

EQUAÇÃO DE FOKKER-PLANCK PARA O CÁLCULO DA PROBABILIDADE  
DE INFILTRAÇÃO POR ÁGUA: APLICAÇÃO AO REPOSITÓRIO DE  
ABADIA-GOIÁS

Ludmila Gabcan

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

Orientador: Paulo Fernando Ferreira Frutuoso e  
Melo

Rio de Janeiro

Abril de 2019

EQUAÇÃO DE FOKKER-PLANCK PARA O CÁLCULO DA PROBABILIDADE  
DE INFILTRAÇÃO POR ÁGUA: APLICAÇÃO AO REPOSITÓRIO DE  
ABADIA-GOIÁS

Ludmila Gabcan

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

Examinada por:

---

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

---

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

---

Prof. Celso Marcelo Franklin Lapa, D.Sc.

---

Prof. Carlos André Vaz Júnior, D.Sc.

---

Prof. Antonio José da Silva Neto, Ph.D.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

ABRIL DE 2019

Gabcan, Ludmila

Equação de Fokker-Planck para o Cálculo da Probabilidade de Infiltração por Água: Aplicação ao Repositório de Abadia-Goiás/ Ludmila Gabcan. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2019.

XII, 39 p.: il.; 29,7 cm.

Orientador: Paulo Fernando Ferreira Frutuoso e Melo

Tese (Doutorado) – UFRJ/COPPE/Programa de Engenharia Nuclear, 2019.

Referências Bibliográficas: p. 32-36.

1. Equação de Fokker-Planck. 2. Método de Trotter  
3. Repositório de rejeitos radioativos. 4. Infiltração por água. I. Melo, Paulo Fernando Ferreira Frutuoso e II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Nuclear. III. Título.

“O seu foco determina sua realidade.”

*Qui-Gon Jin - Star Wars I*

*Ao meu pai, Karel  
(em memória), por seu amor e  
por sempre acreditar em mim.  
E às minhas “crianças” de patas,  
minhas companheiras de jornada,  
por seu amor incondicional.*

## AGRADECIMENTOS

A Deus, a fé que me deu forças e coragem sempre.

Aos meus amores, minhas crianças de patas, sempre ao meu lado com seu amor incondicional, amores de patas e focinhos que me acordavam, e não me deixavam cair de cansaço, quando tinha que trabalhar, a vocês meu amor sempre presente.

Às amigas Rosa, Elaine e as meninas, que me apoiaram e ajudaram, sempre de coração, em todos os momentos.

A todos os novos amigos e amigas que fiz durante o período acadêmico na área nuclear, em especial, ao amigo Paulo Cheriff, por sua amizade, apoio e incentivo sempre presentes, desde a primeira disciplina cursada até o final, e nesta última etapa, à Lilian, pelo apoio e carinho dispensados, e ao André Augusto pela colaboração e paciência dedicadas.

Ao Professor Edson de Pinho e ao amigo Marcelo que me incentivaram a iniciar o doutorado na área nuclear.

Ao meu orientador, Professor Paulo Fernando Ferreira Frutuoso e Melo, pelos ensinamentos, paciência e colaboração, que muito contribuíram para o meu crescimento profissional e que foram fundamentais na realização desta tese.

Ao D.Sc. Antônio Sérgio de Martin Alves por sua colaboração e prontidão sempre presentes, indispensáveis para a realização desta tese.

Aos Professores Fernando de Carvalho da Silva e José Antônio Carlos Canedo de Medeiros, pela colaboração e sugestões relevantes para elaboração desta tese.

Aos Professores Antônio José da Silva Neto, Carlos André Vaz Júnior e Celso Marcelo Franklin Lapa, pela honra de tê-los na banca examinadora, pelas sugestões e contribuições, em especial ao Professor Eduardo Gomes Dutra do Carmo, pelas discussões técnicas no aprimoramento desta tese.

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

A todos que contribuíram para a realização desta tese.

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

EQUAÇÃO DE FOKKER-PLANCK PARA O CÁLCULO DA PROBABILIDADE  
DE INFILTRAÇÃO POR ÁGUA: APLICAÇÃO AO REPOSITÓRIO DE  
ABADIA-GOIÁS

Ludmila Gabcan

Abril/2019

Orientador: Paulo Fernando Ferreira Frutuoso e Melo

Programa: Engenharia Nuclear

A pesquisa desenvolvida pode ser classificada como um problema de análise de segurança nuclear inserido na área de gerenciamento de riscos relativos a rejeitos radioativos. A modelagem simples e eficiente foi construída tendo como foco desenvolver a Eq. de Fokker-Planck para o cálculo de atributos de confiabilidade necessários para a tomada de decisão com informação de risco, envolvidos na análise de infiltração por água no interior do Repositório situado em Abadia-Goiás. A solução da Eq. de Fokker-Planck foi obtida de forma analítica através do Método de Trotter, produzindo como resultados dados de probabilidades associados ao aumento da coluna de líquido infiltrado por água. A modelagem foi unidimensional, e os cálculos realizados para o centro geométrico da cripta do repositório, local de maior sensibilidade de ocorrência de cenários acidentais, podendo, desta forma, ser estendidos aos demais locais na cripta, sem perda de generalidade. Os resultados atribuem as maiores chances de ocorrência em torno de 0,80m de altura de líquido infiltrado, uma fração da altura da cripta que corresponde a menos de 19% da sua altura total interna, os dados agregam elementos que podem ser utilizados por especialistas na apreciação de problemas relativos a cenários de risco relacionados à deposição de rejeitos radioativos.

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

FOKKER-PLANCK EQUATION FOR THE CALCULATION OF THE  
PROBABILITY OF WATER INFILTRATION: AN APPLICATION TO THE  
ABADIA-GOIÁS REPOSITORY

Ludmila Gabcan

April/2019

Advisor: Paulo Fernando Ferreira Frutuoso e Melo

Department: Nuclear Engineering

The research developed can be classified as a nuclear safety analysis problem inserted in the field of risk management of radioactive waste. The simple and efficient modeling was constructed with the objective of developing the Fokker-Planck Eq. for the calculation of the reliability attributes required for risk-informed decision-making, involved in the analysis of water infiltration inside the repository located in Abadia - Goiás. The solution of the Fokker-Planck Equation was obtained analytically through the Trotter method, producing as results probability data associated with the increase of probability the column of liquid infiltrated by water. The modeling was unidimensional, and the calculations were performed for the geometric center of the repository crypt, place of greater sensitivity of occurrence of accidental scenarios, thus being able to be extended to the other places in the crypt, without loss of generality. The results attributed the highest chances of occurrence to 0.80m of infiltrated liquid height, a fraction of the crypt height that corresponds to less than 19% of its total internal height. Such data add elements height such that can be used by experts on the problem of risk scenarios related to the disposal of radioactive waste.

## SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO.....	01
2. DESCRIÇÃO DO PROBLEMA .....	04
2.1 O REPOSITÓRIO DE ABADIA-GOIÁS .....	04
2.2 EQUAÇÃO DE FOKKER-PLANCK APLICADA AO PROBLEMA DE INFILTRAÇÃO POR ÁGUA NO REPOSITÓRIO DE ABADIA-GOIÁS .....	09
3. MÉTODO DE TROTTER.....	14
4. METODOLOGIA.....	16
5. RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	26
6. CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES.....	29
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....	32
APÊNDICE A - Prova da Fórmula de Trotter.....	37

## ÍNDICE DE FIGURAS

<b>FIGURA</b>	<b>PÁGINA</b>
<b>Figura 2.1</b> - Depósito 1 (a esquerda) de Grande Porte e Depósito 2 (a direita) para rejeitos de baixa e média atividade.	05
<b>Figura 2.2</b> - Embalagens de rejeitos para fontes exauridas (a esquerda) e operação de compactação de rejeitos sólidos (a direita)	05
<b>Figura 2.3</b> - Planta do arranjo dos embalados	06
<b>Figura 2.4</b> - À direita, um corte lateral da cripta, com eixo $x(m)$ posicionado no centro da estrutura da cripta, e à esquerda, um corte da estrutura de concreto com infiltração de água e degradação: do teto, do material de enchimento e dos embalados com rejeitos radioativos	09
<b>Figura 2.5</b> - Representação esquemática de caminhos possíveis à partir uma condição inicial	11
<b>Figura 4.1</b> - Etapas da metodologia	16
<b>Figura 5.1</b> - Superfície $P(x,t)$ aplicada ao problema de infiltração por água no Repositório de Abadia-Goiás	26
<b>Figura 5.2</b> - Curva $p(x)$ distribuição de probabilidade aplicada ao problema de infiltração por água no Repositório de Abadia-Goiás	27

## ÍNDICE DE TABELAS

<b>TABELA</b>	<b>PÁGINA</b>
<b>Tabela 2.1</b> - Panorama com Relatórios Técnicos e Pesquisas desenvolvidas na construção e efetivação do Repositório de Abadia-Goiás	06
<b>Tabela 2.2</b> - Dados numéricos do Repositório de Abadia-Goiás	07
<b>Tabela 6.1</b> - Vantagens e Desvantagens observadas no uso do Método de Trotter	30

## LISTA DE SÍMBOLOS

### *Nomenclatura*

$A_b$  = área interna da base do repositório, [m<sup>2</sup>];

$b_1$  = largura da base do repositório, [m];

$b_2$  = comprimento da base do repositório, [m];

$E$  = espessura da base do repositório, [m];

$e'$  = taxa de evapotranspiração, [m/a];

$F_d$  = função de degradação do teto do repositório;

$i'_r$  = taxa de irrigação no repositório, [m/a];

$K_c$  = condutividade hidráulica do concreto, [m/a];

$L$  = espessura das paredes do repositório, [m];

$n_1$  = porosidade interna do repositório;

$p'_m$  = taxa de precipitação pluviométrica média, [m/a];

$r'$  = taxa de escoamento de água tangente à superfície do terreno, [m/a];

$x$  = altura da coluna líquida no interior do repositório [m];

$y = x_0$  = altura inicial da coluna líquida no interior do repositório [m];

$t$  = tempo, [a];

$k$  = variável da transformada de Fourier;

$n$  = intervalo  $[1, \infty)$ ;

$b_a(t)$  = função arbitrária de  $t$ ;

$A$  = operadores matriciais;

$B$  = operadores matriciais;

$C$  = operadores matriciais;

$\max$  = maior valor;

$\text{Mat}_n$  = matriz de ordem  $n$ ;

$\mathbb{C}$  = conjunto dos complexos;

$P(x,0)$  – condição inicial na Eq. de Fokker-Planck;

$P(x,t)$  = solução da Eq. de Fokker-Planck;

$P'(x',t')$  = estado anterior;

$P'(x',t')$  = estado anterior;

$p(x)$  = densidade de probabilidades associada a Eq. de Fokker-Planck;

$r$  = radionuclídeos;

$L_i$  = operadores infinitesimais;

$T$  = solução da Fórmula de Trotter (Método de Trotter);

$A_1(x)$  = coeficiente de arraste;

$A_2(x)$  = coeficiente de difusão;

$X_t$  = valores pontuais de altura da coluna de líquido infiltrado, de acordo com o tempo;

$X'_t(x', t')$  = estado anterior;

$X_t(x, t)$  = estado posterior;

$g_1(t)$  = função de  $t$ ;

$g_2(t)$  = função de  $t$ ;

$g_3(t)$  = função de  $t$ ;

$u(x)$  = função de 1º grau em  $x$ ;

***Parâmetros de Engenharia Civil que compõem a estrutura física do repositório que são definidos por equações:***

$$a = \frac{K_c}{n_1 A_b} \frac{(b_1 + b_2)}{L}, [m^{-1}, a^{-1}];$$

$$b = \frac{K_c}{n_1 E} [a^{-1}];$$

$$c = \frac{1}{n_1} (K_c \cdot F_d \cdot (p_m + i'_r - e' - r')) [m/a];$$

***Variáveis auxiliares nas manipulações algébricas:***

$d; k_3; k_5; k_a; i; \theta; \beta; \Upsilon;$

# CAPÍTULO 1

## Introdução

Atualmente, novas tecnologias são facilitadoras com relação à busca contínua de soluções para um desenvolvimento econômico, social e sua consequente demanda crescente de energia associada, seja com relação a novos consumos, indústria, modernização da agricultura, etc. Como afirma CAMACHO (2010), a energia que uma fonte nuclear produz se mostra mais limpa ao ser comparada às outras fontes de energia disponíveis, pois seu impacto ambiental é menor, porém existe uma grande preocupação com a atividade nuclear na etapa de sua produção e principalmente com o destino final dos seus resíduos. Tal questão se reflete amplamente na mídia, no tratamento e no armazenamento reservado aos rejeitos, um ponto importante para a continuação da tecnologia nuclear como uma das opções de geração de energia elétrica, é a solução que as autoridades responsáveis de cada país destinam aos seus rejeitos radioativos (MOREIRA et al, 2006).

Os rejeitos radioativos já preparados para sua deposição são produzidos em forma sólida, porém estes podem apresentar alguma quantidade de gases e/ou líquidos em sua composição, mas esta quantidade relativa deve estar de acordo com o órgão licenciador do país a que pertence (ALVES,2014). O único repositório para rejeitos radioativos, atualmente, no Brasil, encontra-se na cidade de Abadia de Goiás, localizada a 22km de Goiânia, trata-se de um repositório construído próximo à superfície e destinado à deposição dos rejeitos radioativos oriundos do acidente radiológico de Goiânia, ocorrido em setembro de 1987, com uma cápsula de Cs<sup>137</sup>. Nesta pesquisa, o Repositório de Abadia-Goiás foi o escolhido para a aplicação do método utilizado por possibilitar a obtenção de todos os dados pertinentes ao problema.

Estudos de casos em cenários de infiltração constam em projetos de licenciamento de repositórios de suas medidas de desempenho, de seu monitoramento, entre outras exigências pertencentes às regulamentações vigentes de cada país, no caso do Brasil, tais regulamentações ficam sob responsabilidade da CNEN (Comissão Nacional de Energia Nuclear). O limite de dose efetiva anual deve ser de 0,3mSv em repositórios de rejeitos radioativos, conforme orientam a CNEN (2011) e IAEA

(International Atomic Energy Agency) (2011). As maiores preocupações com relação a cenários de infiltração são devidas a possíveis efeitos que podem ocorrer advindos de: evoluções tectônicas, sismicidade, variações climáticas, etc. (CNEN, 1991; RICHARD e DUGUID, 2008; ALVES, 2014).

O curso de águas subterrâneas é um dos mais prováveis caminhos para os contaminantes liberados de áreas de deposição de rejeitos radioativos, no caso de ocorrer uma migração de radionuclídeos ao longo de um aquífero, as consequências quando chegam a um possível consumidor podem (ONISHI, 2008; RICHARD e DUGUID, 2008; ALVES, 2014):

- Incluir um eventual consumo de água contaminada com doses potencialmente danosas aos seres humanos, através da contaminação de água potável, poços artesianos e de alimentos;
- Contaminar o solo de superfícies como mangues e praias;
- Contaminar a água de animais silvestres que dependam de água da região ou mesmo de animais de fazendas próximas.

O objetivo geral desta pesquisa é aplicar a Eq. de Fokker-Planck para o cálculo de atributos de confiabilidade necessários para a tomada de decisão com informação de risco envolvidos na análise de infiltração por água no interior do repositório situado em Abadia-Goiás, e apresenta como objetivos específicos:

- Considerando a Eq. de Fokker-Planck e suas soluções analíticas, resolver a Eq. de Fokker-Planck proposta para o problema de infiltração por água no Repositório de Abadia-Goiás através do Método de Trotter;
- Produzir resultados na forma de densidade de probabilidade com relação aos valores de nível de água infiltrada em função do tempo, no repositório situado em Abadia-Goiás, a fim de produzir elementos que possam ser utilizados por especialistas na apreciação de problemas relativos a cenários de risco relacionados à deposição de rejeitos radioativos.

A pesquisa desenvolvida pode ser considerada como um problema de análise de segurança nuclear inserido na área de gerenciamento de riscos relativos a rejeitos radioativos. O uso da Eq. de Fokker-Planck na modelagem desenvolvida nesta pesquisa para o problema de infiltração por água no Repositório de Abadia-Goiás foi motivado, como afirma RISKEN (1984), pelo fato da Eq. de Fokker-Planck descrever em sua

solução dependente do tempo, não apenas as propriedades estacionárias do sistema, mas descrever também, a dinâmica do próprio sistema, desta forma, seu uso não se restringe a sistemas que estejam em equilíbrio, ou próximos a ele. Sobre a sua utilização no problema de infiltração por água no Repositório de Abadia-Goiás, AGUIAR (2006) e AGUIAR et al (2007) afirmam que a avaliação da segurança de um repositório e seus correspondentes aspectos relacionados à deposição de rejeitos radioativos, como: valores de seus parâmetros e ocorrência de eventos podem ser feitos por análise probabilística.

A originalidade deste tema está na solução da Eq. de Fokker-Planck aplicada ao problema de infiltração por água no Repositório de Abadia-Goiás com sua resolução determinada de forma analítica através do Método de Trotter, e na sua implantação de dados e parâmetros de entrada, e consequente geração de gráficos, foi utilizado o pacote MatLab<sup>®</sup>. A simplicidade na modelagem realizada nesta pesquisa está presente na sua forma unidimensional, e na geometria considerada para a construção do modelo, onde foi considerado o local de maiores chances de ocorrência no aumento da coluna de líquido infiltrado no interior da cripta do repositório, e onde também, é o local onde foram armazenados os embalados de maior atividade. Desta forma, sem perda de generalidade, suas considerações podem ser estendidas de forma eficiente aos demais locais geométricos da cripta do repositório.

Esta pesquisa está dividida em seções que apresentam: no Capítulo 2, a descrição do problema, com subseções sobre as características do Repositório de Abadia-Goiás e a Eq. de Fokker-Planck aplicada ao problema de Infiltração por água no repositório; o Método de Trotter encontra-se no Capítulo 3 e, no Capítulo 4 a metodologia usada; em seguida, os Capítulos 5 e 6 com os resultados e discussões, e as conclusões e recomendações, respectivamente, e o Apêndice A, o qual apresenta uma prova desenvolvida nesta pesquisa para a Fórmula do Produto de Trotter estendida a três operadores.

# CAPÍTULO 2

## Descrição do Problema

Este capítulo trata dos aspectos do problema de infiltração por água no Repositório de Abadia-Goiás, iniciando na subseção 2.1 com as características do repositório e seus dados. Na subseção 2.2 são apresentadas a geometria considerada para a sua resolução e a Eq. de Fokker-Planck aplicada ao problema.

A Eq. de Fokker-Planck foi utilizada nesta pesquisa para o cálculo da probabilidade associada ao problema de infiltração por água na cripta do Repositório de Abadia-Goiás, mais precisamente, a fim de calcular a probabilidade de que a infiltração por água ocasione um aumento da coluna líquida no interior da cripta do repositório. Isso significa em termos físicos que, se esta por sua vez atingir a altura máxima correspondente à altura interna da estrutura da cripta, poderá ocorrer uma migração de contaminantes para o curso de águas subterrâneas, com a possibilidade do transporte de radionuclídeos em doses potencialmente danosas ao ecossistema da região.

### 2.1 - O Repositório de Abadia-Goiás

O único repositório construído no Brasil se encontra na cidade de Abadia de Goiás, localizada em Goiânia, construído em virtude do acidente radiológico com o  $Cs^{137}$  ocorrido em setembro de 1987; trata-se do Repositório de Abadia-Goiás, inaugurado em junho de 1997, o qual possui as seguintes características (ALVES et al, 2015):

- Estrutura subterrânea de concreto;
- Material de enchimento utilizado para aumentar a rigidez da estrutura interna e retardar a migração de radionuclídeos a possíveis aquíferos;
- Barreiras no teto com camadas de material permeável e impermeável;
- Os embalados contidos no repositório foram distribuídos de forma que, os de maior nível de atividade estejam dispostos no centro e no nível inferior da estrutura.

- Os vazios entre os embalados e as paredes do repositório são preenchidos por um composto de argila e areia com estabilidade química e estrutural comprovados geológica e geoquimicamente através de ensaios (TRANJAN FILHO et al, 1997).

As Figuras 2.1 a 2.3 apresentam detalhes de sua construção.



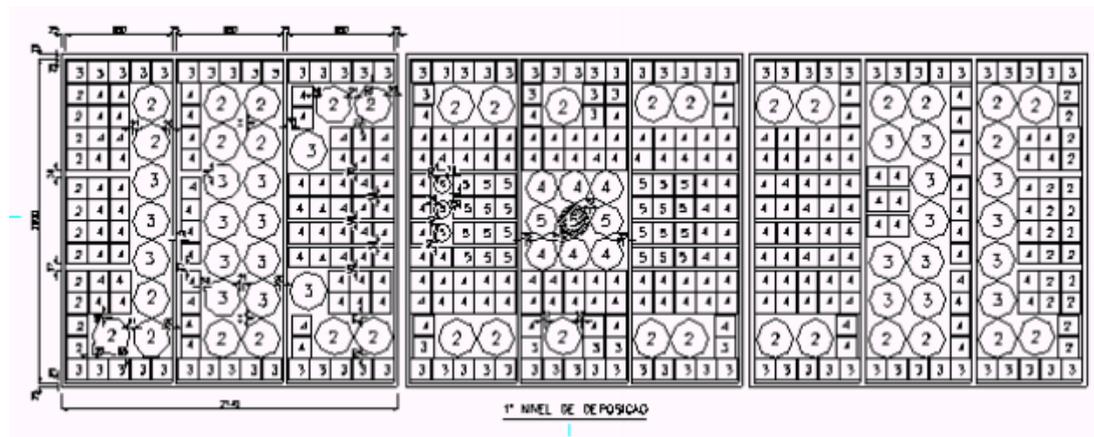
**Figura 2.1** - Depósito 1 (à esquerda) de grande porte e Depósito 2 (à direita) para rejeitos de baixa e média atividade

Fonte: MOREIRA et al (2006)



**Figura 2.2** – Embalagens de rejeitos para fontes exauridas (à esquerda) e operação de compactação de rejeitos sólidos (à direita)

Fonte: CNEN (1996)



**Figura 2.3** - Planta do arranjo dos embalados

Fonte: TRANJAN FILHO et al (1997)

O Repositório de Abadia-Goiás cumpriu várias etapas necessárias a sua construção e efetivação, tal processo foi meticuloso e gerou diversos relatórios técnicos, trabalhos acadêmicos, etc. Alguns desses trabalhos associados ao repositório podem ser vistos na Tabela 2.1:

**Tabela 2.1** – Panorama com Relatórios Técnicos e Pesquisas desenvolvidas na construção e efetivação do Repositório de Abadia-Goiás

XAVIER et al 1992	BRANCO et al 1998	MIAW et al 1997	PEIXOTO e JACOMINO 1999	TRANJAN FILHO et al 1997	ALVES (2014) e ALVES et al 2015
Cálculo conservador das espessuras das barreiras de segurança necessárias para o repositório.	Modelos de simulação do transporte de radionuclídeos no aquífero da região do repositório.	Registro e gerência de informações referentes aos rejeitos, enfatizando o controle ambiental e institucional do repositório em um prazo de 50 anos.	Programa de Monitoração Ambiental do repositório, relacionados à dose equivalente efetiva para indivíduos do público, para diferentes caminhos críticos de exposição do homem à radiação.	Principais critérios, metodologia, soluções e parâmetros que foram utilizados no projeto do repositório, compõem desde o <u>Relatório de Análise de Segurança, até detalhes de tarefas de engenharia.</u>	Análise de segurança em <u>cenários sobre infiltração por água no interior do repositório.</u>

Na Tabela 2.1, somente a primeira coluna, o relatório de XAVIER et al (1992) sobre estudos técnicos com respeito às barreiras de segurança do repositório foi realizado durante a etapa de construção do repositório, os demais seguiram-se após a efetivação do mesmo, e tratam-se de documentos de vários autores com relatórios e estudos de monitoramento, medidas de desempenho, simulações, etc. que versam sobre o estudo de

dozes, controle ambiental e institucional, entre outros projetos de análise de segurança do repositório e sua funcionalidade.

O Repositório de Abadia-Goiás foi o escolhido para a aplicação do método utilizado nesta pesquisa, pois, possibilitou a obtenção de todos os dados pertinentes ao problema. A Tabela 2.2 ilustra os dados numéricos relacionados à estrutura física da cripta do repositório (ALVES, 2014):

**Tabela 2.2** - Dados numéricos do Repositório de Abadia-Goiás

Dados	Valor
$A_b$ = área interna da base do repositório, [m <sup>2</sup> ];	1,1760.10 <sup>3</sup>
$b_1$ = largura da base do repositório, [m];	60,0000
$b_2$ = comprimento da base do repositório, [m];	19,6000
$E$ = espessura da base do repositório, [m];	0,2000
$e'$ = taxa de evapotranspiração, [m/a];	1,4570
$F_d$ = função degradação do teto do repositório;	0,1000
$i'_r$ = taxa de irrigação no repositório, [m/a];	0
$K_c$ = condutividade hidráulica do concreto, [m/a];	3,1500.10 <sup>-4</sup>
$L$ = espessura das paredes do repositório, [m];	0,2000
$n_1$ = porosidade interna do repositório;	0,1000
$p'_m$ = taxa de precipitação pluviométrica média, [m/a];	1,5920
$r'$ = taxa de escoamento de água tangente à superfície do terreno, [m/a];	0
$x$ = altura da coluna líquida no interior do repositório, [m];	[0,0002;4,3800]
$y = x_0$ = valor inicial da altura de líquido infiltrado, [m].	0,0001

Fonte: ALVES (2014)

Os dados da Tabela 2.2 compõem os parâmetros de engenharia civil relacionados à estrutura física da cripta, os parâmetros  $a$ ,  $b$  e  $c$  que foram utilizados na Eq. de Fokker-Planck aplicada ao problema de infiltração por água no Repositório de Abadia-Goiás. As características da referida equação consideradas na sua resolução são

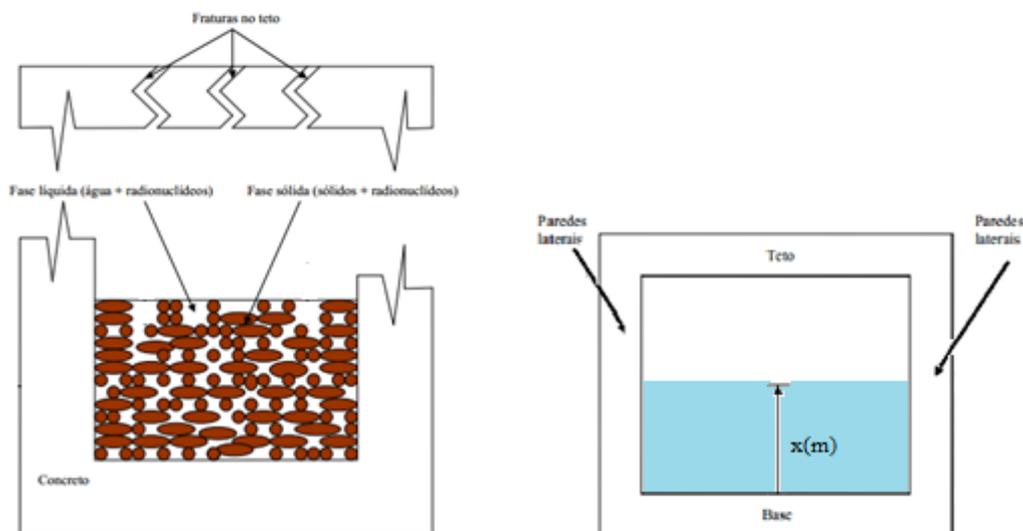
apresentadas na subseção 2.2. Os parâmetros  $a$ ,  $b$  e  $c$  com seus dados especificados na Tabela 2.2, se apresentam na forma das equações:

$$a = \frac{K_c}{n_1 A_b} \frac{(b_1 + b_2)}{L}, [m^{-1}, a^{-1}]; \quad (2.1)$$

$$b = \frac{K_c}{n_1 E} [a^{-1}]; \quad (2.2)$$

$$c = \frac{1}{n_1} (K_c \cdot F_d \cdot (p_m + i'_r - e' - r')) [m/a]; \quad (2.3)$$

Em geral, para uma dada geometria, o processo de infiltração é tridimensional. As bordas de uma estrutura física como a cripta do repositório têm efeito benéfico, pois o fluido tende a ser aderente às paredes, minimizando a sua penetração no solo. Portanto, se o processo é assumido como unidimensional (considerando  $x$  (m) a altura da coluna de líquido infiltrado) e localizado no centro geométrico da cripta do repositório, onde as suas condições de amplitude são superiores e a probabilidade de penetração é maior do que a real, o esquema é conservador para a análise em questão, podendo ser estendido aos demais locais no interior da cripta, sem perda de generalidade. A Figura 2.4 apresenta um corte lateral da cripta, sendo à esquerda, um corte da estrutura de concreto com infiltração de água e degradação: do teto, do material de enchimento e dos embalados com rejeitos radioativos, e à direita um corte ilustrando o eixo  $x$ (m) referente à altura de líquido infiltrado, posicionado no centro geométrico da cripta.



**Figura 2.4** - À direita, um corte lateral da cripta, com eixo  $x(m)$  posicionado no centro da estrutura da cripta, e à esquerda, um corte da estrutura de concreto com infiltração de água e degradação: do teto, do material de enchimento e dos embalados com rejeitos radioativos

Fonte: Alves (2014)

Desta forma, pode-se analisar através dos dados de probabilidade advindos da solução da Eq. de Fokker-Planck, com modelagem unidimensional para o problema de infiltração por água no repositório, se fisicamente a coluna de líquido infiltrado aumentará de tal maneira a valores significativos, tais que haja uma conseqüente migração de contaminantes para o curso de águas subterrâneas, ocasionando danos ao ecossistema da região.

## 2.2 - Eq. de Fokker-Planck aplicada ao Problema de infiltração por água no Repositório de Abadia-Goiás

A Eq. de Fokker-Planck foi usada, primeiramente, como forma de descrever o que seria chamado o Movimento Browniano das partículas, movimento este, atribuído ao movimento aleatório de grãos de pólen suspensos em meio líquido, observado em seus estudos pelo botânico Robert Brown. O pesquisador observou que tais partículas se moviam de forma aleatória, independentemente se o meio líquido estivesse ou não, em

equilíbrio, e cada partícula tinha seu movimento próprio, independente do movimento das demais partículas. HOTTOVY (2011) afirma que as probabilidades associadas a processos estocásticos podem ser determinadas com o uso da Eq. de Fokker-Planck, um fenômeno que apresenta processos independentes, e cada partícula possui seu movimento e intervalo de tempo próprios, possibilita que o sistema seja descrito de forma estocástica, por meio de variáveis macroscópicas que flutuam de forma aleatória, desta forma, resolver a Eq. de Fokker-Planck significa, pois, calcular a média dessas variáveis macroscópicas. Através da referida equação, pode-se encontrar a densidade de probabilidade  $P(x,t|x_0)$  da partícula estar entre  $x$  e  $x+\Delta x$ , no instante de tempo  $t$ , a partir do instante inicial  $(x_0,t_0)$ , porém mesmo que esta condição inicial seja conhecida, alguns caminhos são mais prováveis de ocorrer que outros, assim sua evolução futura somente é dependente do seu estado atual e de sua densidade de probabilidades (ABIONA, 2008; VAN KAMPEN, 2007).

A Eq. de Fokker-Planck pode ser escrita em sua forma padrão (VAN KAMPEN, 2007):

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = (A_1(x)) \frac{\partial}{\partial x} P(x,t) + (A_2(x)) \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x,t) \quad (2.4)$$

Para  $A_1(x)$  e  $A_2(x)$  sendo funções reais e diferenciáveis, com  $A_1(x) \geq 0$  e  $A_2(x) > 0$ .

O membro direito da Eq. de Fokker-Planck apresenta termos que descrevem processos físicos diferentes, motivo pelo qual, a Eq. de Fokker-Planck é considerada como uma Eq. Convectiva-Difusiva:

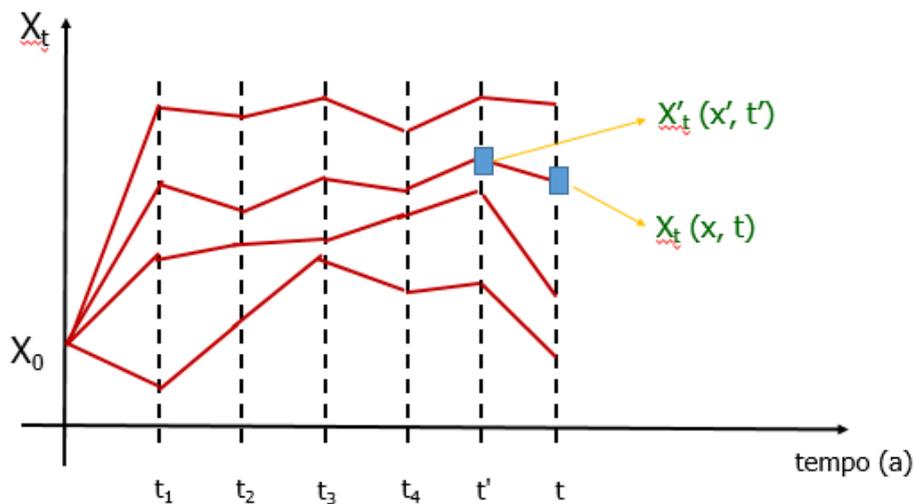
- O primeiro termo do membro direito é chamado de termo de convecção ou termo de arraste, com  $A_1(x)$  denominado de coeficiente de arraste;
- O segundo termo do membro direito é conhecido como termo de flutuação, com  $A_2(x)$  denominado de coeficiente de difusão.

Efeitos do ruído podem ser associados à Eq. de Fokker-Planck e são denominados, no caso da distribuição espectral ser dependente ou não da frequência (ROSSATO, 2009):

- Ruído branco é aquele que independe da frequência;
- Ruído colorido, apresenta termos que são dependentes de uma ou várias frequências.

ALVES (2014) desenvolveu através de sua pesquisa uma modelagem com resultados que fornecem os valores pontuais de  $X_t$  para cada valor de tempo  $t$ , para o cenário de infiltração por água no Repositório de Abadia-Goiás, onde  $x(m)$  foi utilizado para representar a altura da coluna de líquido no interior da cripta e com  $x_0 \neq 0$ , a altura inicial da coluna de líquido em  $t = 0$ . A Eq. de Fokker-Planck relacionada ao problema de infiltração por água no Repositório de Abadia-Goiás foi utilizada para o cálculo de probabilidade associada a este mesmo cenário de ALVES (2014), nos cálculos de densidade de probabilidade associada ao aumento da altura inicial da coluna de líquido infiltrado na cripta do repositório e, consequentes possibilidades de que esta venha a ultrapassar os limites da altura máxima interna da cripta, vindo a ocasionar uma migração de contaminantes para o curso de águas subterrâneas, com doses potencialmente danosas ao ecossistema da região

Existem vários caminhos possíveis ou trajetórias, como são chamados em qualquer processo estocástico, como a evolução de espessura de corrosão, o nível de água em um lago, etc. A Figura 2.5 apresenta uma representação esquemática de caminhos ou trajetórias possíveis, a partir de uma condição inicial, onde  $X'_t(x', t')$  representa o estado anterior e,  $X_t(x, t)$  o estado posterior.



**Figura 2.5** - Representação esquemática de caminhos possíveis à partir uma condição inicial

Em decorrência deste fato, a condição inicial para a Eq. de Fokker-Planck no cenário de infiltração por água no Repositório de Abadia-Goiás é da forma de uma delta

de Dirac, pois apesar das trajetórias possíveis, existe um único valor a partir de  $t = 0$ , para a altura da coluna de líquido infiltrado, e para esta é utilizado um valor fixo igual a  $x_0$ . Assim a condição inicial  $P(x,0)$  é da forma:

$$P(x, 0) = \delta(x - y) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} e^{iky} dk \quad (2.5)$$

Com:  $x$  = a altura de líquido infiltrado;

$y = x_0$ , valor inicial;

$k$  = variável da Transformada de Fourier.

A condição inicial  $P(x,0)$  ser apresentada como uma delta de Dirac é em correspondência ao problema modelado por ALVES (2014) em sua pesquisa, mas a delta de Dirac na representação por Transformada de Fourier é devida à modelagem desenvolvida por VALSAKUMAR (1983), na qual foi baseada a modelagem para a resolução analítica via Método de Trotter da Eq. de Fokker-Planck aplicada ao problema desenvolvido nesta pesquisa.

Considere-se a Eq. de Fokker-Planck (ALVES, 2014):

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = (2ax + b)P(x, t) + (ax^2 + bx + c) \frac{\partial}{\partial x} P(x, t) + \left( \frac{F_d^2}{2n_1^2} \right) \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t) \quad (2.6)$$

A Eq. de Fokker-Planck aplicada ao modelo é do tipo:

- Linear- todos os termos presentes na equação não possuem coeficientes em função de  $t$ ;
- Não-homogênea – o coeficiente de arraste da equação, no segundo termo do membro direito, possui uma função de 2º grau em  $(x)$ , dada por:  $(ax^2 + bx + c)$ ;
- Unidimensional – a equação é somente a uma variável  $(x)$ , como todas as equações de Fokker-Planck apresentam dependência no tempo, é padrão contar e atribuir o número de dimensões, sem considerar na contagem de dimensões a variável  $(t)$  atribuída ao tempo;
- Ruído branco – o último termo do membro direito da equação apresenta coeficiente de difusão constante  $= \left( \frac{F_d^2}{2n_1^2} \right)$ .

O Eixo ( $x$ ), relativo à altura da coluna de líquido infiltrado, localizado no centro geométrico da cripta do repositório e os parâmetros  $a$ ,  $b$  e  $c$  na Eq. de Fokker-Planck são importantes, pois, além de serem relativos à estrutura física da cripta do repositório, são os mesmos utilizados por ALVES (2014), e:

- Parâmetros  $a$ ,  $b$  e  $c$  associam a Eq. de Fokker-Planck ao problema de infiltração por água no Repositório de Abadia-Goiás;
- Parâmetro  $c$  constante, pois a função degradação do teto do repositório  $F_d$  é constante (condição de contorno).

# Capítulo 3

## Método de Trotter

O Método de Trotter ou Fórmula de Trotter é o método de resolução analítica utilizado nesta pesquisa como método de solução para a Eq. de Fokker-Planck aplicada ao problema de infiltração por água no Repositório de Abadia-Goiás. É um método simples atribuído a TROTTER (1959) que baseia-se na teoria de semigrupos e possui uma aproximação que pode ser estendida a uma soma finita de operadores infinitesimais, que comutam ou não entre si. Para explicitar o método, considere-se a Fórmula de Trotter, a seguir, onde  $L_i$  é a soma de operadores infinitesimais:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = L_i T; \quad i = 1,2 \quad (3.1)$$

Reescrevendo com relação a  $P(x,t)$ :

$$\frac{\partial P}{\partial t}(x, t) = L_i P(x, t); \quad i = 1,2 \quad (3.2)$$

A solução para  $P(x,t)$  é a equação escrita no formato para o Método de Trotter, para o caso de dois operadores infinitesimais:

$$P(x, t) = e^{tL_i} P(x, 0); \quad i = 1,2 \quad (3.3)$$

Onde, considera-se, de acordo com TROTTER(1959):

$$e^{A+B} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left( e^{\frac{A}{n}} e^{\frac{B}{n}} \right)^n \quad (3.4)$$

O Método de Trotter pode ser aplicado nos casos em que os operadores infinitesimais comutam ou não entre si, a manipulação algébrica aplicada em cada caso difere consideravelmente, porém em ambos os casos, a solução para  $P(x,t)$  não pode ser expressa em termos dos produtos das funções, ou operadores exponenciais envolvidos. É

importante frisar que os operadores infinitesimais  $L_i$  podem ou não comutar entre si, porém tal propriedade não é estendida aos operadores exponenciais  $e^{tL_i}$ , que necessariamente devem ser manipulados algebricamente, na sequência (na ordem) em que aparecem na equação.

Se  $T$  for o operador integral expressando a solução da Eq. de Fokker-Planck, considere-se (ROCHA, 2014; LEMOS e MOURA, 2004):

$$T = e^{g_1(t)L_1} e^{g_2(t)L_2} e^{g_3(t)L_3} \quad (3.5)$$

Esta modelagem matemática, no formato da Eq. (3.5), foi aplicada por ROCHA (2014); LEMOS e MOURA (2004) e LEMOS et al (2018) e desenvolvida em casos onde os operadores  $L_i$  comutam entre si.

Agora reescrevendo-se a Eq. (3.4) em termos para a solução de  $P(x,t)$  estendida a três operadores  $L_i$ , no formato para o Método de Trotter, tem-se:

$$P(x, t) = \lim_{n \rightarrow \infty} (e^{\left(\frac{t}{n}\right)L_1} \cdot e^{\left(\frac{t}{n}\right)L_2} \cdot e^{\left(\frac{t}{n}\right)L_3})^n \cdot P(x, 0) \quad (3.6)$$

No Apêndice A apresenta-se o desenvolvimento de uma prova da Fórmula de Trotter estendida a três operadores infinitesimais.

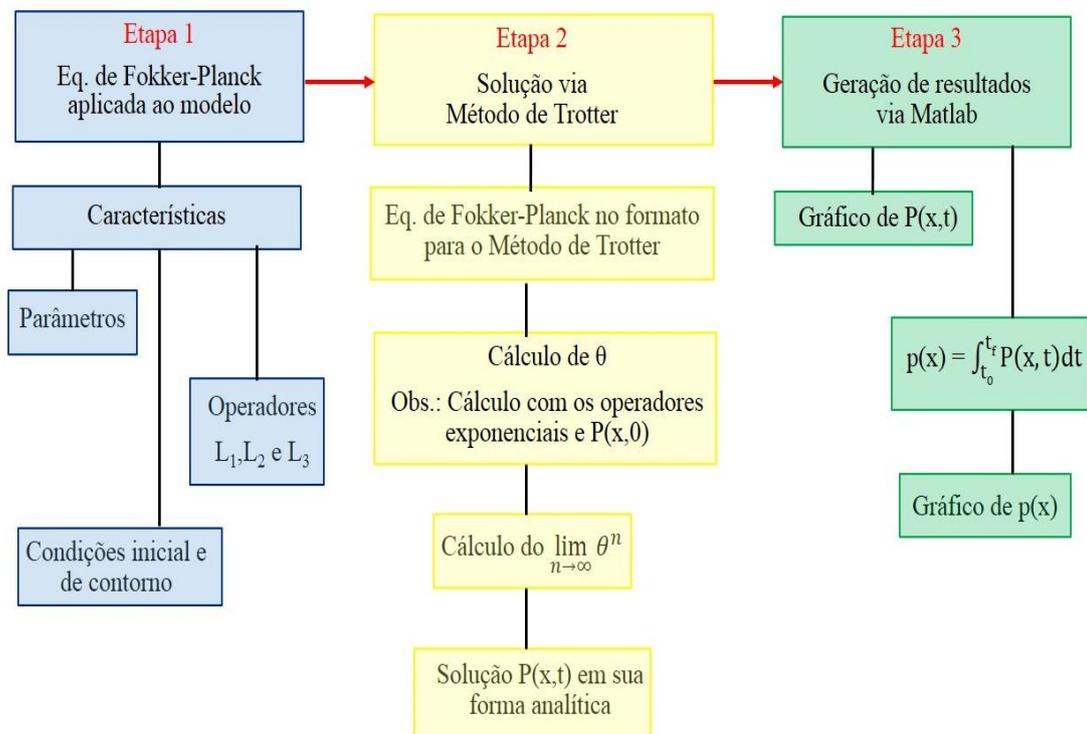
DROZDOV (1992) cita que uma função arbitrária  $b_a(t)$  surge de acordo com as diferentes formas em que o operador exponencial  $e^{tL_i}$  pode ser aproximado para uma dada ordem em  $t$ , sendo, assim, necessário determinar uma escolha ótima para  $b_a(t)$ . Para o caso linear, como o referido autor comenta, a escolha ótima seria  $b_a(t) = t$ , e concorda exatamente com a escolha desenvolvida por VALSAKUMAR (1983) para a modelagem matemática para a resolução da Eq. de Fokker-Planck via a Fórmula de Trotter, no caso de  $L_i$  operadores não comutativos entre si. A modelagem desenvolvida por VALSAKUMAR (1983) foi a utilizada como método de solução analítica para a Eq. de Fokker-Planck aplicada ao problema de infiltração por água no Repositório de Abadia-Goiás desenvolvida nesta pesquisa, e sua modelagem é descrita em detalhes no Capítulo 4, referente à metodologia.

# Capítulo 4

## Metodologia

A metodologia desenvolvida nesta pesquisa consistiu em aplicar, como método de solução analítica, o Método de Trotter ou Fórmula de Trotter, baseado na modelagem utilizada por VALSAKUMAR (1983), na resolução da Eq. de Fokker-Planck aplicada ao modelo de análise de segurança de ALVES (2014) para a infiltração por água no Repositório de Abadia-Goiás, com produção de resultados em dados de probabilidade correspondentes ao aumento da altura ( $x$ ) da coluna de líquido infiltrado, localizada no centro geométrico da cripta do repositório.

As três etapas que constituem a metodologia são ilustradas na Figura 4.1, e podem ser descritas, como: 1) Eq. de Fokker-Planck aplicada ao modelo; 2) Solução via Método de Trotter; e 3) Geração de resultados via Matlab®.



**Figura 4.1:** Etapas da metodologia

### **Etapa 1: Eq. de Fokker-Planck aplicada ao modelo**

Nesta etapa encontram-se as características que compõem a Eq. de Fokker-Planck aplicada ao modelo (vide subseção 2.2)), tal equação proposta por ALVES (2014) é do tipo linear, não-homogênea, unidimensional e com ruído branco, na forma:

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = (2ax + b)P(x,t) + (ax^2 + bx + c) \frac{\partial}{\partial x} P(x,t) + \left( \frac{F_d^2}{2n_1^2} \right) \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x,t) \quad (2.6)$$

A Eq. (2.6) possui as seguintes características:

- ✓ Parâmetros a, b e c especificados na Tabela 2.2:

$$a = \frac{K_c}{n_1 A_b} \frac{(b_1 + b_2)}{L}, [m^{-1}, a^{-1}]; \quad (2.1)$$

$$b = \frac{K_c}{n_1 E} [a^{-1}]; \quad (2.2)$$

$$c = \frac{1}{n_1} (K_c \cdot F_d \cdot (p_m + i'_r - e' - r')) [m/a]; \quad (2.3)$$

- ✓ Condição de contorno:

A função degradação do teto do repositório é constante,  $F_d(t) = F_d$ ;

- ✓ Condição inicial:

$$P(x, 0) = \delta(x - y) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} e^{iky} dk \quad (2.5)$$

Com  $y = x_0$ , valor inicial e, k a variável da transformada de Fourier.

- ✓ Operadores  $L_1$ ,  $L_2$  e  $L_3$  que não comutam entre si:

$$L_1 = (2ax + b) \quad (4.1)$$

$$L_2 = (ax^2 + bx + c) \frac{\partial}{\partial x} \quad (4.2)$$

$$L_3 = \frac{F_d^2}{2n_1^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad (4.3)$$

- ✓ Eixo (x), relativo à altura da coluna de líquido infiltrado, localizado no centro geométrico da cripta do repositório.

O período de tempo utilizado:  $t \in [0,300]$ , com  $t$  (anos), é o período de Controle Institucional estipulado por TRANJAN FILHO et al (1997), e determinado pelos autores através de análises de cenários que permitiram uma estimativa de dose em função do tempo pós-deposição dos recipientes de rejeitos radioativos no interior das estruturas de concreto do repositório.

Existe uma correspondência com a modelagem realizada por ALVES (2014) que valida a metodologia desta pesquisa, e esta se verifica ao serem utilizados:

- Mesmo cenário: infiltração por água pelo teto, base e paredes;
- Todos os parâmetros e dados numéricos são os mesmos;
- Mesma Hipótese: condição de contorno dada por  $F_d(t) = F_d = \text{constante}$ ;
- Condição inicial: dada por delta de Dirac, devido ao fato de que existe por definição, um único valor em  $t = 0$  para a altura da coluna de líquido infiltrado;
- Altura da coluna de líquido infiltrado (x) aplicada também ao centro geométrico da cripta do repositório.

## **Etapa 2: Solução via Método de Trotter**

Esta etapa é a mais extensa das três que compõem a metodologia e através dela é que, efetivamente, encontrou-se a solução analítica para a Eq. de Fokker-Planck, via Método de Trotter, tendo como base a modelagem utilizada por VALSAKUMAR (1983).

Os subitens que compreendem esta etapa, vide Figura 4.1, podem ser resumidos, como: escrever a Eq. de Fokker-Planck, Eq. (2.6), em formato requerido para o Método de Trotter; manipular algebricamente os operadores exponenciais, a condição inicial e o limite presentes em  $P(x,t)$ , após esta ter sido escrita no formato para o Método de Trotter; e finalmente, escrever  $P(x,t)$  na forma de sua solução analítica encontrada.

Desta forma, considere-se a solução  $P(x,t)$  dada por:

$$P(x, t) = e^{tL_i} P(x, 0); \quad i = 1, 2, 3 \quad (4.4)$$

Onde  $P(x, 0)$  é condição inicial de  $P(x, t)$ .

A Fórmula de Trotter estendida a três operadores:

$$e^{L_1+L_2+L_3} = \lim_{n \rightarrow \infty} (e^{(\frac{1}{n})L_1} \cdot e^{(\frac{1}{n})L_2} \cdot e^{(\frac{1}{n})L_3})^n \quad (4.5)$$

$$\text{Mas, se: } \theta^n = (e^{(\frac{t}{n})L_1} \cdot e^{(\frac{t}{n})L_2} \cdot e^{(\frac{t}{n})L_3})^n \quad (4.6)$$

Assim, da Eq. (4.4) e Eq.(4.6) pode-se escrever:

$$P(x, t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \theta^n P(x, 0) \quad (4.7)$$

E, finalmente:

### **$P(x, t)$ em sua forma requerida para o Método de Trotter**

$$P(x, t) = \lim_{n \rightarrow \infty} (e^{(\frac{t}{n})L_1} \cdot e^{(\frac{t}{n})L_2} \cdot e^{(\frac{t}{n})L_3})^n P(x, 0) \quad (3.6)$$

Com a condição inicial dada por:

$$P(x, 0) = \delta(x - y) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} e^{iky} dk \quad (2.5)$$

Onde  $y = x_0$ , valor inicial e,  $k$  a variável da transformada de Fourier.

### **Cálculo de $\Theta$**

Assim, seguindo a modelagem matemática proposta em VALSAKUMAR (1983), considere-se  $\theta$ , em termos dos parâmetros e dados (vide Tabela 2.2) do problema de infiltração por água no Repositório de Abadia-Goiás:

$$\theta = e^{((\frac{t}{n})(2ax+b))} \cdot e^{((\frac{t}{n})(ax^2+bx+c)\frac{\partial}{\partial x})} \cdot e^{((\frac{t}{n})(\frac{F_d^2}{2n_1^2})(\frac{\partial^2}{\partial x^2}))} \quad (4.8)$$

Com os três operadores exponenciais, dados por:

$$\text{Primeiro operador exponencial: } e^{((\frac{t}{n})(2ax+b))} \quad (4.9)$$

$$\text{Segundo operador exponencial: } e^{((\frac{t}{n})(ax^2+bx+c)\frac{\partial}{\partial x})} \quad (4.10)$$

$$\text{Terceiro operador exponencial: } e^{((\frac{t}{n})(\frac{F_d^2}{2n_1^2})(\frac{\partial^2}{\partial x^2}))} \quad (4.11)$$

Elevando a Eq. (4.8) a n:

$$\theta^n = \left[ e^{((\frac{t}{n})(2ax+b))} \cdot e^{((\frac{t}{n})(ax^2+bx+c)\frac{\partial}{\partial x})} \cdot e^{((\frac{t}{n})(\frac{F_d^2}{2n_1^2})(\frac{\partial^2}{\partial x^2}))} \right]^n \quad (4.12)$$

Substituindo a Eq. (4.12) na Eq. (3.6) e considerando-se a condição inicial

$P(x,0)$ :

$$P(x,t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \theta^n \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} e^{iky} dk \quad (4.13)$$

Com  $y = x_0$ , valor inicial e,  $k$  a variável da transformada de Fourier.

Mas:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \theta^n e^x = \lim_{n \rightarrow \infty} \theta^n \int_{-\infty}^{+\infty} e^x dx = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \theta^n e^x dx \quad (4.14)$$

Para simplificar, considere:

$$\frac{t}{n} = d \quad (4.15)$$

$$\frac{F_d^2}{2n_1^2} \cdot d = k_3 \quad (4.16)$$

Assim, substituindo na Eq. (4.8):

$$\theta = e^{(d(2ax+b))}.e^{(d(ax^2+bx+c)\frac{\partial}{\partial x})}.e^{\left(k_3\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)} \quad (4.17)$$

Para encontrar a solução de P(x,t) é necessário considerar os operadores exponenciais e a condição inicial, na ordem em que aparecem, pois, os operadores  $L_i$  podem comutar ou não, mas necessariamente os operadores exponenciais não comutam. Desta forma, aplicando  $e^{(-ikx)}$  ao terceiro operador exponencial (WILCOX, 1967), encontra-se:

$$e^{\left(k_3\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)}.e^{(-ikx)} \quad (4.18)$$

$$\begin{aligned} e^{k_3\frac{\partial^2}{\partial x^2}}e^{-ikx} &= \left[1 + k_3\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2!}k_3^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \dots\right]e^{-ikx} \\ &= \left[e^{-ikx} + k_3\frac{\partial^2}{\partial x^2}(e^{-ikx}) + \frac{1}{2!}k_3^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}[e^{-ikx}] + \dots\right] \\ &= e^{-ikx} + [-k_3k^2e^{-ikx}] + \frac{1}{2!}[k_3^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}[-k^2e^{-ikx}]] + \dots \\ &= e^{-ikx} - k_3k^2e^{-ikx} - \frac{1}{2!}(k_3)^2k^4e^{-ikx} + \dots \\ &= e^{-ikx} + (-k_3k^2)e^{-ikx} + \left(\frac{-k_3^2k^4}{2!}\right)e^{-ikx} + \dots \\ &= \left[1 + (-k_3k^2) + \frac{1}{2!}(-k_3k^2)^2 + \dots\right]e^{-ikx} \end{aligned}$$

E:

$$e^{k_3\frac{\partial^2}{\partial x^2}}.e^{-ikx} = e^{-k_3k^2-ikx} \quad (4.19)$$

Aplicando a Eq. (4.19) ao segundo operador exponencial (WILCOX, 1967):

$$e^{d(ax^2+bx+c)\frac{\partial}{\partial x}} e^{(-k_3k^2-ikx)} \quad (4.20)$$

Onde da Eq. (4.20), considera-se somente:

$$\begin{aligned} & e^{d(ax^2+bx+c)\frac{\partial}{\partial x}} \cdot e^{(-ikx)} \\ &= [1 + d(ax^2 + bx + c)\frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{2!}d^2(ax^2 + bx + c)^2\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \dots] \cdot e^{-ikx} \\ &= [e^{-ikx} + d(ax^2 + bx + c)\frac{\partial}{\partial x}(e^{-ikx}) + \frac{1}{2!}d^2(ax^2 + bx + c)^2\frac{\partial}{\partial x}[\frac{\partial}{\partial x}(e^{-ikx})] \\ &\quad + \dots] \\ &= e^{-ikx} + d(ax^2 + bx + c)(-ik)e^{-ikx} + \frac{d^2}{2!}(ax^2 + bx + c)\frac{\partial}{\partial x}(-ike^{-ikx}) + \dots \\ &= e^{-ikx} + d(ax^2 + bx + c)(-ik)e^{-ikx} + \frac{d^2}{2!}(ax^2 + bx + c)(-ik)^2e^{-ikx} + \dots \\ &= [1 + d(ax^2 + bx + c)(-ik) + \frac{d^2}{2!}(ax^2 + bx + c)^2(-ik)^2 + \dots]e^{-ikx} \end{aligned}$$

Multiplicando pelo termo  $e^{-k_3k^2}$ , pertencente à Eq. (4.20), encontra-se:

$$e^{-k_3k^2} e^{d(ax^2+bx+c)(-ik)} e^{-ikx} \quad (4.21)$$

Por fim, considerando que o primeiro operador exponencial é da forma:

$$e^{d(2ax+b)} = e^{u(x)} \quad (4.22)$$

Onde,  $u(x)$  é apenas uma equação de 1º em  $x$ , logo não se faz necessária a mesma manipulação algébrica realizada anteriormente, com relação aos outros dois operadores exponenciais, então:

$$\theta e^{-ikx} = e^{-k_3 k^2} e^{d(2ax+b+(ax^2+bx+c))(-ik)} e^{-ikx} \quad (4.23)$$

Para  $\theta^n$  a Eq. (4.23) toma a forma:

$$\theta^n e^{-ikx} = [e^{-k_3 k^2} e^{d(2ax+b+(ax^2+bx+c))(-ik)}]^n \cdot e^{-ikx} \quad (4.24)$$

### Cálculo do $\lim_{n \rightarrow \infty} \theta^n e^{-ikx}$

Substituindo:  $d = \frac{t}{n}$  e aplicando o limite a Eq.(4.24):

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \theta^n e^{-ikx} &= \lim_{n \rightarrow \infty} e^{-tk_3 k^2} \cdot e^{t(2ax+b+(ax^2+bx+c))(-ik)} \cdot e^{-ikx} \\ &= e^{-tk_3 k^2} e^{t(2ax+b+(ax^2+bx+c))(-ik)} \cdot e^{-ikx} \end{aligned} \quad (4.25)$$

Assim, a solução para  $P(x,t)$  pode reescrita, como:

$$P(x,t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-tk_3 k^2} e^{t(2ax+b+(ax^2+bx+c))+x-y} dk \quad (4.26)$$

Para:

$$k_5 = \frac{F_d^2}{2n_1^2} \quad (4.27)$$

E:

$$k_a^2 = [t(2ax + b + (ax^2 + bx + c)) + x - y]^2 \quad (4.28)$$

A solução de  $P(x,t)$  pode ser reescrita como:

$$P(x,t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-k_5 t k^2} e^{(-ik)(k_a)} dk \quad (4.29)$$

Desta forma  $P(x,t)$  pode ser encontrada em tabela de solução de integral (DEBNATH e BHATTA,2007):

$$P(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2tk_5}} \exp\left(\frac{-k_a^2}{4k_5}\right) \quad (4.30)$$

Substituindo  $k_5$  Eq.(4.27) e  $k_a$  Eq. (4.28):

$$P(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2t \frac{F_d^2}{2n_1^2}}} \exp\left(\frac{\left(-\left(t(2ax+b+(ax^2+bx+c))+x-y\right)^2\right)}{\frac{4F_d^2}{2n_1^2}}\right) \quad (4.31)$$

### Solução de $P(x,t)$ na sua forma analítica

Assim, a solução de  $P(x,t)$  na sua forma analítica é da forma:

$$P(x,t) = \frac{n_1}{F_d} \frac{1}{\sqrt{t}} \exp\left(\frac{\left(-\left(t(2ax+b+(ax^2+bx+c))+x-y\right)^2\right)}{\frac{2F_d^2}{n_1^2}}\right) \quad (4.32)$$

### Etapa 3: Geração de resultados via Matlab®

Após obtenção da forma analítica de  $P(x,t)$ , foi utilizado o pacote Matlab® para a implantação numérica dos dados (vide Tabela 2.2) na Eq. (4.32) e geração de resultados.

A integral com relação a  $t$  da solução analítica para  $P(x,t)$  aplicada ao problema produz como resultado a curva  $p(x)$ , que é a distribuição de probabilidades associada à variação da coluna de líquido infiltrado, no interior da cripta do repositório. A distribuição de probabilidades  $p(x)$  associada à densidade de probabilidades  $P(x,t)$  foi obtida integrando  $P(x,t)$  com relação a  $t$ , com limites de tempo relativos ao período institucional, em  $t_0 = 0$  e  $t_f = 300$ .

A solução para  $p(x) = \int_{t_0}^{t_f} P(x,t)dt$  foi obtida diretamente através do pacote Matlab®, e pode ser vista na Eq. (4.33):

$$p(x) = \int_{t_0}^{t_f} dt \frac{n_1}{F_d} \frac{1}{\sqrt{t}} \exp\left(\frac{\left(-\left(t(2ax+b+(ax^2+bx+c))+x-y\right)^2\right)}{\frac{2F_d^2}{n_1^2}}\right) \quad (4.33)$$

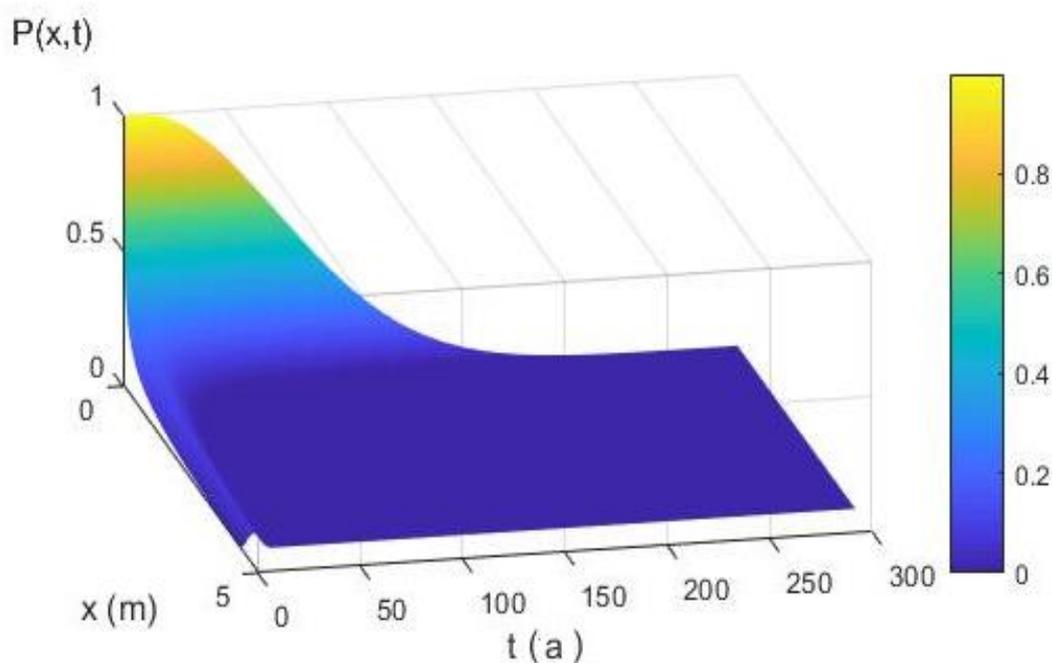
Onde:  $y = x_0$  é o valor inicial da altura de líquido.

Foi utilizado também o pacote Matlab<sup>®</sup> para a implantação numérica dos dados em  $p(x)$  (vide Tabela 2.2) e geração de resultados. Através da análise dos resultados apresentados pela curva  $p(x)$  é possível encontrar as probabilidades associadas aos níveis da coluna de líquido infiltrado e suas possíveis consequências, como a possibilidade de migração de radionuclídeos para o curso de águas subterrâneas, com doses potencialmente danosas ao ecossistema da região.

# Capítulo 5

## Resultados e Discussões

A solução da Eq. de Fokker-Planck fornece como resultados a densidade de probabilidade condicional entre dois estados, o estado  $P'(x', t')$  e o estado  $P(x, t)$  posterior. Desta forma, através da integral com relação a  $t$  da solução analítica para  $P(x, t)$ , vide etapa 3 do Capítulo 6 sobre a metodologia, é possível encontrar os valores de distribuição de probabilidade  $p(x)$  associados à altura de líquido infiltrado, até a altura limite dada pela altura interna da cripta do repositório, ao longo da faixa de tempo institucional de 0 a 300 anos. A Figura 5.1 ilustra a superfície  $P(x, t)$  dada pela Eq. (4.32), com seu gráfico gerado através do MatLab®.

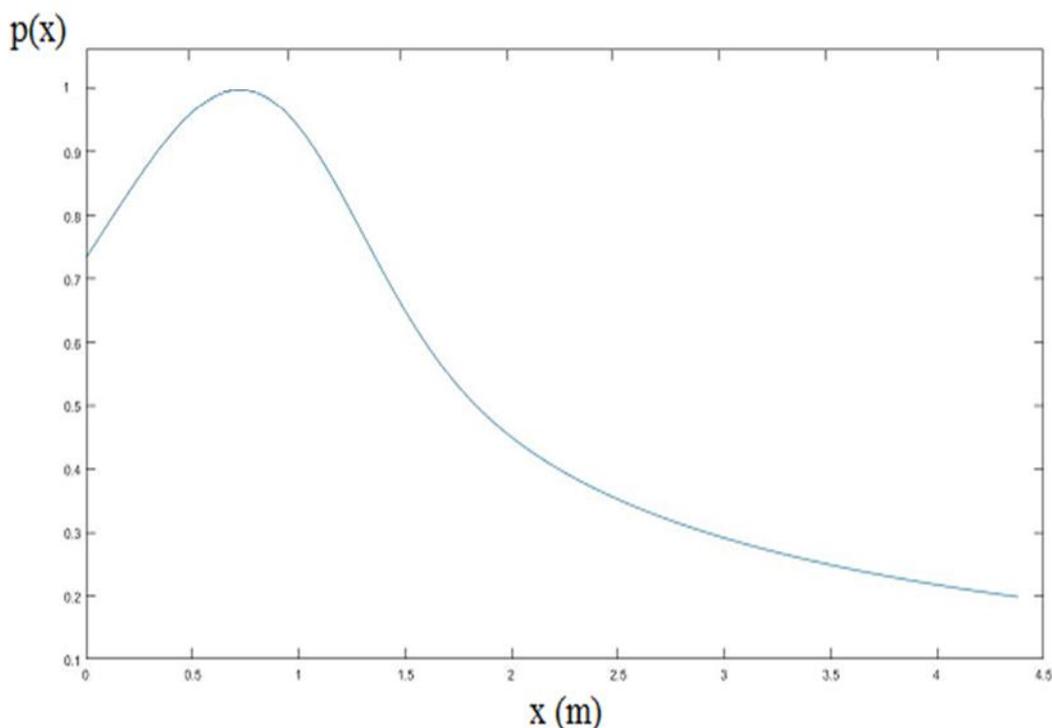


**Figura 5.1** – Superfície  $P(x, t)$  aplicada ao problema de infiltração por água no Repositório de Abadia-Goiás

A Figura 5.1 mostra o comportamento da superfície  $P(x, t)$ , onde se pode perceber que os maiores valores de probabilidade estão associados aos menores valores de nível

da altura da coluna de líquido infiltrado ( $x$ ), indicando, assim, que as maiores chances de ocorrência não estão associadas a um possível transbordamento da coluna de líquido infiltrado.

Na Figura 5.2 é ilustrada a curva  $p(x)$  dada pela Eq. (4.33), tal curva apresenta o maior valor de probabilidade de ocorrência de aumento da coluna de líquido infiltrado associado a valores em torno de  $x=0,80\text{m}$ . Após esse valor máximo na curva, os valores de probabilidade tendem a diminuir vertiginosamente, conforme os valores para os níveis da coluna de infiltrado ( $x$ ) tendem a aumentar.



**Figura 5.2** – Curva  $p(x)$  distribuição de probabilidade aplicada ao problema de infiltração por água no Repositório de Abadia-Goiás

Os resultados aqui obtidos são importantes e agregam informações relevantes quanto ao gerenciamento de risco do repositório, quando da ocorrência de uma infiltração por água, tais resultados apresentam novas informações com relação a qual nível na altura da coluna de líquido infiltrado possui maiores chances de ocorrência, tendo como limite superior a altura total interna da cripta. Estes dados relativos à integridade estrutural da cripta e sua funcionalidade, dados tão necessários a estudos de gerenciamentos de riscos, indicam quais seriam as possibilidades de que haja migração do  $\text{Cs}^{137}$  para o lençol freático, auxiliando a tomada de decisão feita por especialistas de segurança na área

nuclear. Então, considerando-se que a faixa de valores correspondente à altura da estrutura interna da cripta é de 0,0001m a 4,38m (vide Tabela 2.2), o valor de 0,80m é uma altura considerável se comparada ao valor inicial de 0,0001m, mas representa um preenchimento com menos de 19% de líquido infiltrado, com relação à altura total no interior da cripta, o que significa dizer que tais valores não indicam uma migração de contaminantes atingindo o lençol freático, durante o período de tempo institucional de 300 anos, considerado nesta pesquisa.

# Capítulo 6

## Conclusões e Recomendações

Uma simplicidade reside no fato de que a modelagem foi construída de forma unidimensional, e na geometria considerada para a construção do modelo, o centro geométrico da estrutura da cripta do repositório é o local de maiores chances de ocorrência do aumento da coluna de líquido infiltrado. Este é, também, o local onde foram armazenados os embalados de maior atividade. Os resultados foram obtidos pela modelagem desse pior cenário, com mais chances de ocorrência e, portanto, suas considerações podem ser estendidas de forma eficiente aos demais locais geométricos da cripta do repositório, sem perda de generalidade.

Os resultados apresentados nesta pesquisa apontam que as maiores chances são de que a coluna de líquido infiltrado atinja valores em torno de 0,80m de altura. Isto significa, em termos físicos, afirmar que se a altura da coluna de líquido infiltrado não atingir seu valor máximo, correspondente à altura da estrutura interna da cripta, não haverá consequente migração de contaminantes para o lençol freático. Assim, a modelagem apresenta resultados que corroboram e agregam valores aos relatórios técnicos e estudos anteriores, como os citados na Tabela 2.1, que versam sobre a integridade estrutural do repositório e suas funcionalidades.

A modelagem utilizada se mostrou simples e eficiente, porém algumas limitações encontram-se associadas a uma possível complexidade na solução analítica da Eq. de Fokker-Planck para o problema pesquisado, pois a sua solução analítica passaria de simples a complexa, se:

- Com relação aos parâmetros oriundos do Repositório de Abadia-Goiás para a Eq. de Fokker-Planck (vide subseção 2.1 e Tabela 2.2):
  - ✓  $F_d$  não for constante, mas  $F_d(t)$ : isso implicaria numa modificação na condição de contorno, o parâmetro  $c$  deixaria de ser constante e passaria a ser  $c(t)$ ;
  - ✓ Se os parâmetros  $a$  e  $b$  tomarem a forma de funções ou a forma matricial;

- Houver um acréscimo de outras dimensões à Eq. de Fokker-Planck: uma Eq. de Fokker-Planck bidimensional  $P(x,r,t)$ , onde  $x$  seria a altura da coluna de líquido infiltrado e  $r$ , a concentração de contaminantes.

A Tabela 6.1 apresenta um panorama sobre as vantagens e desvantagens observadas no uso do Método de Trotter como forma de solução analítica para a Eq. de Fokker-Planck aplicada ao problema de infiltração por água no Repositório de Abadia-Goiás:

**Tabela 6.1** – Vantagens e Desvantagens observadas no uso do Método de Trotter

VANTAGENS	DESVANTAGENS
<ul style="list-style-type: none"> <li>• O Método de Trotter apresenta a vantagem de permitir que uma Eq. de Fokker-Planck seja resolvida analiticamente.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Quando a Eq. de Fokker-Planck não se apresenta na forma linear, o Método de Trotter ainda possui a vantagem de permitir que a equação tenha solução analítica, porém, apresenta a desvantagem de ser necessária, como em VALSAKUMAR (1983) e DROZDOV (1992), uma manipulação algébrica um pouco mais complexa. Seria necessária uma manipulação algébrica mais complexa, se na Eq. de Fokker-Planck aplicada ao problema <math>F_d</math> não fosse constante.</li> </ul>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• A Eq. de Fokker-Planck para o problema se apresenta na forma linear e unidimensional, assim a solução analítica via Método de Trotter é encontrada mais facilmente.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Uma desvantagem é a necessidade de se refinar a modelagem, através de uma escolha ótima para a função de <math>t</math>, associada ao Método de Trotter, para o caso de uma Eq. de Fokker-Planck não linear, como afirma DROZDOV (1992).</li> </ul>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• A Eq. de Fokker-Planck para o problema possui poucos parâmetros (vide subseção 2.1 e Tabela 2.2) e uma variável associada (<math>x</math>), tal fato simplifica a solução analítica via Método de Trotter.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• No caso de uma Eq. de Fokker-Planck apresentar muitos parâmetros e/ou variáveis associadas, a solução na forma numérica é a opção sugerida na literatura, como citado em RISKEN (1984).</li> </ul>

Com relação a sugestões para trabalhos futuros:

- Considerando que os parâmetros de entrada para modelagem do problema são parâmetros da concepção e estrutura do Repositório de Abadia-Goiás, mas são parâmetros comuns encontrados em repositórios com a mesma finalidade, seria útil aplicar a modelagem a outros repositórios;
- Aplicar uma modelagem com solução numérica da Eq. de Fokker-Planck associada ao cenário de ocorrência de riscos estudado, para o caso da condição de contorno  $F_d(t)$ , a função degradação do teto não ser mais constante e sim variável no tempo, apesar de tal modelagem tornar complexa a sua forma de solução. Esta nova consideração não inviabilizaria o método utilizado nesta pesquisa, porém este perderia sua simplicidade, passando do simples a complexo, pois aumentaria consideravelmente a manipulação algébrica necessária para a obtenção da solução na forma analítica.

## Referências Bibliográficas

- ABIONA, A. O., “Statistical Modelling and the Fokker-Planck Equation”, Blekinge Institute of Technology, Department of Mathematical Science School of Engineering Blekinge Institute of Technology Karlskrona, Master's Thesis in Mathematical Modelling and Simulation, Suécia, (2008).
- AGUIAR, L.A., “Avaliação de Risco de um Repositório Próximo à Superfície na fase Pós-Fechamento em Cenário de Liberação de Radionuclídeos por Infiltração de Água”, Tese de D.Sc., PEN/COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, (2006).
- AGUIAR, L.A., FRUTUOSO E MELO, P.F.F., ALVIM, A.C.M., “Estimation of Mean Time to Failure of a near Surface Radioactive Waste Repository for PWR Power Stations”, International Nuclear Atlantic Conference – INAC, Santos, Brasil, (2007).
- ALVES, A.S.M., “Análise de Segurança Determinística e Estocástica em um Cenário de Infiltração de Água no Interior de um Repositório Próximo à Superfície para a Deposição de Rejeitos Radioativos”, Tese de D.Sc., PEN/COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, (2014).
- ALVES, A.S., FRUTUOSO E MELO, P.F., PASSOS, E.M., FONTES, G.S., “Stochastic and deterministic models to evaluate the critical distance of a near surface repository for the disposal of intermediate and low level radioactive wastes”, Nuclear Engineering and Design 287 57–67, (2015).
- BRANCO, O.E.A., BORGES, J.C., LOUREIRO, C.O., “Intercomparação de Modelos de Simulação do transporte de Radionuclídeos na Água Subterrânea, na região do Repositório de Abadia-Goiás, Brasil”, 4º Congresso Latino-Americano de Hidrologia Subterrânea, disponível em: <http://memoria.cnen.gov.br/manut/ImprimeRef.asp?AN=T0000138>, acesso em 28 de fevereiro de 2019, (1998).

CAMACHO, E.N., “Modelo Markoviano com Espaço de Estados Contínuo Aplicado à Avaliação de Envelhecimento de Componentes Passivos de Plantas Nucleares – Aplicações a Tubulações Corroídas”, Tese de D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, (2010).

CNEN, “Radioproteção e Segurança para deposição Final dos Rejeitos Radioativos em Abadia de Goiás”, Projeto de Instrução Técnica, CNEN-IT-01/91, Rio de Janeiro, Brasil, (1991).

CNEN, “Relatórios de atividades 1995-1996”, disponível em: <http://memoria.cnen.gov.br/manut/ImprimeREL.asp?Ano=1995-1996&tipo=A>, acesso em 30 de novembro 2018, (1996).

CNEN, “Diretrizes Básicas de Proteção Radiológica”, CNEN-NN-3.01, Rio de Janeiro, Brasil, (2011).

DEBNATH, L., BHATTA, D., “Integral Transforms and their Applications”, Second Edition Taylor & Francis Group, LLC, USA, (2007).

DROZDOV, A.N., “Path integral solution of the Fokker-Planck equation via a generalized Trotter formula”, Physics Letters A, 171(3-4), 175–182, (1992).

HOTTOVY, S., “The Fokker-Planck Equation”, University of Wisconsin, Department of Mathematics, Madison, USA, disponível em: <https://pdfs.semanticscholar.org/7622/75ee9008cb59ea36ef3907c0e64ea0b3820e.pdf>, acesso em 10 de julho de 2019, (2011).

IAEA, “Disposal of Radioactive Waste, IAEA Safety Standards for Protecting People and Environment”, IAEA Safety Standards Series n. SSR-5, Specific Safety Requirements, Vienna, Austria, (2011).

- LEMOS, J.M., COSTA, B.A., ROCHA, C., “A Fokker-Planck approach to joint state-parameter estimation”, Vol. 51, Issue 15, 389-394, IFAC-PapersOnLine, Elsevier, (2018).
- LEMOS J.M. e MOURA J.M.F., “Time sampling of diffusion systems using semigroup decomposition methods”, MTNS 2004, 16th Int. Symp. on Mathematical Theory of Networks and Systems, Leuven, Bélgica, (2004).
- MIAW, S.T.W., SILVA, F., “Registro e Gerência de Informações Referentes aos Rejeitos Depositados em Abadia-Goiás”, disponível em: <http://memoria.cnen.gov.br/manut/ImprimeRef.asp?AN=29061498> último acesso em 28 de fevereiro de 2019, (1997).
- MOLIGNINI, P., “Analyzing the two dimensional Ising model with conformal field theory”, Report, disponível em: [http://edu.itp.phys.ethz.ch/fs13/cft/SM2\\_Molignini.pdf](http://edu.itp.phys.ethz.ch/fs13/cft/SM2_Molignini.pdf) último acesso em 28 de fevereiro de 2019, (2013).
- MOREIRA, J.M.L. Coordenador, ABE, A.Y., GUEDES E SILVA, C.C, DE OLIVEIRA NETO, J.J., DE BARROS MONTE, L.J., DE MOLNARY, L., GOMES, N.J.P.O., BARRETO, V., “Situação atual dos rejeitos radioativos no Brasil e no mundo, Relatório Técnico”, Comitê de Rejeitos Radioativos e Meio Ambiente Associação Brasileira de Energia Nuclear (ABEN), Brasil, (junho 2006).
- ONISHI, Y., “Surface Water Transport of Radionuclides”, Radiological Risk Assessment and Environmental Analysis Edited by John e. Till Helen A. Grogan, 147-207, Oxford University Press, Inc., (2008).
- PEIXOTO, C.M., JACOMINO, V.M.F., “Relatório de Avaliação dos Resultados Analíticos do Programa de Monitoração Ambiental do Repositório de Rejeitos radioativos de Abadia de Goiás – Fase Operacional (Agosto/97 a Junho/98)”, Publicação CDTN 846, disponível em: <http://memoria.cnen.gov.br/manut/ImprimeRef.asp?AN=T0000574>, acesso em 28 de fevereiro de 2019, (1999).

- RICHARD, B. C. e DUGUID, J.O., “Transport of Radionuclides in Groundwater”, Radiological Risk Assessment and Environmental Analysis Edited by John e. Till Helen A. Grogan, 208-259, Oxford University Press, Inc., (2008).
- RISKEN, H., “The Fokker-Planck Equation, Methods of Solution and Applications”, Berlin, Springer-Verlag, (1984).
- ROCHA M.C. de O., “Data Assimilation: Contribuições para a Modelação, Previsão e Controlo em Anestesia”, Tese de Doutoramento, FCUP, Porto, Portugal, (2014).
- ROSSATO, R. “Soluções e Aplicações da Equação de Difusão Fracionária a Problemas de Contorno”, Dissertação de Mestrado, Departamento de Física da Universidade Estadual de Maringá, disponível em: [http://www.pfi.uem.br/wp-content/uploads/2015/09/roberto\\_rossato\\_mest\\_2009.pdf](http://www.pfi.uem.br/wp-content/uploads/2015/09/roberto_rossato_mest_2009.pdf), acesso em 28 de fevereiro de 2019, Brasil, (2009).
- VAN KAMPEN, N. G., “Stochastic Process in Physics and Chemistry”, 3 ed. Amsterdam, Elsevier Science & Technology Books, (2007).
- TRANJAN FILHO, A., DE MARTIN ALVES, A.S., DOS SANTOS, C.D.P., DOS PASSOS, E.V., COUTINHO, F.P.M., “Repositório de Rejeitos Radioativos de Césio - Abadia de Goiás Concepção e Projeto”, disponível em: <https://www.ipen.br/biblioteca/cd/go10anosdep/Cnen/doc/manu20.PDF>, acesso em 28 de fevereiro 2019, Goiânia, Brasil, (1997).
- TROTTER H.F, “On the product of semigroups of operators”, Proc. American Mathematical Society, 10 (4):545–551, (1959).
- VALSAKUMAR, M.C., “Solution of Fokker-Planck Equation Using Trotter’s Formula”, Journal of Statistical Physics. Vol. 32, N°3, 545-553, (1983).
- XAVIER, A.M., MEZRAHI, A., HEILBRON FILHO, P.F.L., “Considerações Básicas sobre a Avaliação de Segurança de Instalações para Deposição Final de Rejeitos

Armazenados em Abadia de Goiás”, disponível em:  
[https://inis.iaea.org/collection/NCLCollectionStore/\\_Public/23/026/23026380.pdf](https://inis.iaea.org/collection/NCLCollectionStore/_Public/23/026/23026380.pdf), acesso em 27 de março de 2019, (1991).

WILCOX, R.M., “Exponential Operators and Parameter Differentiation in Quantum Physics”, J. Math. Phys. 8, 962, American Institute of Physics, EUA, (1967).

# APÊNDICE A

## Prova da Fórmula do Produto de Trotter

MOLIGNINI (2013) realiza em seu artigo uma prova completa da Fórmula de Trotter (ou Fórmula Lie-Trotter), para duas matrizes  $A$  e  $B \in \text{Mat}_n(\mathbb{C})$  que não comutam entre si.

Neste Apêndice, seguindo a mesma metodologia aplicada por MOLIGNINI (2013), é desenvolvida uma prova da Fórmula de Trotter estendida à  $A$ ,  $B$  e  $C$  três matrizes que não comutam entre si, com  $A, B$  e  $C \in \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ .

$$e^{A+B+C} = \lim_{n \rightarrow \infty} (e^{\frac{A}{n}} e^{\frac{B}{n}} e^{\frac{C}{n}})^n$$

Ou, escrito de outra forma:

$$\|e^{A+B+C} - (e^{\frac{A}{n}} e^{\frac{B}{n}} e^{\frac{C}{n}})^n\| \leq o(n^{-1}) \quad \text{para } n \rightarrow \infty$$

Sejam:

$$\beta_n = e^{(A+B+C)/n} \quad \text{e} \quad \Upsilon_n = e^{\frac{A}{n}} e^{\frac{B}{n}} e^{\frac{C}{n}}$$

Para:

$$e^x = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{x^i}{i!} = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \dots$$

Expandindo  $\beta_n$  e  $\Upsilon_n$  em Série de Taylor:

$$\beta_n = \left[ 1 + \frac{A+B+C}{n} + \frac{1}{2!} \frac{(A+B+C)^2}{n^2} + \frac{1}{3!} \frac{(A+B+C)^3}{n^3} + \dots \right]$$

$$\Upsilon_n = \left[ 1 + \frac{A}{n} + \frac{1}{2!} \frac{(A)^2}{n^2} + \frac{1}{3!} \frac{(A)^3}{n^3} + \dots \right] + \left[ 1 + \frac{B}{n} + \frac{1}{2!} \frac{(B)^2}{n^2} + \frac{1}{3!} \frac{(B)^3}{n^3} + \dots \right] + \left[ 1 + \frac{C}{n} + \frac{1}{2!} \frac{(C)^2}{n^2} + \frac{1}{3!} \frac{(C)^3}{n^3} + \dots \right]$$

Mas, em  $\beta_n$ :

$$\frac{1}{2!} \frac{(A+B+C)^2}{n^2} + \frac{1}{3!} \frac{(A+B+C)^3}{n^3} + \dots = o(n^{-2}) \quad \text{para } n \rightarrow \infty$$

E em  $\Upsilon_n$ :

$$\frac{1}{2!} \frac{(A)^2}{n^2} + \frac{1}{3!} \frac{(A)^3}{n^3} + \dots = o(n^{-2}) \quad \text{para } n \rightarrow \infty$$

$$\frac{1}{2!} \frac{(B)^2}{n^2} + \frac{1}{3!} \frac{(B)^3}{n^3} + \dots = o(n^{-2}) \quad \text{para } n \rightarrow \infty$$

$$\frac{1}{2!} \frac{(C)^2}{n^2} + \frac{1}{3!} \frac{(C)^3}{n^3} + \dots = o(n^{-2}) \quad \text{para } n \rightarrow \infty$$

Assim:

$$\beta_n = \left[ 1 + \frac{A+B+C}{n} + o(n^{-2}) \right] \quad \text{e} \quad \Upsilon_n = \left[ 1 + \frac{A+B+C}{n} + o(n^{-2}) \right]$$

Para:

$$\beta_n - \Upsilon_n \quad \text{com } n \rightarrow \infty$$

$$\beta_n - \Upsilon_n = \left[ 1 + \frac{A+B+C}{n} \right] - \left[ 1 + \frac{A+B+C}{n} \right] + o(n^{-2})$$

Assim:

$$\beta_n - \Upsilon_n = o(n^{-2})$$

Desta forma, para  $n \rightarrow \infty$ , a primeira parte da prova está completa.

Para a segunda parte da prova, considere-se agora:  $n \rightarrow \text{finito}$

Seja a evolução dada por:

$$\beta_n^n - \Upsilon_n^n = e^{A+B+C} - e^A e^B e^C$$

De acordo com MOLIGNINI (2013), considere-se a seguinte desigualdade:

$$\|\beta^n - \Upsilon^n\| \leq n [\max(\|\beta\|, \|\Upsilon\|)]^{n-1} \|\beta^n - \Upsilon^n\| \quad (\text{A.1})$$

Agora, aplicando a desigualdade triangular:

$$\|\beta_n\| \leq \|e^{(A+B+C)/n}\| \leq e^{(\|A\|+\|B\|+\|C\|)/n} \leq e^{(\|A\|+\|B\|+\|C\|)/n}$$

e

$$\|\Upsilon_n\| \leq \|e^{\frac{A}{n}} e^{\frac{B}{n}} e^{\frac{C}{n}}\| \leq \|e^{\frac{A}{n}}\| \|e^{\frac{B}{n}}\| \|e^{\frac{C}{n}}\| \leq e^{\frac{\|A\|}{n}} e^{\frac{\|B\|}{n}} e^{\frac{\|C\|}{n}} = e^{(\|A\|+\|B\|+\|C\|)/n}$$

Da Eq. (A.1):

$$\|e^{A+B+C} - (e^{\frac{A}{n}} e^{\frac{B}{n}} e^{\frac{C}{n}})^n\| = \|\beta_n^n - \Upsilon_n^n\| \leq n (e^{\|A\|+\|B\|+\|C\|}) o(n^{-2}) = o(n^{-1})$$

$$\|e^{A+B+C} - (e^{\frac{A}{n}} e^{\frac{B}{n}} e^{\frac{C}{n}})^n\| = o(n^{-1})$$

Ou

$$e^{A+B+C} = \lim_{n \rightarrow \infty} (e^{\frac{A}{n}} e^{\frac{B}{n}} e^{\frac{C}{n}})^n$$