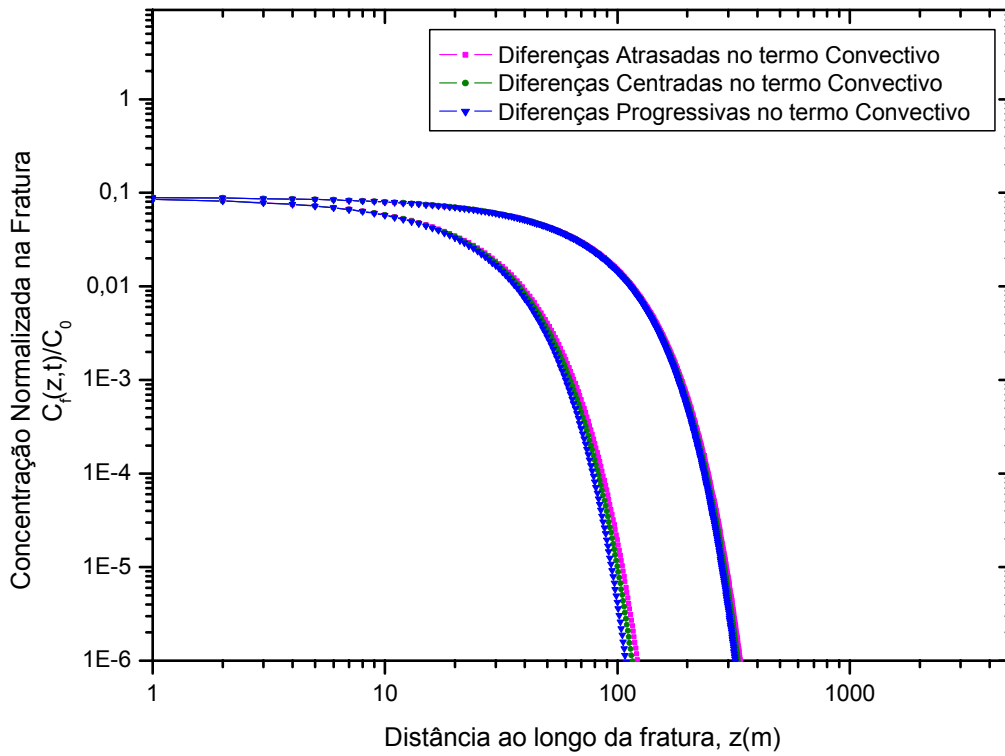


Fig.5.14 – Método de Crank-Nicolson – comparação da concentração normalizada na fratura nas discretizações do termo convectivo em 1000 e 10000 anos.

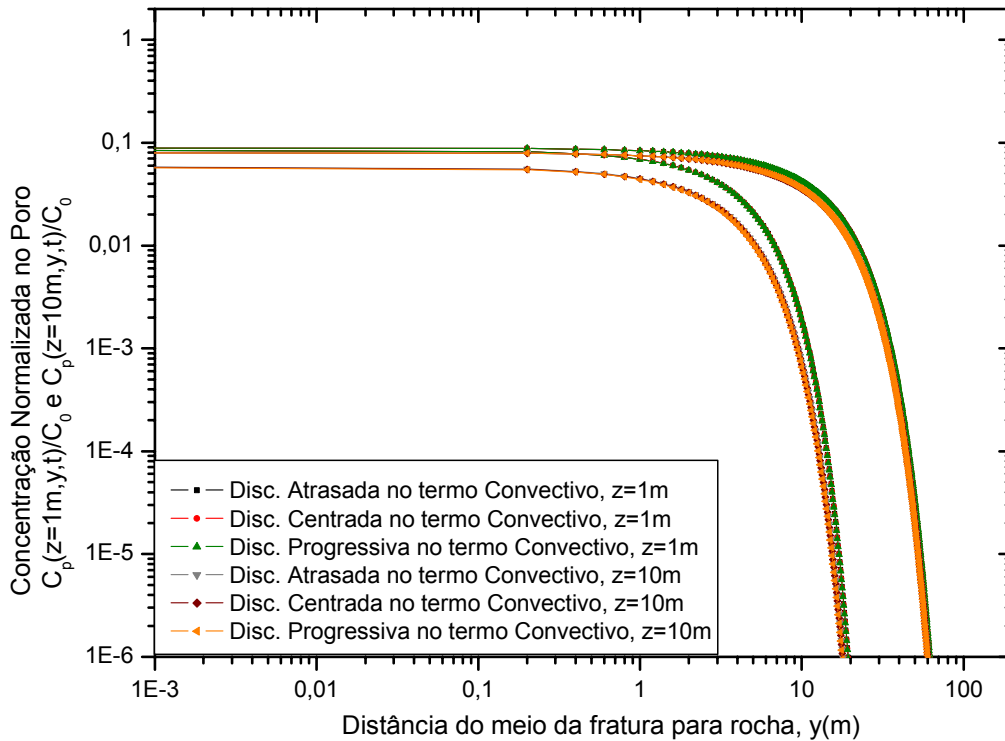


Fig.5.15 – Método de Euler Implícito – comparação da concentração normalizada na rocha matriz nas discretizações do termo convectivo para $z=1$ m e $z=10$ m, em 1000 e 10000 anos.

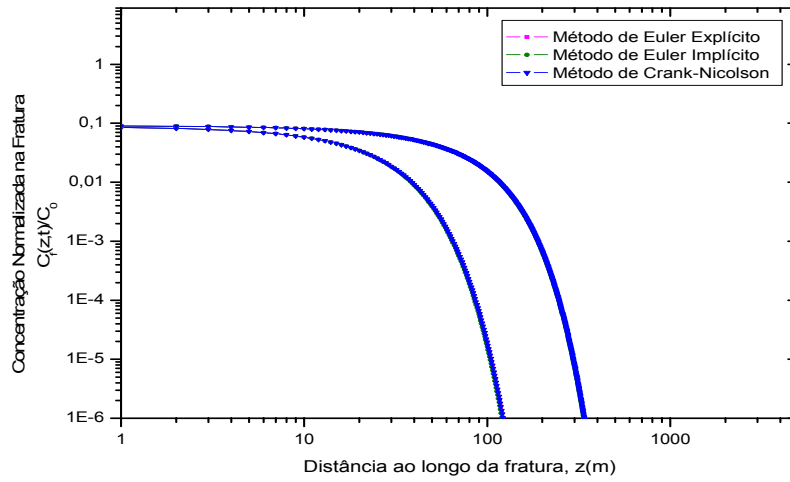


Fig.5.16 – Diferenças Atrasadas no termo Convectivo – comparação da concentração normalizada na fratura nos métodos em 1000 e 10000 anos.

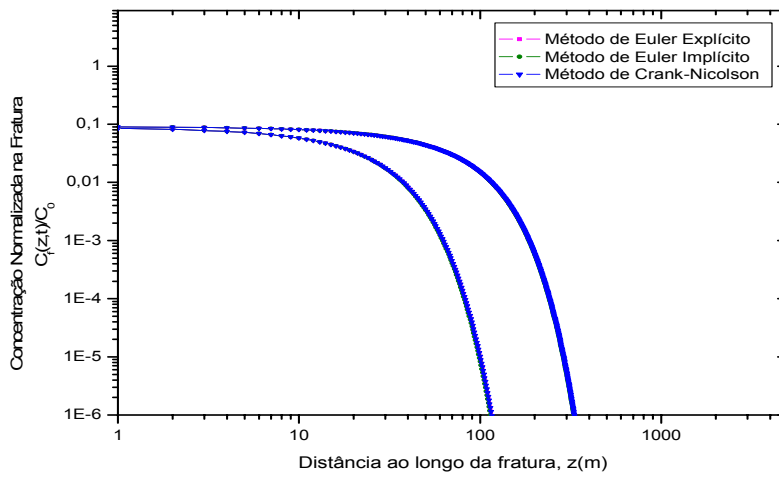


Fig.5.17 – Diferenças Centradas no termo Convectivo – comparação da concentração normalizada na fratura nos métodos em 1000 e 10000 anos.

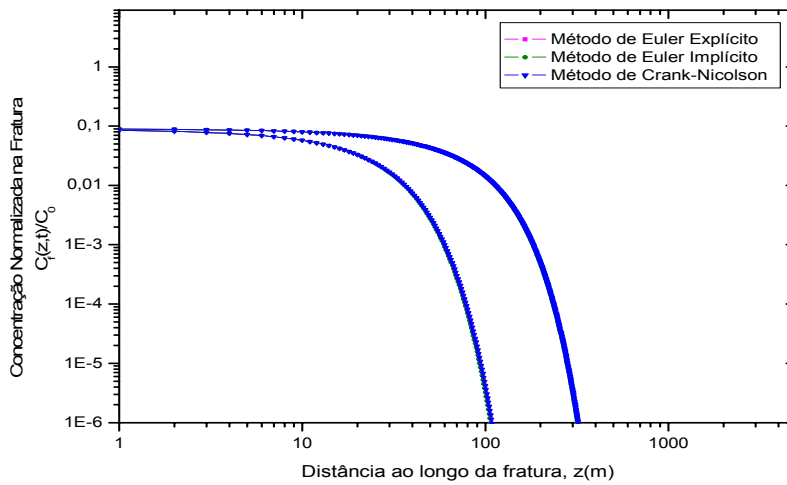


Fig.5.18 – Diferenças Progressivas no termo Convectivo – comparação da concentração normalizada na fratura nos métodos em 1000 e 10000 anos.

CAPÍTULO 6

CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

Analisando os resultados obtidos na presente pesquisa, podem-se enunciar as seguintes conclusões:

Foi demonstrado que todos os métodos analisados, Euler Explícito, Euler Implícito e Crank-Nicolson, nas discretizações progressivas, centradas e atrasadas do termo convectivo, são consistentes com as equações diferenciais parciais originais.

Na análise da estabilidade dessas equações discretizadas, foram encontradas para a discretização progressiva do termo convectivo, condições de estabilidade que devem ser respeitadas para os três métodos estudados.

Na análise comparativa em 10 anos com a solução de referência, a discretização progressiva no termo convectivo foi a que alcançou os menores erros relativos nos três métodos em estudo, um pouco mais de 15%, contudo, foi com a utilização da mesma malha espacial e temporal e, sendo assim, o método de Euler Explícito é o mais aplicável nesta situação, por formar um sistema de equações independentes e, assim, utilizar um menor número de operações por passo no tempo que os métodos de Euler Implícito e Crank-Nicolson.

Na análise comparativa em 100 anos com a solução de referência, a discretização progressiva no termo convectivo foi a que também alcançou os menores erros relativos nos três métodos em estudo, menores que 10%, e embora as malhas temporais dos métodos de Euler Implícito e de Crank-Nicolson sejam as maiores possíveis, segundo FORTUNA (2000), estes métodos só são aplicáveis quando suas malhas podem ser de 10 a 20 vezes maiores que as do método explícito, sem prejudicar a solução do sistema, e não foi o que encontramos. Assim, o método explícito na discretização progressiva no termo convectivo é o que melhor representa o sistema.

No trabalho de BUCKLEY (1993), onde o autor utiliza o esquema NND no termo

convectivo, e faz comparação com resultados analíticos até a ordem de 10^{-4} em 1000 anos, encontra erros menores que 10% na maioria das posições e afirma ser um bom resultado, destarte, os resultados obtidos neste estudo podem ser considerados de boa acurácia.

Na tentativa de desacoplar o termo fonte para que os métodos de Euler Implícito e de Crank-Nicolson produzissem respostas significativas do sistema além da discretização progressiva do termo convectivo, onde estes métodos têm restrições quanto à estabilidade, o procedimento adotado superestimou o termo fonte, não trazendo bons resultados, ou seja, este termo não é tão significativo para estas equações.

Os gráficos para 1000 e 10000 anos são meramente ilustrativos, pois não temos resultados analíticos para testar sua acurácia, porém demonstra quanto maior o tempo mais similar é a resposta dos métodos estudados.

Com relação à análise de segurança, estes resultados nos mostram a quantidade de radionuclídeos que se difundem pela fratura e matriz porosa, e permite calcular a que distância tem-se uma determinada concentração normalizada para uma dada escala de tempo e, assim, planejar um monitoramento da região.

Apresentam-se a seguir sugestões para melhorias futuras deste trabalho:

Realizar uma análise dimensional nas equações para estabelecer as relações entre as variáveis, como por exemplo, uma análise no número de Péclet, que é um valor adimensional que mede a razão entre as intensidades dos processos de convecção e de difusão. Quanto maior o número de Péclet, maior é a intensidade da convecção.

Realizar uma análise de sensibilidade no modelo para verificar o efeito da variação dos parâmetros de entrada nos perfis de concentração.

Uma solução analítica para tempos maiores, 1000 anos e 10000 anos, para que se possa realizar a comparação dos métodos nestes períodos de tempo.

Realizar a simulação para períodos maiores que o tempo de lixívia (leach time) para observar o comportamento da condição de faixa de liberação (band release condition).

Considerar a cadeia de decaimento radioativo nas equações de migração e, pela simplificada geometria utilizada neste estudo, seria interessante considerar um sistema mais complexo e realista para a descrição da migração dos radionuclídeos.

APÊNDICE A

MODELO MATEMÁTICO

Os processos de transporte no sistema podem ser descritos por duas equações acopladas unidimensionais, uma para a fratura e outra para a rocha matriz. O acoplamento é garantido pela continuidade do fluxo e pela concentração ao longo da interface.

A.1 Fratura

A forma unidimensional da equação da convecção/difusão para constituintes dissolvidos não-reativos, meio saturado, homogêneo, isotrópico e fluxo uniforme é:

$$\frac{\partial C_f(z,t)}{\partial t} - D_f \frac{\partial^2 C_f(z,t)}{\partial z^2} + v \frac{\partial C_f(z,t)}{\partial z} = 0$$

Em BEAR (1972), incluindo as condições do problema em questão, como: decaimento radioativo, sorção na interface e perda para o meio poroso, tem-se a equação:

$$\frac{\partial C_f(z,t)}{\partial t} - D_f \frac{\partial^2 C_f(z,t)}{\partial z^2} + v \frac{\partial C_f(z,t)}{\partial z} + \frac{1}{b} \frac{\partial S_f}{\partial t} + \lambda C_f(z,t) + \frac{\lambda S_f}{b} + \frac{q(z,t)}{b} = 0 \quad (\text{A.1})$$

$$0 \leq z \leq \infty$$

onde

$C_f(z,t)$ → concentração do radionuclídeo na água da fratura (Kg-nuclídeo/m³-água)

t → tempo (ano)

D_f → coeficiente de dispersão longitudinal (m² /ano)

v → velocidade da água na fratura (m /ano)

z → coordenada ao longo da fratura (m)

λ → constante de decaimento (1/ano)

b → metade da largura da fratura (m)

S_f → é a massa do soluto adsorvido pela superfície da fratura (Kg-nuclídeo/ m²).

Assumindo que a sorção para a superfície da fratura é governado por uma isoterma linear no equilíbrio sob a forma $S = f(C_f)$, desta forma, de acordo com o dissolvido e as fases adsorvidas, são dadas as relações:

$$S = \frac{dS}{dC_f} C_f = K_f C_f \quad (\text{A.2})$$

$$\frac{dS}{dt} = \frac{dS}{dC_f} \frac{\partial C_f}{\partial t} = K_f \frac{\partial C_f}{\partial t} \quad (\text{A.3})$$

onde

K_f → coeficiente de distribuição superficial de soluto por unidade de área da interface da fratura sobre a unidade de volume (m).

Realizando as substituições de (A.2) e (A.3) em (A.1) encontramos:

$$\frac{\partial C_f(z,t)}{\partial t} - D_f \frac{\partial^2 C_f(z,t)}{\partial z^2} + v \frac{\partial C_f(z,t)}{\partial z} + \frac{1}{b} K_f \frac{\partial C_f}{\partial t} + \lambda C_f(z,t) + \frac{\lambda}{b} K_f C_f + \frac{q(z,t)}{b} = 0$$

agrupando os termos comuns, temos:

$$\frac{\partial C_f(z,t)}{\partial t} \left(1 + \frac{K_f}{b}\right) - D_f \frac{\partial^2 C_f(z,t)}{\partial z^2} + v \frac{\partial C_f(z,t)}{\partial z} + \lambda C_f(z,t) \left(1 + \frac{K_f}{b}\right) + \frac{q(z,t)}{b} = 0$$

e introduzindo o fator de retardo, definido por:

$$R_f = 1 + \frac{K_f}{b} \quad (\text{A.4})$$

e realizando a substituição, a equação para a fratura torna-se:

$$R_f \frac{\partial C_f(z,t)}{\partial t} - D_f \frac{\partial^2 C_f(z,t)}{\partial z^2} + v \frac{\partial C_f(z,t)}{\partial z} + R_f \lambda C_f(z,t) + \frac{q(z,t)}{b} = 0$$

$$0 \leq z \leq \infty$$

A.2 Rocha Matriz

A equação diferencial parcial para a rocha matriz é obtida pelo mesmo caminho, considerando o balanço de massa total para a matriz porosa. Como na rocha matriz apenas se considerou a difusão molecular, a equação da difusão é:

$$\frac{\partial C_f(z,t)}{\partial t} - D_f \frac{\partial^2 C_f(z,t)}{\partial z^2} = 0$$

Em BEAR (1972), incluindo as condições do problema em questão, como o decaimento radioativo e a sorção na rocha matriz, tem-se a equação:

$$\frac{\partial C_p(z, y, t)}{\partial t} - D_p \frac{\partial^2 C_p(z, y, t)}{\partial y^2} + \frac{1-\theta}{\theta} \rho_p \frac{\partial S_p(z, y, t)}{\partial t} + \lambda C_p(z, y, t) + \frac{1-\theta}{\theta} \rho_p \lambda S_p(z, y, t) = 0$$

(A.5)

$$b \leq y \leq \infty$$

onde:

$C_p(z, y, t)$ → concentração do radionuclídeo na água do poro (Kg-nuclídeo/m³-água)

θ → porosidade da rocha (adimensional)

D_p → coeficiente de difusão no poro (m² /ano)

y → coordenada perpendicular ao eixo da fratura (m)

ρ_p → densidade da rocha, (Kg/m³)

S_p → massa do soluto adsorvido por unidade de massa de sólido na matriz porosa, igual a $S_p(z, y, t)$, (Kg/Kg).

Para a adsorção na rocha matriz, assume-se uma segunda isoterma linear no equilíbrio sob a forma $S_p = g(C_p)$. Assim temos as relações:

$$S_p = \frac{dS_p}{dC_p} C_p = K_p C_p$$

(A.6)

$$\frac{dS_p}{dt} = \frac{dS_p}{dC_p} \frac{\partial C_p}{\partial t} = K_p \frac{\partial C_p}{\partial t}$$

(A.7)

Combinando as equações (A.6) e (A.7) em (A.5), obtemos:

$$\frac{\partial C_p(z, y, t)}{\partial t} - D_p \frac{\partial^2 C_p(z, y, t)}{\partial y^2} + \frac{(1-\theta)\rho_p K_p}{\theta} \frac{\partial C_p(z, y, t)}{\partial t} + \lambda C_p(z, y, t) + \frac{(1-\theta)\rho_p}{\theta} \lambda K_p C_p(z, y, t) = 0$$

Agrupando em fatores comuns:

$$\frac{\partial C_p(z, y, t)}{\partial t} \left(1 + \frac{1-\theta}{\theta} \rho_p K_p \right) - D_p \frac{\partial^2 C_p(z, y, t)}{\partial y^2} + \lambda C_p(z, y, t) \left(1 + \frac{1-\theta}{\theta} \rho_p K_p \right) = 0 \quad (\text{A.8})$$

E lembrando que o coeficiente de retardo na rocha matriz, R_p , foi assim definido:

$$R_p = 1 + \frac{1-\theta}{\theta} \rho_p K_p$$

Realizando a substituição na equação (A.8), temos:

$$R_p \frac{\partial C_p(z, y, t)}{\partial t} - D_p \frac{\partial^2 C_p(z, y, t)}{\partial y^2} + R_p \lambda C_p(z, y, t) = 0$$

APÊNDICE B

Discretizações Espaciais da Equação de Movimento de Radionuclídeo

B.1 Fratura

Rearranjando a equação (3.1), tem-se:

$$\frac{\partial C_f(z,t)}{\partial t} - \frac{D_f}{R_f} \frac{\partial^2 C_f(z,t)}{\partial z^2} + \frac{v}{R_f} \frac{\partial C_f(z,t)}{\partial z} + \lambda C_f(z,t) + \frac{q(z,t)}{R_f b} = 0 \quad (\text{B.1})$$

Aplicando as discretizações mencionadas na seção 4.3 para a equação (B.1), obtém-se:

B.1.1 Método de Euler Explícito

- **Diferenças Atrasadas no Termo Convectivo ($v > 0 \Rightarrow$ Upwind)**

$$\frac{C_{f,i}^{n+1} - C_{f,i}^n}{\Delta t} - \frac{D_f}{R_f} \left(\frac{C_{f,i-1}^n - 2C_{f,i}^n + C_{f,i+1}^n}{\Delta z^2} \right) + \frac{v}{R_f} \left(\frac{C_{f,i}^n - C_{f,i-1}^n}{\Delta z} \right) + \lambda C_{f,i}^n + \frac{q_i^n}{R_f b} = 0$$

agrupando os termos, obtém-se:

$$\begin{aligned}
C_{f,i}^{n+1} = & C_{f,i-1}^n \left(\frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} + \frac{v \Delta t}{R_f \Delta z} \right) + C_{f,i}^n \left(1 - \frac{2D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} - \frac{v \Delta t}{R_f \Delta z} - \lambda \Delta t \right) + \\
& + C_{f,i+1}^n \left(\frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} \right) + q_i^n \left(-\frac{\Delta t}{R_f b} \right)
\end{aligned} \tag{B.2}$$

○ **Diferenças Progressivas no Termo Convectivo**

$$\frac{C_{f,i}^{n+1} - C_{f,i}^n}{\Delta t} - \frac{D_f}{R_f} \left(\frac{C_{f,i-1}^n - 2C_{f,i}^n + C_{f,i+1}^n}{\Delta z^2} \right) + \frac{v}{R_f} \left(\frac{C_{f,i+1}^n - C_{f,i}^n}{\Delta z} \right) + \lambda C_{f,i}^n + \frac{q_i^n}{R_f b} = 0$$

agrupando os termos, tem-se:

$$\begin{aligned}
C_{f,i}^{n+1} = & C_{f,i-1}^n \left(\frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} \right) + C_{f,i}^n \left(1 - \frac{2D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} + \frac{v \Delta t}{R_f \Delta z} - \lambda \Delta t \right) + \\
& + C_{f,i+1}^n \left(\frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} - \frac{v \Delta t}{R_f \Delta z} \right) + q_i^n \left(-\frac{\Delta t}{R_f b} \right)
\end{aligned} \tag{B.3}$$

○ **Diferenças Centrais no Termo Convectivo**

$$\frac{C_{f,i}^{n+1} - C_{f,i}^n}{\Delta t} - \frac{D_f}{R_f} \left(\frac{C_{f,i-1}^n - 2C_{f,i}^n + C_{f,i+1}^n}{\Delta z^2} \right) + \frac{v}{R_f} \left(\frac{C_{f,i+1}^n - C_{f,i-1}^n}{2\Delta z} \right) + \lambda C_{f,i}^n + \frac{q_i^n}{R_f b} = 0$$

agrupando os termos, obtém-se:

$$\begin{aligned}
C_{f,i}^{n+1} = & C_{f,i-1}^n \left(\frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} + \frac{v \Delta t}{2R_f \Delta z} \right) + C_{f,i}^n \left(1 - \frac{2D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} - \lambda \Delta t \right) + \\
& + C_{f,i+1}^n \left(\frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} - \frac{v \Delta t}{2R_f \Delta z} \right) + q_i^n \left(-\frac{\Delta t}{R_f b} \right)
\end{aligned} \tag{B.4}$$

Na discretização da taxa de perda do fluxo difusivo através da interface fratura-rocha que foi expressa pela primeira Lei de Fick, fez-se $\frac{\partial C_p}{\partial y}$ discretizada por diferenças progressivas de primeira ordem:

$$q_i^n = -\theta D_p \left(\frac{C_{p,i,j+1}^n - C_{p,i,j}^n}{\Delta y} \right)_{j=1}$$

fazendo-se uso da condição de contorno dada pela equação (3.5):

$$q_i^n = \frac{-\theta D_p}{\Delta y} (C_{p,i,2}^n - C_{f,i}^n)$$

B.1.2 Método de Euler Implícito

- **Diferenças Atrasadas no Termo Convectivo ($v > 0 \Rightarrow$ Upwind)**

$$\frac{C_{f,i}^{n+1} - C_{f,i}^n}{\Delta t} - \frac{D_f}{R_f} \left(\frac{C_{f,i-1}^{n+1} - 2C_{f,i}^{n+1} + C_{f,i+1}^{n+1}}{\Delta z^2} \right) + \frac{v}{R_f} \left(\frac{C_{f,i}^{n+1} - C_{f,i-1}^{n+1}}{\Delta z} \right) + \lambda C_{f,i}^{n+1} + \frac{q_i^{n+1}}{R_f b} = 0$$

realiza-se a aproximação:

$$q_i^{n+1} \approx q_i^n = \frac{-\theta D_p}{\Delta y} (C_{p,i,2}^n - C_{f,i}^n) \tag{B.5}$$

Esta aproximação visa deixar as equações mais simples de serem trabalhadas, e é realizada nos métodos de Euler Implícito e Crank Nicolson.

Organizando os termos, tem-se:

$$C_{f,i-1}^{n+1} \left(-\frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} - \frac{v \Delta t}{R_f \Delta z} \right) + C_{f,i}^{n+1} \left(1 + \frac{2D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} + \frac{v \Delta t}{R_f \Delta z} + \lambda \Delta t \right) + C_{f,i+1}^{n+1} \left(-\frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} \right) = C_{f,i}^{n+1} + q_i^n \left(-\frac{\Delta t}{R_f b} \right) \quad (\text{B.6})$$

○ **Diferenças Progressivas no Termo Convectivo**

$$\frac{C_{f,i}^{n+1} - C_{f,i}^n}{\Delta t} - \frac{D_f}{R_f} \left(\frac{C_{f,i-1}^{n+1} - 2C_{f,i}^{n+1} + C_{f,i+1}^{n+1}}{\Delta z^2} \right) + \frac{v}{R_f} \left(\frac{C_{f,i+1}^{n+1} - C_{f,i}^{n+1}}{\Delta z} \right) + \lambda C_{f,i}^{n+1} + \frac{q_i^{n+1}}{R_f b} = 0$$

agrupando os termos, obtém-se:

$$C_{f,i-1}^{n+1} \left(-\frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} \right) + C_{f,i}^{n+1} \left(1 + \frac{2D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} - \frac{v \Delta t}{R_f \Delta z} + \lambda \Delta t \right) + C_{f,i+1}^{n+1} \left(\frac{v \Delta t}{R_f \Delta z} - \frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} \right) = C_{f,i}^{n+1} + q_i^n \left(-\frac{\Delta t}{R_f b} \right) \quad (\text{B.7})$$

○ **Diferenças Centrais no Termo Convectivo**

$$\frac{C_{f,i}^{n+1} - C_{f,i}^n}{\Delta t} - \frac{D_f}{R_f} \left(\frac{C_{f,i-1}^{n+1} - 2C_{f,i}^{n+1} + C_{f,i+1}^{n+1}}{\Delta z^2} \right) + \frac{v}{R_f} \left(\frac{C_{f,i+1}^{n+1} - C_{f,i-1}^{n+1}}{2\Delta z} \right) + \lambda C_{f,i}^{n+1} + \frac{q_i^{n+1}}{R_f b} = 0$$

agrupando os termos, tem-se:

$$C_{f,i-1}^{n+1} \left(-\frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} - \frac{v \Delta t}{2R_f \Delta z} \right) + C_{f,i}^{n+1} \left(1 + \frac{2D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} + \lambda \Delta t \right) + C_{f,i+1}^{n+1} \left(\frac{v \Delta t}{2R_f \Delta z} - \frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} \right) = C_{f,i}^n + q_i^n \left(-\frac{\Delta t}{R_f b} \right) \quad (\text{B.8})$$

B.1.3 Método de Crank-Nicolson

- **Diferenças Atrasadas no Termo Convectivo ($v > 0 \Rightarrow$ Upwind)**

$$\begin{aligned} & \frac{C_{f,i}^{n+1} - C_{f,i}^n}{\Delta t} - \frac{1}{2} \frac{D_f}{R_f} \left(\frac{C_{f,i-1}^{n+1} - 2C_{f,i}^{n+1} + C_{f,i+1}^{n+1}}{\Delta z^2} + \frac{C_{f,i-1}^n - 2C_{f,i}^n + C_{f,i+1}^n}{\Delta z^2} \right) + \\ & + \frac{1}{2} \frac{v}{R_f} \left(\frac{C_{f,i}^{n+1} - C_{f,i-1}^{n+1}}{\Delta z} + \frac{C_{f,i}^n - C_{f,i-1}^n}{\Delta z} \right) + \frac{1}{2} \lambda (C_{f,i}^{n+1} + C_{f,i}^n) + \frac{1}{2R_f b} (q_i^{n+1} + q_i^n) = 0 \end{aligned}$$

agrupando os termos e realizando a aproximação do termo $q_i^{n+1} \approx q_i^n$, obtém-se:

$$\begin{aligned} & C_{f,i-1}^{n+1} \left(-\frac{D_f \Delta t}{2R_f \Delta z^2} - \frac{v \Delta t}{2R_f \Delta z} \right) + C_{f,i}^{n+1} \left(1 + \frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} + \frac{v \Delta t}{2R_f \Delta z} + \frac{\lambda \Delta t}{2} \right) + C_{f,i+1}^{n+1} \left(-\frac{D_f \Delta t}{2R_f \Delta z^2} \right) = \\ & C_{f,i-1}^n \left(\frac{D_f \Delta t}{2R_f \Delta z^2} + \frac{v \Delta t}{2R_f \Delta z} \right) + C_{f,i}^n \left(1 - \frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} - \frac{v \Delta t}{2R_f \Delta z} - \frac{\lambda \Delta t}{2} \right) + C_{f,i+1}^n \left(\frac{D_f \Delta t}{2R_f \Delta z^2} \right) + q_i^n \left(-\frac{\Delta t}{R_f b} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

○ **Diferenças Progressivas no Termo Convectivo**

$$\begin{aligned} & \frac{C_{f,i}^{n+1} - C_{f,i}^n}{\Delta t} - \frac{1}{2} \frac{D_f}{R_f} \left(\frac{C_{f,i-1}^{n+1} - 2C_{f,i}^{n+1} + C_{f,i+1}^{n+1}}{\Delta z^2} + \frac{C_{f,i-1}^n - 2C_{f,i}^n + C_{f,i+1}^n}{\Delta z^2} \right) + \\ & + \frac{1}{2} \frac{v}{R_f} \left(\frac{C_{f,i+1}^{n+1} - C_{f,i}^{n+1}}{\Delta z} + \frac{C_{f,i+1}^n - C_{f,i}^n}{\Delta z} \right) + \frac{1}{2} \lambda (C_{f,i}^{n+1} + C_{f,i}^n) + \frac{1}{2R_f b} (q_i^{n+1} + q_i^n) = 0 \end{aligned}$$

agrupando os termos e realizando a aproximação do termo $q_i^{n+1} \approx q_i^n$, obtém-se:

$$\begin{aligned} & C_{f,i-1}^{n+1} \left(-\frac{D_f \Delta t}{2R_f \Delta z^2} \right) + C_{f,i}^{n+1} \left(1 + \frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} - \frac{v \Delta t}{2R_f \Delta z} + \frac{\lambda \Delta t}{2} \right) + C_{f,i+1}^{n+1} \left(\frac{v \Delta t}{2R_f \Delta z} - \frac{D_f \Delta t}{2R_f \Delta z^2} \right) = \\ & C_{f,i-1}^n \left(\frac{D_f \Delta t}{2R_f \Delta z^2} \right) + C_{f,i}^n \left(1 - \frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} + \frac{v \Delta t}{2R_f \Delta z} - \frac{\lambda \Delta t}{2} \right) + C_{f,i+1}^n \left(\frac{D_f \Delta t}{2R_f \Delta z^2} - \frac{v \Delta t}{2R_f \Delta z} \right) + q_i^n \left(-\frac{\Delta t}{R_f b} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

○ **Diferenças Centrais no Termo Convectivo**

$$\begin{aligned} & \frac{C_{f,i}^{n+1} - C_{f,i}^n}{\Delta t} - \frac{1}{2} \frac{D_f}{R_f} \left(\frac{C_{f,i-1}^{n+1} - 2C_{f,i}^{n+1} + C_{f,i+1}^{n+1}}{\Delta z^2} + \frac{C_{f,i-1}^n - 2C_{f,i}^n + C_{f,i+1}^n}{\Delta z^2} \right) + \\ & + \frac{1}{2} \frac{v}{R_f} \left(\frac{C_{f,i+1}^{n+1} - C_{f,i-1}^{n+1}}{2\Delta z} + \frac{C_{f,i+1}^n - C_{f,i-1}^n}{2\Delta z} \right) + \frac{1}{2} \lambda (C_{f,i}^{n+1} + C_{f,i}^n) + \frac{1}{2R_f b} (q_i^{n+1} + q_i^n) = 0 \end{aligned}$$

agrupando os termos e realizando a aproximação do termo $q_i^{n+1} \approx q_i^n$, obtém-se:

$$\begin{aligned}
& C_{f,i-1}^{n+1} \left(-\frac{D_f \Delta t}{2R_f \Delta z^2} - \frac{v \Delta t}{4R_f \Delta z} \right) + C_{f,i}^{n+1} \left(1 + \frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} + \frac{\lambda \Delta t}{2} \right) + C_{f,i+1}^{n+1} \left(\frac{v \Delta t}{4R_f \Delta z} - \frac{D_f \Delta t}{2R_f \Delta z^2} \right) = \\
& C_{f,i-1}^n \left(\frac{D_f \Delta t}{2R_f \Delta z^2} + \frac{v \Delta t}{4R_f \Delta z} \right) + C_{f,i}^n \left(1 - \frac{D_f \Delta t}{R_f \Delta z^2} - \frac{\lambda \Delta t}{2} \right) + C_{f,i+1}^n \left(\frac{D_f \Delta t}{2R_f \Delta z^2} - \frac{v \Delta t}{4R_f \Delta z} \right) + q_i^n \left(-\frac{\Delta t}{R_f b} \right)
\end{aligned}
\tag{B.11}$$

B.2 Rocha Matriz

Rearranjando a equação (3), tem-se:

$$\frac{\partial C_p(z, y, t)}{\partial t} - \frac{D_p}{R_p} \frac{\partial^2 C_p(z, y, t)}{\partial y^2} + \lambda C_p(z, y, t) = 0
\tag{B.12}$$

Aplicando as discretizações citadas na seção 4.3 para a equação (B.12), obtém-se:

B.2.1 Método de Euler Explícito

$$\frac{C_{p,i,j}^{n+1} - C_{p,i,j}^n}{\Delta t} - \frac{D_p}{R_p} \left(\frac{C_{p,i,j-1}^n - 2C_{p,i,j}^n + C_{p,i,j+1}^n}{\Delta y^2} \right) + \lambda C_{p,i,j}^n = 0$$

A expressão pode ser escrita na forma:

$$C_{p,i,j}^{n+1} = C_{p,i,j-1}^n \left(\frac{D_p \Delta t}{R_p \Delta y^2} \right) + C_{p,i,j}^n \left(1 - \frac{2D_p \Delta t}{R_p \Delta y^2} - \lambda \Delta t \right) + C_{p,i,j+1}^n \left(\frac{D_p \Delta t}{R_p \Delta y^2} \right) \quad (\text{B.13})$$

B.2.2 Método de Euler Implícito

$$\frac{C_{p,i,j}^{n+1} - C_{p,i,j}^n}{\Delta t} - \frac{D_p}{R_p} \left(\frac{C_{p,i,j-1}^{n+1} - 2C_{p,i,j}^{n+1} + C_{p,i,j+1}^{n+1}}{\Delta y^2} \right) + \lambda C_{p,i,j}^{n+1} = 0$$

A expressão pode ser escrita na forma:

$$C_{p,i,j-1}^{n+1} \left(-\frac{D_p \Delta t}{R_p \Delta y^2} \right) + C_{p,i,j}^{n+1} \left(1 + \frac{2D_p \Delta t}{R_p \Delta y^2} + \lambda \Delta t \right) + C_{p,i,j+1}^{n+1} \left(-\frac{D_p \Delta t}{R_p \Delta y^2} \right) = C_{p,i,j}^n \quad (\text{B.14})$$

B.2.3 Método de Crank-Nicolson

$$\frac{C_{p,i,j}^{n+1} - C_{p,i,j}^n}{\Delta t} - \frac{1}{2} \frac{D_p}{R_p} \left(\frac{C_{p,i,j-1}^{n+1} - 2C_{p,i,j}^{n+1} + C_{p,i,j+1}^{n+1}}{\Delta y^2} + \frac{C_{p,i,j-1}^n - 2C_{p,i,j}^n + C_{p,i,j+1}^n}{\Delta y^2} \right) + \frac{\lambda}{2} (C_{p,i,j}^{n+1} + C_{p,i,j}^n) = 0$$

A expressão pode ser escrita na forma:

$$C_{p,i,j-1}^{n+1} \left(-\frac{D_p \Delta t}{2R_p \Delta y^2} \right) + C_{p,i,j}^{n+1} \left(1 + \frac{D_p \Delta t}{R_p \Delta y^2} + \frac{\lambda \Delta t}{2} \right) + C_{p,i,j+1}^{n+1} \left(-\frac{D_p \Delta t}{2R_p \Delta y^2} \right) =$$

$$C_{p,i,j-1}^n \left(\frac{D_p \Delta t}{2R_p \Delta y^2} \right) + C_{p,i,j}^n \left(1 - \frac{D_p \Delta t}{R_p \Delta y^2} - \frac{\lambda \Delta t}{2} \right) + C_{p,i,j+1}^n \left(\frac{D_p \Delta t}{2R_p \Delta y^2} \right) \quad (\text{B.15})$$

CAPÍTULO 7

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ANDERSON, D.A., TANNEHILL, J.C., *Computacional Fluid Mechanics and Heat Transfer*, Hemisphere, New York, 1984.

BEAR, J., *Dynamics of Fluids in Porous Media*, Elsevier, New York, 1972.

BECKERS, J.M., (1992), "Analytical Linear Numerical Stability Conditions for an Anisotropic Three-Dimensional Advection-Diffusion Equation," *SIAM J. Numer. Anal., Society for Industrial and Applied Mathematics*, v.29, n.3, pp.701-713.

BUCKLEY, R.L., LOYALKA, S.K., WILLIAMS, M.M.R., (1993a), "Numerical Studies of Transport in Porous Media," *Annals of Nuclear Energy*, v.20, n.3, pp.203-224.

BUCKLEY, R.L., LOYALKA, S.K., WILLIAMS, M.M.R., (1993b), "Numerical Studies of Transport in Porous Media II: Picket Fence and Fracture Angle Models," *Annals of Nuclear Energy*, v.20, n.6, pp.421-431.

BUCKLEY, R.L., LOYALKA, S.K., WILLIAMS, M.M.R., (1993c), "Numerical Studies of Transport in Porous Media III: Radiosotope Migration in Fracture Angle Formations," *Annals of Nuclear Energy*, v.20, n.8, pp.569-584.

BUCKLEY, R.L., LOYALKA, S.K., (1993), "Numerical Studies of Transport in Porous Media: Numerical Studies of Advection/Diffusion in a Fracture and Diffusion in the Surrounding Rock Matrix," *Annals of Nuclear Energy*, v.20, n.10, pp.701-718.

BUCKLEY, R.L., LOYALKA, S.K. (1994), "Numerical Studies of Solute Transport in a Fracture Surrounding by Rock Matrix: Effect of Lateral Diffusion and Chemical Reaction on the Overall Dispersion," *Annals of Nuclear Energy*, v.21, n.8, pp.461-494.

CHAMBRE, P.L., PIGFORD, T.H., FUJITA, A., KANKI, T., et al., (1982), *Analytical Performance Models for Geologic Repositories*, LBL-14842 UCB-NE-4017 UC-70 Volume II, Lawrence Berkeley Laboratory and Department of Nuclear

Engineering, Berkeley, California.

CHAN, T.F., (1984), "Stability Analysis of Finite Difference Schemes for the Advection-Diffusion Equation," *SIAM J. Numer. Anal., Society for Industrial and Applied Mathematics*, v.21, n.2, pp.272-284.

CHIOU, S.L., LI, S.H. (1992), "Migration of Radionuclides in Fractured Porous Rock: Analytical Solution for a Flux-type Boundary Condition," *Nuclear Technology*, v.101, pp. 92-100.

CUNHA, A. , *Métodos Numéricos:para as Engenharias e Ciências Aplicadas*, Editora Unicamp, Campinas, 1993.

DAY, D.H., HUGHES, A.E., LEAKE,J.W., et al., (1985), "The Management of Radioactive Wastes," *Rep. Prog. Phys.*, v.48, pp.101-169.

FORTUNA, A.O., *Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos*, Edusp, São Paulo, 2000.

FREEZE, R.A., CHERRY, J.A., *Groundwater*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1979.

GARISTO, N.C, GARISTO, F. (1987), "The Effect of Precipitation on the Long-Term Release of Radionuclides from Used Fuel," *Annals of Nuclear Energy*, v.13, n.11, pp.591-596.

GRISAK, G.E., PICKENS, J.F. (1980), "Solute Transport Through Fractured Media: 1.The Effect of Matrix Diffusion," *Water Resource Research*, v.16, n.4, pp. 719-730.

HIRSCH, C., *Numerical Computation of Internal and External Flows*, Volume 1: Fundamentals of Numerical Discretization, John Wiley & Sons, 1992.

HÖLTTÄ, P., HAKANEN, M., HAUTOJÄRVI, et all., (1996), "The Effects of Matrix Diffusion on Radionuclide Migration in Rock Column Experiments," *Journal of Contaminant Hydrology*, 21, pp.165-173.

HÖLTTÄ, P.,SIITARI-KAUPPI, M., HAKANEN, M., et al., (1997), "Radionuclide Transport and Retardation in Rock Fracture and Crushed Rock Column Experiments," *Journal of Contaminant Hydrology*, 26, pp.135-145.

- JACOB, A. (2004), *Matrix Diffusion for Performance Assessment – Experimental Evidence, Modelling Assumptions and Open Issues*, PSI Bericht, No 04-08, ISSN 1019-0643, Nuclear Energy and Safety Research Department Laboratory for Waste Management.
- KBS-3 (1983), *Final Storage of Spent Nuclear Fuel – KBS-3*, Parts I-IV. SKBF/SKB. Swedish Nuclear Fuel and Waste Management Co. Stockholm, Sweden.
- LI, S.H., CHIOU, S.L. (1993), “Radionuclide Migration in Fractured Porous Rock: Analytical Solution for a Kinetic Solubility-Limited Dissolution Model,” *Nuclear Technology*, v.104, pp. 258-271.
- MALISKA, C.R., *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*, LTC – Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., Rio de Janeiro, 1995.
- NERETNIEKS, I. (1980), “Diffusion in the Rock Matrix: An Important Factor in Radionuclide Retardation?,” *Journal of Geophysical Research*, v.85, n.B8, pp.4379-4397.
- OECD Nuclear Energy Agency, *Progress Towards Geologic Disposal of Radioactive Waste: Where Do We Stand?*, Paris, 1999.
- PAYNE, T.E., AIREY, P.L. (2006) “Radionuclide Migration at the Koongarra Uranium Deposit, Northern Australia – Lessons from the Alligator Rivers Analogue Project,” *Physics and Chemistry of the Earth*, 31, pp.572-586.
- PRESS, H.W., TEUKOLSKY, S.A., VETTERLING, W.T., et al., (1992), *Numerical Recipes in Fortran*, 2 ed., New York, Cambridge University Press.
- RASMUSON, A., NERETNIEKS, I. (1981), “Migration of Radionuclides in Fractured Rock: The Influence of Micropore Diffusion and Longitudinal Dispersion,” *Journal of Geophysical Research*, v.86, n.B5, pp.3749-3758.
- Review of CoRWM Document No:682, *Deep Disposal – Current Position with Respect to Safety*, CoRWM, Document No: 472947, 2005.
- SILVEIRA, C.S., LIMA, Z.R., ALVIM, A.C.M. (2007a), “Radionuclide Migration: a Numerical Study,” *VIII ENAN – 8th Meeting on Nuclear Applications*, E06-1732, Santos, SP, Brasil, 30 de setembro a 5 de outubro.
- SILVEIRA, C.S., LIMA, Z.R., ALVIM, A.C.M. (2007b), “Uso do Termo Fonte Implícito nas Equações de Migração de Radionuclídeos,” *X EMC – 10^o Encontro de*

Modelagem Computacional, 0223-01, Nova Friburgo, RJ, Brasil, 21 a 23 de novembro.

SR 97 – Post-closure safety (1999), *Deep Repository for Spent Nuclear Fuel*, Vol.1, SKB TR-99-06. Swedish Nuclear Fuel and Waste Management CO., Stockholm, Sweden.

SULLIVAN, T. (2004), *Waste Container and Waste Package Performance Modeling to Support Safety Assessment of Low and Intermediate-Level Radioactive Waste Disposal*, BNL-74700-2005-IR, Brookhaven National Laboratory, Upton, New York.

TANG, D.H., FRIND, E.O., SUDICKY, E.A. (1981), "Contaminant Transport in Fractured Porous Media: Analytical Solution for a Single Fracture," *Water Resource Research*, Vol.17, No.3, pp.555-564.

LARSSON,A., PERS,K., SKAGIUS,K. AND DVERSTORP, B., *Phase 2: To Study Validation of Geosphere Transport Models for Performance Assessment of Nuclear Waste Disposal*, The International INTRAVAL Project, Summary Report, Swedish Nuclear Power Inspectorate and OECD/Nuclear Energy Agency, Paris.

VANDERGRAAF, T.T., DREW, D.J., MASUDA, S. (1996), "Radionuclide Migration Experiments in a Natural Fracture in a Quarried Block of Granite," *Journal of Contaminant Hydrology*, 21, pp.153-164.

WESSELING, P., (1996), "von Neumann Stability Conditions for the Convection-Diffusion Equation," *IMA Journal of Numerical Analysis*, 16, pp.583-598.

WILLIAMS, M.M.R. (1996), "Radionuclide Transport in Fractured Rock," *Progress in Nuclear Energy*, v.30, n.3, pp.243-253.