

BR 9023017
INIS-32-1949

INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES
AUTARQUIA ASSOCIADA À UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

**ANÁLISE DE SENSIBILIDADE APLICADA A MODELOS DE TRANSPORTE
DE REJEITOS RADIOATIVOS DE ATIVIDADE BAIXA**

GORO HIROMOTO

Tese apresentada como parte dos
requisitos para obtenção do Grau de
Doutor em Tecnologia Nuclear.

Orientador: Dr. Achilles Alfonso Suarez

SÃO PAULO
1989

INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES
Autarquia Associada à Universidade de São Paulo

**ANALISE DE SENSIBILIDADE APLICADA A MODELOS DE TRANSPORTE
DE REJEITOS RADIOATIVOS DE ATIVIDADE BAIXA**

GORO HIROMOTO

Tese apresentada como parte dos
requisitos para obtenção do Grau de
Doutor em Tecnologia Nuclear

Orientador: Dr. Achilles Alfonso Suarez

SÃO PAULO

1989



COMISSÃO NACIONAL DE ENERGIA NUCLEAR/SP - IPEN

AGRADECIMENTOS

Ao Dr. Achilles A. Suarez, pela orientação, discussões e incentivo durante a realização deste trabalho.

Aos Drs. Craig A. Little, David E. Fields e James E. Turner, pelo apoio recebido durante a nossa permanência no Laboratório Nacional de Oak Ridge.

Ao Dr. Laércio A. Vinhas, pelo constante incentivo.

Aos colegas do Departamento de Proteção Radiológica, pela colaboração.

A Comissão Nacional de Energia Nuclear, pelo auxílio financeiro.

Ao Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, pela oportunidade de realização deste trabalho.

**ANALISE DE SENSIBILIDADE APLICADA A MODELOS DE
TRANSPORTE DE REJEITOS RADIOATIVOS DE ATIVIDADE BAIXA**

GORO HIROMOTO

RESUMO

Neste trabalho foi desenvolvida uma metodologia de análise de sensibilidade aplicada a um modelo de transporte de rejeitos radioativos de atividade baixa depositados em trincheiras rasas.

A metodologia de análise de sensibilidade, baseada na técnica de substituição do modelo por uma superfície resposta e na avaliação de indicadores estatísticos de sensibilidade, foi desenvolvida para se determinar uma ordenação quantitativa das variáveis do modelo que, em virtude da imprecisão com que seus valores são conhecidos, contribuem de forma mais significativa à variação na resposta do modelo.

A superfície resposta foi construída por regressão linear múltipla e os indicadores de sensibilidade utilizados foram os coeficientes de correlação parcial e os coeficientes da regressão padronizada.

Os resultados obtidos mostram que as técnicas empregadas neste trabalho se constituem em um meio eficaz de se efetuar análises de sensibilidade aplicada a modelos não lineares de transporte de radionuclídeos.

**SENSITIVITY ANALYSIS OF A LOW-LEVEL WASTE
ENVIRONMENTAL TRANSPORT CODE**

GORD HIROMOTO

ABSTRACT

Results are presented from a sensitivity analysis of a computer code designed to simulate the environmental transport of radionuclides buried at shallow land waste repositories.

A sensitivity analysis methodology, based on the surface response replacement and statistic sensitivity estimators, was developed to address the relative importance of the input parameters on the model output.

Response surface replacement for the model was constructed by stepwise regression, after sampling input vectors from range and distribution of the input variables, and running the code to generate the associated output data. Sensitivity estimators were computed using the partial rank correlation coefficients and the standardized rank regression coefficients.

The results showed that the techniques employed in this work provides a feasible means to perform a sensitivity analysis of a general non-linear environmental radionuclides transport models.

SUMARIO

	PAGINA
INTRODUÇÃO	1
1. CONSIDERAÇÕES GERAIS SOBRE O CODIGO PRESTO-II	5
1.1. Descrição do cenário modelado	5
1.2. Metodologia utilizada nas subrotinas de PRESTO-II	9
1.2.1. Erosão do solo	9
1.2.2. Infiltração de água através do solo	11
1.2.3. Lixiviação dos radionuclídeos	14
1.2.4. Transporte sob a trincheira e através do aquifero	16
1.2.5. Transporte superficial	18
1.2.6. Ressuspensão atmosférica	20
1.2.7. Cadeia alimentar	21
2. CONCEITOS MATEMATICOS APLICADOS A ANALISE DE SENSIBILIDADE	23
2.1. Construção de superfície resposta	23
2.1.1. Regressão linear por etapas	25
2.1.2. Transformação de dados	26
2.1.3. Validação da superfície resposta	27

2 2.	Indicadores de sensibilidade	30
2.2.1.	Coeficiente de correlação de Pearson e Spearman	30
2.2.2.	Coeficiente de correlação parcial	31
2.2.3.	Coeficiente da regressão padronizada	32
3.	METODOLOGIA DE ANALISE DE SENSIBILIDADE	34
3.1.	O sitio referência	34
3.1.1.	Descrição das variáveis de entrada	35
3.1.2.	Descrição das variáveis de saída	39
3.1.3.	Seleção do intervalo de variação das variáveis de entrada	41
3.2.	Construção da superfície resposta	41
3.2.1.	Seleção preliminar de variáveis	41
3.2.2.	Geração dos dados de entrada	45
3.2.3.	Regressão linear múltipla	53
4.	ANALISE DE SENSIBILIDADE 1: RESULTADOS E DISCUSSÕES ..	55
4.1.	Ajuste das superfícies resposta	56
4.1.1.	Em função da dose média anual	56
4.1.2.	Em função da dose máxima anual	62
4.2.	Validação das superfícies resposta	62
4.3.	Classificação das variáveis segundo sua importân- cia no modelo	68
5.	ANALISE DE SENSIBILIDADE 2: RESULTADOS E DISCUSSÕES ..	84
6.	CONCLUSOES	109
	REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS	107

INTRODUÇÃO

Um dos importantes aspectos relativos ao desenvolvimento da tecnologia nuclear é o gerenciamento adequado dos rejeitos radioativos provenientes das várias etapas do ciclo do combustível nuclear e, em menor escala, da produção e utilização de radioisótopos na medicina, indústria e laboratórios de pesquisa.

Embora não haja um critério universalmente adotado para a classificação dos rejeitos radioativos, aceita-se genericamente o seu agrupamento em 3 categorias^(30,32):

1. Rejeitos de atividade alta: Contém níveis elevados de emissão beta/gama, quantidades significantes de emissores alfa, radiotoxicidade elevada e alta geração de calor.
2. Rejeitos de atividade intermediária: Contém níveis intermediários de emissão beta/gama, quantidades insignificantes de emissores alfa, radiotoxicidade intermediária e baixa geração de calor.
3. Rejeitos de atividade baixa: Contém níveis baixos de emissão beta/gama, quantidades insignificantes de emissores alfa, radiotoxicidade baixa e insignificante geração de calor.

Nesta classificação, por insignificante entende-se que tais características podem ser geralmente ignoradas sob o ponto de vista de deposição.

No caso particular dos rejeitos radioativos de atividade baixa e, eventualmente, em situações favoráveis ou de atividade intermediária, tem-se adotado em vários países, há décadas, a opção de confiná-los em repositórios escavados próximos à superfície do solo, geralmente a não mais que 50 metros de profundidade^(20, 21).

Esses repositórios são formados tipicamente por uma série de longas trincheiras abertas no solo e à medida que vários de seus níveis vão sendo completados, são cobertos por camadas do próprio solo retirado. Quando uma trincheira é totalmente cheia, ela é recoberta ainda com uma outra camada de material de baixa permeabilidade, como a argila, formando uma ligeira saliência para facilitar o escoamento superficial das águas de precipitação pluviométrica; depois, é gramada para estabilização do local.

Estudos conduzidos nos repositórios comerciais de Maxey Flats (Kentucky) e West Valley (New York), em meados da década de 70, e no repositório federal de Oak Ridge (Tennessee) mostraram, contudo, que tal prática pode não ser suficientemente segura sob o ponto de vista de impacto radiológico ao meio ambiente, uma vez que quantidades substanciais de radionuclídeos poderiam ser liberadas das trincheiras se não apropriadamente controladas⁽²²⁾.

Desde então, agências governamentais têm se preocupado em desenvolver metodologias para a avaliação do

risco potencial decorrente da deposição dos rejeitos radioativos de atividade baixa em trincheiras rasas, bem como estudar outras possíveis alternativas de eliminação^(34,45).

Como parte de um programa geral de estudos coordenado pela U.S. Environmental Protection Agency (EPA), foi desenvolvida uma metodologia para avaliação desses riscos, denominada PRESTO (Prediction of Radiation Effects from Shallow Trench Operations)⁽³⁶⁾. Essa metodologia deu origem a pelo menos dois diferentes códigos de computador, denominados PRESTO-EPA⁽⁵⁵⁾ e PRESTO-II⁽¹³⁾. Posteriormente, a EPA continuou o desenvolvimento de novas versões de PRESTO-EPA^(3,4).

PRESTO-II, código do qual nos ocuparemos neste trabalho, descreve essencialmente os seguintes processos:

1. Transporte de radionuclídeos por suspensão atmosférica, da porção presente no solo contaminado do sítio.
2. Infiltração de água na trincheira.
3. Liberação dos radionuclídeos da trincheira por escoamento vertical até as águas subterrâneas ou por afloramento à superfície.
4. Migração dos radionuclídeos através de lençóis freáticos.
5. Transporte dos radionuclídeos através de correntes superficiais de água.
6. Transferência dos radionuclídeos através da cadeia alimentar.
7. Irradiação de indivíduos em decorrência da ingestão de produtos contaminados, da inalação e inersão no ar contaminado e da contaminação superficial do solo.

Um dos aspectos importantes no desenvolvimento e verificação de modelos determinísticos complexos como PRESTO, bem como em todo processo de análise de segurança dos repositórios, é o estudo da variação da resposta do modelo em relação às variações em suas variáveis de entrada, conhecido genericamente como 'análise de sensibilidade' (15,24,27,53).

A análise de sensibilidade permite, geralmente através da aplicação de técnicas estatísticas, determinar quais variáveis e fenômenos têm uma influência significativa na resposta do modelo e quais são as suas importâncias relativas, facilitando a definição de prioridades quanto ao direcionamento das pesquisas na busca de modelos e dados mais exatos (32,33).

Este trabalho pretende ser uma contribuição no sentido de (1) desenvolver e aplicar uma metodologia de análise de sensibilidade no código PRESTO-II, (2) determinar as vias dominantes de transporte dos radionuclídeos em certas condições específicas de cenário e (3) determinar uma ordenação quantitativa das variáveis que, em virtude da imprecisão com que seus valores são conhecidos, contribuem com maior peso à dispersão nos valores de dose calculados por PRESTO-II.

CAPITULO 1

CONSIDERAÇÕES GERAIS SOBRE O CÓDIGO PRESTO-II

Este capítulo descreve o cenário modelado pelo código PRESTO-II, a estrutura geral de suas subrotinas e a metodologia empregada para a descrição dos mecanismos de transporte considerados no presente trabalho. PRESTO-II é um código disponível em fita magnética através do Laboratório Nacional de Oak Ridge e sua descrição completa pode ser obtida através de várias publicações (13,30,55).

1.1. DESCRIÇÃO DO CENÁRIO MODELADO

Uma representação esquemática do sítio e das vias de transporte e transferência dos radionuclídeos até o homem, considerados em PRESTO-II, é mostrada na Figura 1.1. Embora um sítio seja constituído de várias trincheiras, o presente código considera todas elas concentradas em uma única trincheira combinada.

A água é frequentemente considerada o principal meio de transporte dos radionuclídeos, principalmente em situações climatológicas favoráveis (7,20,30).

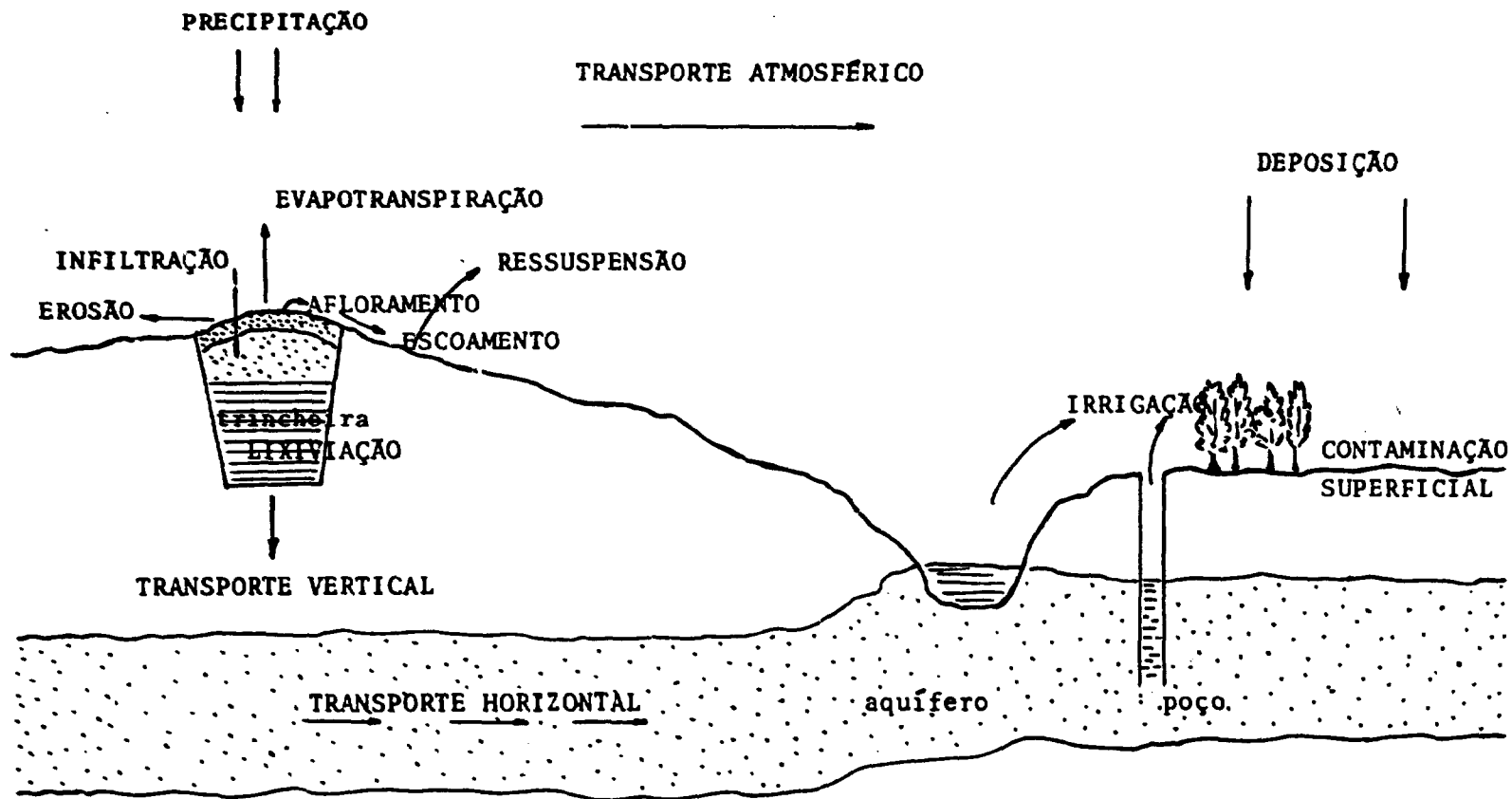


Figura 1.1. Representação esquemática dos processos modelados em PRESTO-II

Três fenômenos determinam o balanço da quantidade de água de precipitação pluviométrica que atinge a trincheira: escoamento superficial, evapotranspiração e infiltração através do solo. O escoamento superficial, que pode também provocar a erosão do solo que cobre a trincheira, é dado de entrada no código; a evapotranspiração é calculada de acordo com o modelo proposto por MORTON^(41,42) e o balanço de água fornece a quantidade infiltrada verticalmente até a trincheira.

Uma vez atingida a trincheira, a água é contaminada pelo contato com os materiais radioativos. A concentração dos radionuclídeos dissolvidos na água é calculada a partir de três formulações: (1) por meio de valores de solubilidade, (2) adotando-se simplesmente uma certa fração de lixiviação como dado de entrada do código ou (3) utilizando-se o conceito de coeficiente de distribuição K_d . Dependendo da permeabilidade da formação geológica do local e da quantidade de água infiltrada, os radionuclídeos podem percolar através da base da trincheira, atingindo o aquífero, ou podem aflorar à superfície, contaminando o solo e, eventualmente, sistemas superficiais de água como rios ou lagos circunvizinhos.

O transporte dos radionuclídeos através de águas subterrâneas é simulado por meio de um modelo unidimensional, acrescido de um fator de correção para se levar em consideração o fenômeno da dispersão do contaminante no aquífero e considerando-se que são geralmente transportados a velocidades muito menores do que a velocidade linear média da água no lençol freático; esse retardamento deve-se à interação dos radionuclídeos com os materiais sólidos do aquífero.

Os radionuclídeos podem eventualmente atingir um ponto onde a água esteja sendo utilizada para irrigação ou consumo humano através de poços, ou onde o aquífero alimente águas superficiais. Nesses casos, os radionuclídeos entram na cadeia alimentar clássica, equacionada basicamente adaptando-se os modelos propostos no Regulatory Guide 1109⁽⁵⁶⁾; as modificações introduzidas referem-se principalmente aos mecanismos de acumulação dos radionuclídeos no solo, onde adotou-se o modelo de lixiviação proposto por Baes-III⁽²⁾.

A contaminação superficial do sítio é decorrente de sua operação rotineira, do afloramento da água contaminada da trincheira ou da completa erosão da camada de solo que a cobre inicialmente. Essa porção superficial está sujeita a ressuspensão atmosférica e ao transporte, através de correntes de ar, até o grupo populacional crítico, contaminando a vegetação existente por deposição gravitacional ou eletroquímica. O código utiliza o modelo de ressuspensão proposto por Anspaugh⁽¹⁾ e, para o transporte atmosférico, o modelo clássico da pluma gaussiana⁽⁵⁶⁾.

Os cálculos finais de dose e detrimento no grupo crítico são efetuados segundo a metodologia desenvolvida em dois extensos códigos computacionais, DARTAB e RADRISK^(5.11), adaptados em PRESTO-II como subrotinas.

O presente estudo se ocupará apenas do cenário correspondente às vias de transferência dos radionuclídeos desde a trincheira até o grupo populacional crítico. A cadeia alimentar e o cálculo de dose não serão analisados sob o aspecto de sensibilidade, pois são processos independentes das características particulares de cada sítio.

1.2. METODOLOGIA UTILIZADA NAS SUBROTINAS DE PRESTO-II

O código PRESTO-II foi elaborado de forma modular, possibilitando alterações isoladas em cada subrotina, à medida que for de interesse do usuário introduzir novas metodologias para descrever partes específicas do código. A Figura 1.2 mostra um fluxograma de suas principais subrotinas, úteis à compreensão do presente trabalho. As subrotinas FOOD, IRRIG, HUMEX e DARTAB correspondem aos processos não considerados na análise de sensibilidade. A descrição detalhada de toda metodologia utilizada em PRESTO-II está documentada na publicação ORNL-5970⁽¹³⁾.

1.2.1. Erosão do solo

A quantidade de solo removida anualmente da cobertura da trincheira pelo processo de erosão natural é calculada pela subrotina ERORF. A expressão utilizada é a equação universal de perda de solo⁽⁵⁴⁾.

$$L = a \times b \times c \times d \times e \times f \quad (1.1)$$

onde L = perda anual de solo (toneladas/hectare)

a = fator de precipitação pluviométrica (ton/acre)(pol/h)

b = fator de erosão anual do solo (ton/hectare/unid.de a)

c = fator geográfico

d = fator relacionado ao tipo de cobertura da trincheira

e = fator relacionado à prática de controle da erosão

f = fração arrastada do sedimento

Todas essas variáveis são dados de entrada especificados pelo usuário. O significado de cada uma delas e métodos de estimativa dos respectivos valores podem ser encontrados no trabalho de McElroy⁽²⁷⁾.

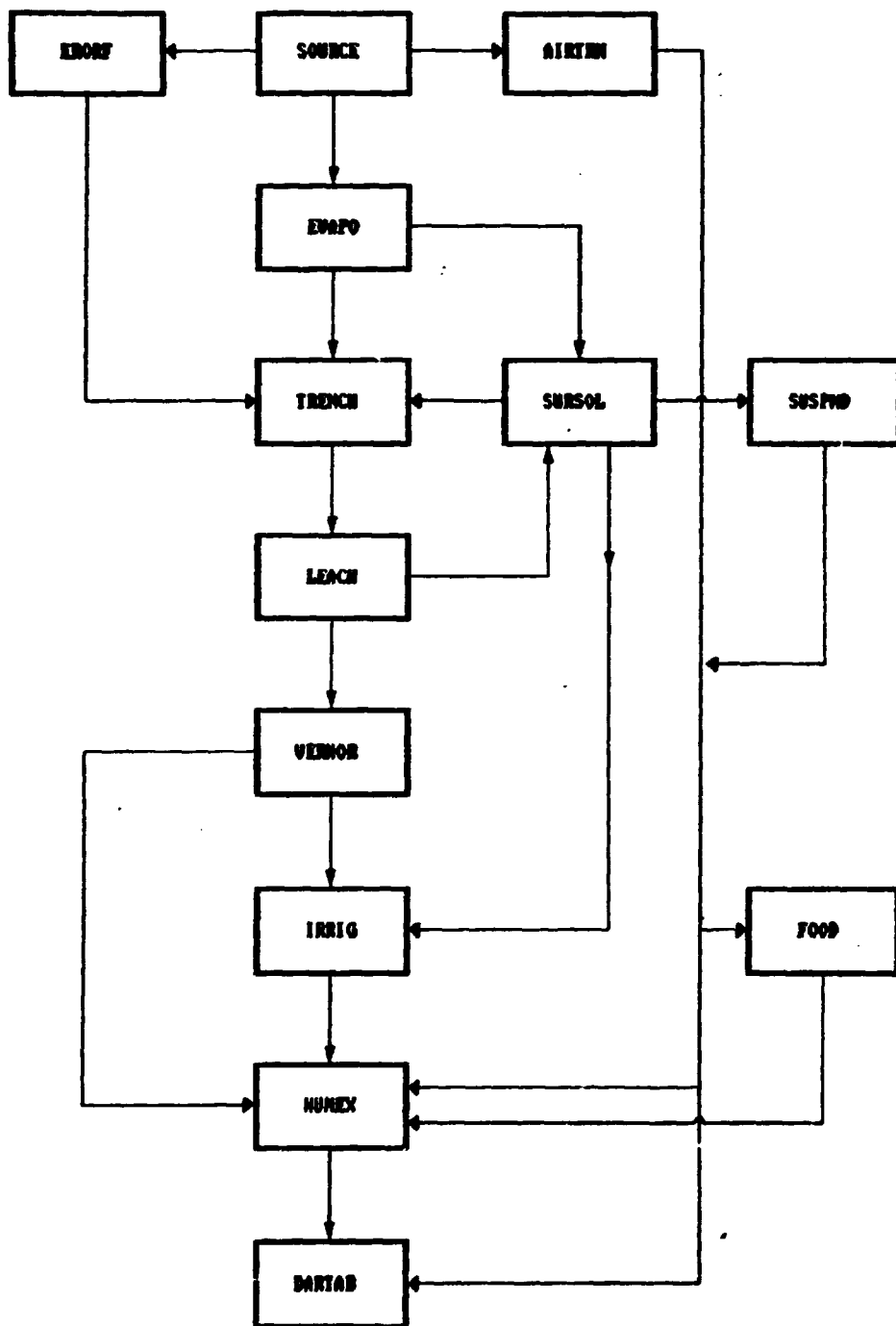


Figura 1.2. Fluxograma das principais subrotinas de FRESHO-11

1.2.2. Infiltração de água através do solo

A infiltração anual de água na trincheira é calculada por meio da seguinte equação de balanço de massa:

$$P + I = W + E + R \quad (1.2)$$

onde P = precipitação pluviométrica anual (m/ano)

I = irrigação anual (m/ano)

W = infiltração anual (m/ano)

E = evapotranspiração anual (m/ano)

R = escoamento superficial (m/ano)

Definindo-se uma fração de escoamento superficial f_s ,

$$f_s = \frac{R}{P}, \quad (1.3)$$

tem-se que:

$$W = (1 - f_s) \times P + I - E \quad (1.4)$$

A equação (1.4) é usada para calcular a quantidade anual de água que pode penetrar na trincheira ou no solo circunvizinho.

A evapotranspiração (E) inclui a evaporação superficial e a transpiração das plantas. É calculada em PRESTO-II pela subrotina EVAPO de acordo com o modelo de Morton^(41,42), necessitando as seguintes variáveis de entrada: latitude geográfica do sítio, pressão atmosférica média e valores mensais da temperatura do ar ambiente, da temperatura de condensação e da fração observada de insolação.

O balanço anual de água na trincheira é efetuado pela subrotina TRENCH. O volume de água V_T (m^3) que entra anualmente na trincheira é dado pela equação:

$$V_T = A_T ((f_o \times W) + (1 - f_o) \times W \times f_n) \quad (1.5)$$

onde A_T = área superficial da trincheira (m^2)

f_o = fração artificialmente removida da cobertura da trincheira

W = infiltração anual (m)

f_n = fração da água infiltrada através da cobertura e não dispersada lateralmente

A fração f_o leva em consideração a possibilidade de ocorrência de distúrbios mecânicos na trincheira em virtude da ação humana ou de algum outro processo artificial que leve a uma completa destruição de parte da cobertura. O usuário deve especificar o ano inicial e final desse processo eventual, bem como as respectivas perdas fracionais da cobertura. A fração f_o é calculada anualmente a partir da interpolação linear entre as perdas fracionais inicial e final.

Quando a espessura da cobertura tornar-se menor do que $1.0E-05$ metro em virtude da erosão, o código assume que $f_o = 1$.

No n -ésimo ano da simulação a altura de água na trincheira $W_d(n)$, em metros, é calculada pelas seguintes expressões:

$$VT_1(n) = VT_1(n-1) + V_T(n) \quad (1.6)$$

$$W_d(n) = \frac{VT_1(n)}{\theta_T \times A_T} \quad (1.7)$$

onde $VT_1(n)$ = volume de água acumulado na trincheira
no início do n-ésimo ano (m^3)

$VTr(n-1)$ = volume de água acumulado na trincheira
ao final do (n-1)-ésimo ano (m^3)

$Vr(n)$ = volume de água que entra na trincheira
no ano n (m^3)

θ_T = porosidade do conteúdo da trincheira

Ar = área superficial da trincheira (m^2)

Utilizando a equação que expressa a lei de Darcy⁽¹⁸⁾
no estado estacionário, calcula-se a quantidade de água V_B
(m^3 /ano) que flui anualmente através da base da trincheira:

$$V_B = W_d \times Ar \times \frac{k}{L} \quad (1.8)$$

onde W_d = altura de água na trincheira (m)

Ar = área superficial da trincheira (m^2)

k = condutividade hidráulica da zona saturada sob a
trincheira (m/ano)

L = comprimento da zona saturada sob a trincheira (m)

Se a altura de água na trincheira for, no entanto,
maior do que a sua profundidade nominal T_d em um certo ano n,
então a quantidade $(W_d - T_d)$ fluirá pelo topo da trincheira e
 $W_d = T_d$ na equação (1.8).

A quantidade de água V_o (m^3 /ano), aflorada à
superfície é dada então por:

$$V_o = (W_d - T_d) \times Ar \times \theta_T \quad (1.9)$$

Ao final do n-ésimo ano, o volume de água que
permanece na trincheira é dado por:

$$VT_2(n) = VT_1(n) - V_a(n) - V_o(n) \quad (1.10)$$

1.2.3. Lixiviação dos radionuclídeos

Definida uma certa quantidade de água presente na trincheira, a subrotina LEACH calcula a concentração dos radionuclídeos dissolvidos na água a partir de 5 formulações, devendo o usuário optar por uma delas ao definir a variável LEAOPT.

As opções 1 a 4 são combinações de dois fatores: a quantidade de material em contato com a água e a metodologia usada para definir o tipo de interação entre o contaminante e a água. Nas opções 1 e 3, supõe-se que todo o volume do material contido na trincheira entra em contato com a água, à medida que esta flui do topo até a base. Nas opções 2 e 4, supõe-se que somente a fração igual à relação entre a altura máxima da água e a profundidade nominal da trincheira entra em contato com a água. Nas opções 1 e 2, a concentração de cada radionuclídeo é calculada em função de seus respectivos coeficientes de distribuição K_d , enquanto que nas opções 3 e 4, a concentração é calculada em função de suas solubilidades.

As equações utilizadas são as seguintes:

Se LEAOPT = 1 ou 2,

$$CW_T = \frac{Q_T \times f_w}{\Delta T (W_a \times \theta_T + T_d \times f_w \times k_d \times \rho_R)} \quad (1.11)$$

Se LEAOPT = 3 ou 4,

$$CW_T = 5.183 \times 10^{11} \times \frac{\lambda \times S}{M} \quad (1.12)$$

onde CW_T = concentração de um dado radionuclídeo i na água
(Ci/m³)

Q_T = atividade do radionuclídeo i na trincheira (Ci)

f_w = fração da quantidade total de rejeito em contato com a água

(=1 se L.EAOPT = 1 ou 3; <1 se L.EAOPT = 2 ou 4)

A_T = área da superfície da trincheira (m^2)

W_d = altura máxima anual da água acumulada na trincheira (m)

θ_T = porosidade do material contido na trincheira

T_d = profundidade nominal da trincheira (m)

K_d = coeficiente de distribuição do radionuclídeo i , no meio dentro da trincheira (cm^3/g)

ρ_R = densidade do material contido na trincheira (g/cm^3)

λ = constante de decaimento radioativo do radionuclídeo i (ano^{-1})

S = solubilidade do elemento i (g/cm^3)

M = massa atômica do radionuclídeo i (g)

$5.163E+11$ = constante de conversão de unidades

(no. de Avogrado $\times cm^3/m^3 \times Ci/dps \times s/ano$)

O uso da equação (1.12) está condicionada à existência do radionuclídeo i em quantidade suficiente para saturar a solução. Caso contrário, a concentração é dada por:

$$CW_T = \frac{Q_T \times f_w}{A_T \times W_d \times \theta_T} \quad (1.13)$$

A atividade total Q_o (Ci/ano) liberada anualmente da trincheira é dada então por:

$$Q_o = CW_T \times (V_o + V_m) \quad (1.14)$$

A opção 5 permite ao usuário fornecer como dado de entrada um fator de liberação R_f , correspondente à fração do inventário total dos radionuclídeos que seria liberada

anualmente da trincheira. Essa fração é uma constante genérica aplicada indistintamente a cada radionuclídeo e não considera nenhum cálculo envolvendo a solubilidade ou o coeficiente de distribuição.

Nesse caso, a atividade total de cada radionuclídeo liberada anualmente da trincheira é dada por:

$$Q_a = R_r \times Q_r \quad (1.15)$$

1.2.4. Transporte sob a trincheira e através do aquífero

Uma vez que uma quantidade de material Q_a (Ci/ano) é liberada da trincheira pela sua base, supõe-se que ela seja transportada verticalmente até o aquífero e depois horizontalmente até um poço. A velocidade com que os radionuclídeos se movem é retardada em relação a velocidade da água por um fator de retardação RT dado por:

$$RT = 1 + \frac{\rho \times K_d}{\theta} \quad (1.16)$$

onde ρ = densidade do solo (g/cm^3)

K_d = coeficiente de distribuição no meio (cm^2/g)

θ = porosidade do meio

O tempo total de trânsito T (anos) dos radionuclídeos é então calculado por:

$$T = \frac{D_v \times RT_v}{V_v} + \frac{D_H \times RT_H}{V_H} \quad (1.17)$$

onde D_v = distância da base da trincheira até o aquífero (m)

D_H = distância da trincheira até o poço (m)

RT_v = fator de retardação vertical

RT_H = fator de retardação horizontal

V_v = velocidade linear média vertical da água na zona saturada (m/ano)

V_H = velocidade linear média da água no aquífero (m/ano)

A quantidade Q_{well} (Ci/ano) de cada radionuclídeo i que atinge o poço é calculada na subrotina VERHOR e dada pela expressão:

$$Q_{well}(N+T) = Q_B(N) \times e^{-\lambda T} \quad (1.18)$$

onde $Q_B(N)$ = atividade do radionuclídeo i , liberada pela base da trincheira no ano N (Ci/ano)

λ = constante de decaimento radioativo do radionuclídeo i (anos⁻¹)

Essa quantidade é dividida pelo volume de água disponível anualmente no poço, para o cômputo da concentração máxima na água eventualmente utilizada para irrigação ou consumo.

O volume de água contaminada que pode ser retirado é calculado supondo-se que o poço é previamente alimentado pelo aquífero não contaminado. A esse volume é adicionado a porção de água na qual o contaminante se difunde. A equação utilizada é a seguinte:

$$V_{WA} = V_H \times \theta_A \times D_A \times (\sqrt{A\tau} + 2 \tan(\alpha/2) \times D_H) \quad (1.19)$$

onde V_{WA} = volume de água contaminada disponível para utilização (m³/ano)

θ_A = porosidade do aquífero

D_A = espessura do aquífero (m)

α = ângulo de dispersão da pluma contaminante (radianos)

O ângulo de dispersão, geralmente determinado por algum processo experimental, é uma variável bastante utilizada em estudos que caracterizam o movimento de poluentes químicos em aquíferos afetados por aterros sanitários convencionais(51,52).

1.2.5. Transporte superficial

Como foi visto, a água pode aflorar à superfície da trincheira se a sua altura acumulada tornar-se maior do que a profundidade da trincheira. Nesse caso, os radionuclídeos em dissolução serão adicionados ao inventário superficial inicial especificado pelo usuário, correspondente a contaminação operacional do sítio. A superfície terá então duas componentes: uma de solo contaminado e outra de água contaminada, equacionadas pela subrotina SURSOL. Considera-se que os radionuclídeos retidos no solo são relativamente insolúveis e portanto passíveis de ressuspensão e transporte atmosférico; da porção dissolvida na água, parte poderá alimentar as correntes superficiais ou se infiltrar novamente pela trincheira.

Supondo que o volume de solo disponível para os processos de troca iônica tem uma profundidade d (m) e uma área S_s (m²) igual a área contaminada do sítio, as quantidades de massa nesse volume são dadas por:

$$M_s = 1000 \times S_s \times d \times \rho_s \quad (1.20)$$

$$M_w = 1000 \times S_s \times d \times \theta_s \times \rho_w \quad (1.21)$$

onde M_s = massa de solo contaminado (kg)

M_w = massa de água no solo contaminado (kg)

ρ_s = densidade do solo (g/cm³)

ρ_w = densidade da água (g/cm³)

θ_s = porosidade do solo

1000 = fator de conversão de unidades

A partir da definição de K_d , obtém-se que:

$$CW_s = \frac{1000 \times Q_s}{K_d \times M_s + M_w/\rho_w} \quad (1.22)$$

$$CS_s = CW_s \times K_d/1000 \quad (1.23)$$

onde CW_s = concentração de um dado radionuclídeo i na água
(Ci/m³)

Q_s = quantidade inicial do radionuclídeo i na superfície
(Ci)

K_d = coeficiente de distribuição do radionuclídeo i na
região superficial do solo (cm³/g)

CS_s = concentração do radionuclídeo i no solo (Ci/kg)

1000 = fator de conversão de unidades

A quantidade de água contaminada que entra nas correntes superficiais via escoamento direto da precipitação, V_s (m³/ano), é dada por:

$$V_s = P \times S_s \times f_s \quad (1.24)$$

onde P = precipitação pluviométrica (m/ano)

S_s = área contaminada do sítio (m²)

f_s = fração de escoamento superficial

A quantidade de água contaminada que penetra verticalmente pelo solo e que se supõe toda ela se infiltrando pela cobertura da trincheira, é dada por:

$$V_p = P \times S_s \times (1-f_s) \quad (1.25)$$

Os produtos (concentração na água x volume), determinados a partir das equações acima, fornecem as quantidades Q_m (Ci/ano) e Q_p (Ci/ano) adicionadas anualmente às correntes superficiais e à trincheira, respectivamente.

1.2.6. Ressuspensão atmosférica

A concentração dos radionuclídeos C_{ax} (Ci/m³) em suspensão no ar, próximos à superfície contaminada do sítio, é calculada pela subrotina SUSPND e dada por:

$$C_{ax} = \frac{Q_1}{S_m} \times R_0 \quad (1.26)$$

onde Q_1 = quantidade de radionuclídeo insolúvel sobre a superfície da trincheira (Ci)

S_m = área contaminada do sítio (m²)

R_0 = fator de ressuspensão (m⁻¹)

R_0 é calculado segundo a expressão empírica desenvolvida por Anspaugh⁽¹⁾, dada por:

$$R_0 = R_{01} \times \exp(R_{02} \cdot \sqrt{T}) + R_{03} \quad (1.27)$$

onde R_{01} , R_{02} e R_{03} são constantes empíricas fornecidas pelo usuário e T é o tempo decorrido desde o início da simulação, em dias.

A equação (1.26) aplica-se, porém, à concentração de radionuclídeos no ar próximos ao sítio, a uma altura aproximada de 1m do solo, para superfícies extensas, definidas por Shinn⁽⁶⁰⁾ como sendo compostas de distâncias pelo menos maiores que $(U \cdot H / V_g)$, onde U é a velocidade do vento, H é a altura de mixagem (1 metro) e V_g é a velocidade de deposição gravitacional dos contaminantes em suspensão.

Considerando-se a superfície limitada do sítio, foi introduzido um fator de correção F , aplicável somente se $F < 1$, definido por:

$$F = \frac{V_g \times \sqrt{S_m}}{U \times H} \quad (1.28)$$

onde S_m é a superfície contaminada do sítio.

A taxa de ressuspensão Q_r (Ci/s) disponível ao transporte atmosférico é dada então pela expressão:

$$Q_r = C_{a,r} \times \sqrt{S_m} \times H \times U \times F \quad (1.29)$$

Definido o valor de Q_r , a concentração C_A (Ci/m³) de um dado radionuclídeo no ar, no ponto de interesse, é dado por:

$$C_A = (X/Q) \times Q_r \quad (1.30)$$

onde (X/Q) é o fator de dispersão a ser fornecido como dado entrada, em (s/m³), ou calculado na subrotina AIRTRM, de acordo com a opção do usuário. AIRTRM calcula (\sim) baseado no código DWNWD, desenvolvido por Fields e Miller⁽¹²⁾, apropriado nos casos em que o grupo crítico esteja concentrado em um único setor atmosférico. Para distribuições populacionais mais complexas, (X/Q) poderá ser calculado por códigos tais como AIRDOS-EPA⁽⁴⁰⁾.

1.2.7. Cadeia alimentar e cálculo de dose

A partir desse ponto, PRESTO-II se utiliza de metodologias convencionais geralmente aplicadas em avaliações de impacto radiológico envolvendo determinações de dose via cadeia alimentar^(6,11,14,20,44,50). Essa porção do código, equacionadas nas subrotinas FOOD, IRRIG, HUMEX E DARTAB, não

será objeto da presente análise de sensibilidade; sua descrição detalhada está incluída na documentação de PRESTO-II(13).

CAPITULO 2

CONCEITOS MATEMATICOS APLICADOS A ANALISE DE SENSIBILIDADE

Este capítulo destina-se à apresentação dos conceitos matemáticos fundamentais e de análise estatística empregados neste trabalho.

2.1. CONSTRUÇÃO DE SUPERFÍCIE RESPOSTA

Várias técnicas tem sido propostas para se efetuar análises de sensibilidade em modelos computacionais que simulam processos complexos^(7,10,25,46). Não há, entretanto, nenhum consenso quanto a melhor forma de realizá-la, pois a adequacidade de cada técnica depende essencialmente das propriedades particulares de cada modelo analisado⁽²⁵⁾. Uma das técnicas comumente utilizadas é a substituição do modelo por uma função mais simples denominada superfície resposta⁽⁴⁸⁾.

Uma superfície resposta é uma função usada para se estimar a resposta de um processo de dependa de duas ou mais variáveis. Normalmente, tais superfícies são estimadas a partir de k variáveis independentes X_1, X_2, \dots, X_k , que são as variáveis de entrada do processo modelado, e da

variável Y , que é a resposta do processo. Em geral, o conjunto de dados para se estimar a superfície resposta consiste de n vetores

$$(X_{1j}, X_{2j}, \dots, X_{kj}, Y_j), \quad j = 1, 2, \dots, n$$

Se $k < n-2$, técnicas de regressão podem ser usadas para se construir a função Y da forma

$$\hat{Y} = f(X_1, \dots, X_k, b_0, b_1, \dots, b_k)$$

onde b_0, b_1, \dots, b_k representam os coeficientes estimados da regressão e f é uma função geralmente linear. A função Y é denominada superfície resposta aproximada do processo.

No caso particular de modelos computacionais, as variáveis X_k e Y são geradas a partir de sucessivos processamentos do respectivo código, formando uma matriz de n observações da forma:

$$\begin{array}{c|cccc} X_{11} & X_{21} & \dots & X_{k1} & Y_1 \\ X_{12} & X_{22} & \dots & X_{k2} & Y_2 \\ \vdots & & & & \\ \vdots & & & & \\ X_{1n} & X_{2n} & \dots & X_{kn} & Y_n \end{array} \quad (2.1)$$

A partir deste conjunto de vetores, a construção de uma superfície resposta é uma tentativa de se estabelecer alguma espécie de relação simples entre as variáveis independentes X_k e dependentes Y . Geralmente postula-se que essa relação seja linear, da forma

$$\hat{Y} = b_0 + \sum_{i=1}^k b_i X_i \quad (2.2)$$

determinada por algum processo de regressão linear múltipla.

2.1.1. Regressão linear por etapas

Quando se seleciona as variáveis que vão formar a superfície resposta do modelo por meio de algum método de regressão linear múltipla, normalmente considera-se dois critérios opostos de seleção, ou seja, (1) deseja-se incluir o maior número possível de variáveis, de forma a se obter um ajuste confiável e (2) deseja-se, por outro lado, incluir o menor número possível de variáveis a fim de se minimizar os custos para a obtenção dos dados.

Uma solução de compromisso entre estes dois critérios define o que usualmente se denomina 'a melhor equação da regressão'. Não há, contudo, nenhum procedimento estatístico único para se determinar a melhor regressão e sim uma série de critérios que devem ser escolhidos segundo cada situação em particular.

Uma das técnicas largamente empregadas para o ajuste otimizado das equações, é a regressão passo a passo^(10,17,58). Em primeiro lugar, a regressão seleciona a variável independente X_1 que tenha o maior coeficiente de correlação com a variável dependente Y . A variável inicial selecionada precisa ser responsável por uma quantidade estatisticamente significativa da variação em Y , a algum nível de significância previamente estabelecido; caso contrário, não é efetuada nenhuma regressão e adota-se $\hat{Y} = \bar{Y}$ como o melhor modelo. Como segundo passo, a variável independente com o maior coeficiente de correlação parcial é adicionada à regressão. O procedimento continua adicionando, a cada passo, somente as variáveis estatisticamente significantes, ao mesmo tempo em que é efetuado um teste para verificar se a significância das

variáveis já constantes no modelo não estão sendo alteradas. Se a variável torna-se insignificante, ela é retirada da regressão, com a possibilidade de retornar nas etapas seguintes à medida que outras são adicionadas ou retiradas. Por esse processo, a regressão passo a passo tenta determinar o melhor subconjunto de variáveis independentes que se ajustem ao modelo linear procurado.

Qualquer sistema estatístico de análise de dados que contenha técnicas de regressão linear múltipla, geralmente fornece uma série de informações estatísticas a cada etapa da regressão, tais como valores de R^2 , testes F e níveis de significância associados, estatística de Mallows, coeficientes da regressão, estimativas do erro médio quadrático e outras de interesse estatístico⁽¹⁰⁾. Todas elas podem ser utilizadas para se analisar a superfície resposta ajustada a cada etapa.

2.1.2. Transformação de dados

Se a superfície resposta final selecionada não reproduzir adequadamente a resposta do modelo, torna-se necessário algum trabalho adicional no sentido de se tentar produzir uma nova equação que seja satisfatória.

É evidente que se o modelo for intrinsecamente não linear, então uma das possibilidades é a construção de superfícies por meio de regressões não lineares. Entretanto, esse método oferece inúmeras dificuldades em potencial; especialmente quando o número de variáveis estatisticamente significantes for razoavelmente grande, pode ser difícil formular uma equação não linear que inclua todas elas. Além do mais, ajustes não lineares não são necessariamente reprodutíveis⁽²⁷⁾.

As dificuldades associadas com ajustes lineares ineficientes para modelos não lineares podem ser contornadas efetuando-se alguma espécie de transformação dos dados antes de se iniciar a regressão. Transformadas tais como logaritmo ou raiz quadrada, entre tantas outras possíveis, podem ser muito úteis dependendo do caso particular analisado. Uma das transformações reconhecidamente poderosa, no entanto, aplicável principalmente em modelos monotônicos não lineares, é a transformada por posição^(9,22,23).

Na transformada por posição, todas as variáveis independentes e dependentes são substituídas por sua posição correspondente no conjunto de dados após ordená-las em ordem numérica crescente. Voltando-se à matriz (2.1), por exemplo, cada uma das $(k+1)$ colunas forma um conjunto de dados com n observações. Transformar os dados por posição significa substituir o menor valor de cada conjunto pelo valor 1, o segundo menor valor por 2 e assim por diante, até que o maior valor de cada conjunto seja substituído por n . Note-se que, após os dados serem transformados, os valores médios de X e Y são iguais a $(n(n+1)/2)/n = (n+1)/2$. O efeito desta transformada é tornar linear a relação entre X_k e Y , quando esta for monotônica. E a regressão é efetuada normalmente com o novo conjunto de dados obtido pela transformação.

2.1.3. Validação da superfície resposta

Uma vez construída a superfície resposta, é necessário testar a sua habilidade em reproduzir as respostas do modelo. Convém notar que a validação da superfície resposta é um processo totalmente desvinculado da validação do modelo. Propriamente dito, a qual envolve a verificação de como o modelo reproduz o comportamento dos processos que ele simula.

Uma superfície resposta deve prever corretamente a resposta do modelo usando-se vetores testes gerados por uma distribuição similar à distribuição utilizada para gerar os vetores de entrada para a construção da superfície. Esta é uma condição mínima de aceitabilidade para a sua validação. Convém ressaltar que as expressões 'previsões corretas' e 'distribuições similares' são, de certa forma, subjetivas. O grau de correção, ou de erro, aceitável em uma aproximação de superfície resposta ao seu modelo original, depende do processo que está sendo representado e da finalidade de sua aplicação.

Uma das formas de se comparar os valores de Y obtidos através da superfície resposta, com aqueles calculados pelo modelo, baseia-se na análise das respectivas funções de distribuição empíricas.

Funções de distribuição empíricas podem ser definidas para qualquer conjunto finito de números reais. A afirmação de que S é uma função de distribuição empírica para o conjunto $\{X_i\}$, $i=1$ a N , significa que S é uma função degrau, com N degraus de dimensão $1/N$, de forma que, se X é um número qualquer, então $S(X)$ é a proporção de elementos no conjunto $\{X_i\}$ com valores menores ou iguais a X . Por exemplo, se S é a função de distribuição empírica para o conjunto contendo os números 10, 20, 30, 40 e 50, então o valor de $S(X)$ para $X=45$ é $S(X)=0.80$, ou seja, 80% dos valores no conjunto são menores ou iguais a 45.

Para um dado conjunto de vetores de entrada, as funções de distribuição empíricas dos resultados gerados pelo modelo, $S_1(Y)$, e dos resultados gerados pela superfície

resposta, $S_2(\hat{Y})$, podem ser colocadas em um mesmo gráfico para comparação e analisadas segundo as estatísticas de Kolmogorov-Smirnov ou Cramér-von Mises.

A estatística de Kolmogorov-Smirnov (SMIR) é um parâmetro utilizado para testar se, a um determinado nível de significância, duas amostras são provenientes de uma mesma população. Ela é definida como sendo a distância vertical máxima entre as distribuições cumulativas de duas amostras^(2, 38, 48), ou seja,

$$SMIR(Y, \hat{Y}) = \text{Max}(S_1(Y) - S_2(\hat{Y})) \quad (2.3)$$

A decisão de rejeitar ou não a hipótese $S_1(Y) = S_2(\hat{Y})$, a um nível de significância α , é efetuada comparando-se $SMIR(Y, \hat{Y})$ com os valores tabelados da distribuição de Kolmogorov-Smirnov, $W_{(1-\alpha)}$ ⁽²⁾. Para o caso específico de $\alpha = 0.05$, por exemplo, tem-se que⁽⁴⁸⁾:

$$W_{(1-\alpha)} = W_{0.95} = 1.36 \left[\frac{N_1 + N_2}{N_1 \times N_2} \right]^{1/2} \quad (2.4)$$

onde N_1 e N_2 são o número de elementos em cada conjunto.

Se $SMIR(Y, \hat{Y}) < W_{0.95}$, então a hipótese de que $S_1(Y) = S_2(\hat{Y})$ não pode ser rejeitada, ou seja, considera-se que os valores de Y e \hat{Y} provêm da mesma população, com 5% de chance de se estar aceitando uma hipótese falsa.

A estatística de Cramér-von Mises (CRAM) atua de forma similar, considerando porém a área total das duas distribuições; é definida por:

$$CRAM(Y, \hat{Y}) = \frac{N_1 \times N_2}{(N_1 + N_2)^2} \sum_{i,j} ((S_1(Y_i) - S_2(\hat{Y}_j))^2) \quad (2.5)$$

onde o quadrado da diferença na somatória é calculado para cada valor de Y_i e \hat{Y}_j .

2.2. INDICADORES DE SENSIBILIDADE

Como foi visto anteriormente, um dos objetivos da análise de sensibilidade é posicionar as variáveis independentes do modelo em função de sua influência na distribuição dos valores calculados para a variável dependente. Um indicador de sensibilidade deverá ser alguma espécie de instrumento estatístico capaz de fornecer tal posicionamento das variáveis, ou seja, de ordená-las segundo suas respectivas importâncias na distribuição da resposta do modelo.

Vários parâmetros estatísticos podem ser utilizados como indicadores de sensibilidade, dependendo do tipo de informação que se deseja obter da análise⁽⁴⁶⁾. Entre as mais utilizadas, encontram-se os coeficientes de correlação de Pearson e Spearman, o coeficiente de correlação parcial e o coeficiente da regressão padronizada^(10,20,47).

2.2.1. Coeficiente de correlação de Pearson e Spearman

O coeficiente de correlação de Pearson (PEAR) é uma estatística que indica o grau de dependência linear entre Y e qualquer variável X_i , $i=1,2,\dots,k$, independentemente das informações constantes nas variáveis restantes X_m , $m \neq i$. PEAR é definido pela expressão:

$$\text{PEAR}(Y, X_i) = \frac{\sum_{j=1}^n (X_{1j} - X_1)(Y_j - Y)}{\left(\sum_{j=1}^n (X_{1j} - X_1)^2 \sum_{j=1}^n (Y_j - Y)^2 \right)^{1/2}} \quad (2.8)$$

onde \bar{X}_1 e \bar{Y} são os valores médios de X_{1j} e Y .

O coeficiente de correlação posicional de Spearman (SPEA) é definido de forma análoga ao coeficiente de correlação de Pearson, considerando-se porém, ao invés dos valores originais Y e X_1 , os seus valores transformados por posição $R(Y)$ e $R(X_1)$. Tem-se então que:

$$\text{SPEAR}(Y, X_1) = \text{PEAR}(R(Y), R(X_1)) \quad (2.7)$$

2.2.2. Coeficiente de correlação parcial

O coeficiente de correlação parcial (CCP), ou o seu equivalente posicional - o coeficiente de correlação posicional parcial (CCPP), indica o grau de correlação entre Y e X_1 (ou entre suas posições), removendo-se o efeito devido à correlação de ambas, Y e X_1 , com qualquer outra variável X_m , $m \neq 1$.

Inicialmente computa-se a matriz correlação P , de $(k+1) \times (k+1)$ variáveis, definida por:

$$P = \begin{vmatrix} 1 & P(X_1, X_2) & \dots & P(X_1, X_k) & P(X_1, Y) \\ P(X_2, X_1) & 1 & \dots & P(X_2, X_k) & P(X_2, Y) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ P(X_k, X_1) & P(X_k, X_2) & \dots & 1 & P(X_k, Y) \\ P(Y, X_1) & P(Y, X_2) & \dots & P(Y, X_k) & 1 \end{vmatrix} \quad (2.8)$$

onde $P(a, b) = \text{PEAR}(a, b)$

A partir da matriz inversa de P ,

$$P^{-1} = \begin{vmatrix} q_{11} & q_{12} & \dots & q_{1,k} & q_{1,k+1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ q_{k,1} & q_{k,2} & \dots & q_{k,k} & q_{k,k+1} \\ q_{k+1,1} & q_{k+1,2} & \dots & q_{k+1,k} & q_{k+1,k+1} \end{vmatrix}, \quad (2.9)$$

o coeficiente de correlação parcial entre a variável X_1 e Y é definido por:

$$CCP(Y, X_1) = \frac{-q_{k+1,1}}{(q_{1,1} \times q_{k+1,k+1})^{1/2}} \quad (2.10)$$

analogamente,

$$CCPP(Y, X_1) = CCP(R(Y), R(X_1)) \quad (2.11)$$

2.2.3. Coeficiente da regressão padronizada

Os coeficientes da regressão padronizada (CRP) são definidos a partir da matriz (2.8), por:

$$CRP(Y, X_1) = \frac{-q_{k+1,1}}{q_{k+1,k+1}} \quad (2.12)$$

e correspondem aos coeficientes b_i , $i=1,2,\dots,k$ da regressão

$$\hat{Y}' = b_1 X'_1 + b_2 X'_2 + \dots + b_k X'_k, \quad (2.13)$$

construída com as variáveis normalizadas Y'_j e X'_{1j} , definidas por:

$$Y'_j = \frac{Y_j - \bar{Y}}{S(Y)} \quad \text{e} \quad X'_{1j} = \frac{X_{1j} - \bar{X}_1}{S(X_1)},$$

onde $S(Y)$ e $S(X_1)$ são, respectivamente, o desvio padrão de Y e X_1 .

Note-se que os parâmetros b_1 são independentes da magnitude das unidades de X_1 , tornando-os um meio eficaz de se determinar a importância relativa de cada variável independente.

O coeficiente da regressão posicional padronizada (CRPP) é o equivalente posicional do coeficiente CRP definido pela equação (2.12).

CAPITULO 3

METODOLOGIA DE ANALISE DE SENSIBILIDADE

Este capítulo descreve o cenário referência considerado e as etapas seguidas na análise de sensibilidade de PRESTO-II, adotando-se a metodologia de construção da superfície resposta.

As idéias básicas são: (1) selecionar um conjunto de variáveis potencialmente importantes que definam o modelo; (2) escolher intervalos de variação e distribuição para essas variáveis; (3) gerar dados de entrada para o modelo de acordo com o intervalo e distribuição escolhidos; (4) produzir a resposta do modelo com os dados gerados; (5) procurar uma superfície resposta por algum método de regressão linear múltipla e (6) validar a superfície resposta.

3.1. O SITIO REFERENCIA

A análise de sensibilidade será efetuada considerando-se o sitio de Barnwell como cenário referência. Essa escolha é um tanto quanto arbitrária, pois o código PRESTO-II foi desenvolvido de forma tal que pudesse ser aplicado em diversas condições climatológicas. Optou-se por

Barnwell simplesmente em virtude da maior disponibilidade dos dados necessários à análise; a atividade de cada radionuolideo depositado nas trincheiras, estimada a partir dos registros de recebimento dos rejeitos, está listada na Tabela 3.1<19>.

O repositório localiza-se a aproximadamente 8 km da cidade de Barnwell (South Carolina) e é atualmente um dos três únicos locais de deposição comercial de rejeitos radioativos de atividade baixa em operação nos Estados Unidos. Os outros dois repositórios localizam-se em Beatty (Nevada) e Richland (Washington).

3.1.1. Descrição das variáveis de entrada

PRESTO-II é composto de mais de uma centena de dados de entrada. Muitas variáveis representam, contudo, apenas informações de controle ou opções do código que não são de interesse para a análise de sensibilidade. As variáveis consideradas foram as seguintes:

- NYR1: Primeiro ano no qual uma fração da cobertura da trincheira é removida por algum processo artificial
- NYR2: Último ano no qual uma fração da cobertura da trincheira é removida por algum processo artificial
- FCT1: Fração da cobertura da trincheira que se supõe removida por algum processo artificial, no ano NYR1
- FCT2: Fração da cobertura da trincheira que se supõe removida por algum processo artificial, no ano NYR2
- LEAOPT: Opção para seleção do mecanismo de lixiviação dos radionuolideos na trincheira. Se LEAOPT = 1, os radionuolideos são lixiviados por troca iônica. Se LEAOPT = 5, o usuário deve fornecer como dado de entrada a fração do inventário que é lixiviada

Tabela 3.1. Atividade dos radionuclídeos presentes no repositório de Barrwell, no início da simulação.

Radionuclídeo	Atividade (Ci)
H-3	34499
C-14	9.5
Mn-54	9737
Fe-55	85872
Co-60	432755
Ni-63	11029
Zn-65	7613
Kr-85	1682
Sr-90	2617
Y-90	2617
Tc-99	61
Cd-109	18
Sb-125	2.7
Cs-134	37069
Cs-137	289403
Ba-137m	289403
Ce-141	547
Ce-144	2180
Pm-147	179
Re-187	1.5
Pb-210	22
Ra-226	0.6
Th-232	1.3
U-234	3.0
U-235	3.5
U-238	0.5
U-238	3063
Pu-238	0.2
Pu-239	0.1

anualmente. As demais opções não foram analisadas.

- RELFAC:** Fração do inventário total de cada radionuclídeo que é liberado anualmente da trincheira. Deve ser usado se $LEAOPT = 5$
- WWATL:** Fração da água utilizada para irrigação que provém de poços
- WWATA:** Fração da água do consumo animal que provém de poços
- WWATH:** Fração da água do consumo humano que provém de poços
- SWATL:** Fração da água utilizada para irrigação que provém de fontes superficiais
- SWATA:** Fração da água do consumo animal que provém de fontes superficiais
- SWATH:** Fração da água do consumo humano que provém de fontes superficiais
- PPN:** Precipitação pluviométrica anual média no sítio
- TAREA:** Área da secção horizontal da trincheira
- TDEPTH:** Profundidade da trincheira, da superfície até a sua base
- OVER:** Espessura da camada de solo que cobre inicialmente a trincheira
- PORT:** Porosidade do solo existente dentro da trincheira
- DENCON:** Densidade média dos rejeitos radioativos
- FN:** Fração da água infiltrada pela cobertura da trincheira que segue no sentido vertical de escoamento
- PERHC:** Condutividade hidráulica do meio que compõe a cobertura da trincheira
- DTRAQ:** Distância entre a base da trincheira e a profundidade nominal do aquífero
- DWELL:** Distância percorrida pelo radionuclídeo no aquífero, até o mais próximo ponto de captação de água subterrânea para consumo ou irrigação

GWV: Velocidade linear média da água no aquífero

AQTHK: Espessura do aquífero no ponto de captação

AQDISP: Ângulo de dispersão da pluma contaminante no aquífero

PORA: Porosidade do aquífero

PORV: Porosidade da zona saturada sob a trincheira

PERMV: Condutividade hidráulica da zona saturada sob a trincheira

PORS: Porosidade do solo superficial

BDENS: Densidade do solo superficial

STFLOW: Vazão anual média do rio mais próximo ao sítio

EXTENT: Extensão da área contaminada do sítio

ADEPTH: Profundidade do solo considerado como região ativa para a troca iônica com os contaminantes superficiais

PD: Distância entre a trincheira e o rio mais próximo ao sítio

RUNOFF: Fração da precipitação pluviométrica que se escoia superficialmente, sem se infiltrar pela cobertura da trincheira

VG: Velocidade de deposição gravitacional das partículas de solo contaminado em suspensão na atmosfera

U: Velocidade média do vento

VD: Velocidade de deposição eletroquímica das partículas de solo contaminado em suspensão na atmosfera, próximas à superfície

XG: Distância da trincheira ao grupo crítico ou indivíduo de interesse, relativos a contaminação atmosférica

FTWIND: Fração do tempo em que o vento sopra no sentido do grupo crítico ou indivíduo de interesse

CHIQ: Fator de dispersão atmosférica

RE: Fator de ressuspensão

EAM1YR: Evapotranspiração potencial

SOILOS: Perda anual de solo decorrente de processos de erosão natural

XKD1(I): Coeficiente de distribuição do radionuclídeo I, no solo superficial

XKD2(I): Coeficiente de distribuição do radionuclídeo I, no meio que compõe o interior da trincheira

XKD3(I): Coeficiente de distribuição do radionuclídeo I, na zona saturada sob a trincheira

XKD4(I): Coeficiente de distribuição do radionuclídeo I, no aquífero

Algumas alterações foram introduzidas em PRESTO-II, de forma a facilitar a interpretação dos mecanismos de transporte dominantes. Na realidade, EAM1YR e SOILOS não são variáveis de entrada especificados pelo usuário e sim variáveis intermediárias calculadas pelas subrotinas EVAPO e ERORF. Como elas descrevem fenômenos bem específicos e podem ser calculadas independentemente de outros dados de entrada, informações mais condensadas podem ser obtidas da análise de sensibilidade considerando-as como duas variáveis independentes. O mesmo ocorre com a variável RE que, originalmente, é calculada na subrotina SUSPND em função de Re_1 , Re_2 e Re_3 (equação 1.27).

3.1.2. Descrição das variáveis de saída

Em sua versão original, PRESTO-II tem como variáveis de saída uma série de dados dosimétricos calculados pela subrotina DARTAB. São, porém, sempre baseados na média dos valores de concentração dos radionuclídeos sobre todos os N anos de simulação.

Suponhamos, por exemplo, que $N = 1000$ e que uma dose média anual qualquer, calculada para um dado grupo crítico, seja de 1 mSv. Esse valor obtido ignora a distribuição de dose nesse período. De fato, a dose poderia ser decorrente de 1 mSv/ano, durante os 1000 anos, como também de, em um caso extremo, uma única exposição anual de 1000 mSv; em ambas as hipóteses, a dose anual média computada seria de 1 mSv.

A fim de permitir o cálculo da máxima dose anual no grupo crítico durante os anos de simulação, alterou-se, neste trabalho, a estrutura computacional de PRESTO-II.

Na análise de sensibilidade, as seguintes variáveis dependentes foram consideradas:

YA1 a YA5: dose equivalente efetiva média anual em 1000 anos de simulação

YA1 corresponde à dose parcial decorrente da ingestão de alimentos contaminados

YA2 corresponde à dose parcial decorrente da inalação do ar contaminado

YA3 corresponde à dose parcial decorrente da imersão no ar contaminado

YA4 corresponde à dose parcial decorrente da exposição à contaminação superficial do solo

YA5 corresponde à dose total

YH1 a YH5: máxima dose equivalente efetiva anual em 1000 anos de simulação

YH1 corresponde à dose parcial decorrente da ingestão de alimentos contaminados

YH2 corresponde à dose parcial decorrente da inalação do ar contaminado

YM3 corresponde à dose parcial decorrente da imersão no ar contaminado

YM4 corresponde à dose parcial decorrente da exposição à contaminação superficial do solo

YM5 corresponde à dose total

3.1.3. Seleção do intervalo de variação das variáveis de entrada

A primeira etapa de uma análise de sensibilidade é a definição do intervalo de valores a partir do qual as variáveis independentes serão amostradas.

Os intervalos de variação das variáveis de entrada foram selecionados de acordo com dados disponíveis da literatura^(2,8,57) ou segundo critérios pessoais de julgamento quando não foi possível a obtenção de dados específicos do sítio. Os valores mínimo e máximo adotados nem sempre representam situações reais do sítio, pois foram selecionados somente com o intuito exploratório, onde procurou-se cobrir o intervalo possível de variação, e não o mais provável.

Os valores selecionados encontram-se na Tabela 3.2. Os valores padrões reportados são provavelmente aqueles mais representativos para o sítio de Barnwell, recomendados na documentação de PRESTO-II⁽¹²⁾.

3.2. CONSTRUÇÃO DA SUPERFÍCIE RESPOSTA

3.2.1. Seleção preliminar de variáveis

Antes de se iniciar a construção da superfície resposta, é importante examinar alguns aspectos preliminares da relação existente entre as variáveis dependentes e

TABELA 3.2. Intervalo de amostragem das variáveis consideradas para as análises de sensibilidade.

VARIÁVEL	UNIDADE	VALOR PADRÃO	VALOR MÍNIMO	VALOR MÁXIMO
NYR1	*	100	10	-
NYR2	*	200	-	1000
PCT1	*	0.01	0	-
PCT2	*	0.1	-	1
LEAOPT	*	1	1	5
RELFAC	*	-	1.0E-05	1.0E-01
WWATL	*	1.	0.	1.
WWATA	*	1.	0.	1.
WWATH	*	1.	0.	1.
SWATL	*	0.	0.	1.
SWATA	*	0.	0.	1.
SWATH	*	0.	0.	1.
FPN	m/ano	1.13	0.623	2.025
TAREA	m ²	9303.	7500.	11300.
TDEPTH	m	8.1	4.9	7.3
OVER	m	1.5	1.0	3.0
PORT	*	0.40	0.30	0.50
DENCON	g/cm ³	2.0	1.0	10.
FN	*	1.0	0.5	1.0
PERMC	m/ano	43.3	0.725	830.
DTRAQ	m	5.5	2.4	11.5
DWELL	m	914.	1.0	10000.
GWV	m/ano	2.15	0.028	32.
AQTHK	m	25.	10.	85.
AQDISP	radiano	0.3	0.087	1.0
PORA	*	0.40	0.30	0.50
PORV	*	0.40	0.30	0.50
PERMV	m/ano	43.3	0.725	830.
PORS	*	0.40	0.30	0.50
BDENS	g/cm ³	1.8	1.3	1.9
STFLOW	m ³ /ano	5300.	2850.	7850.
EXTENT	m	305.	274.	338.
ADEPTH	m	0.01	0.005	1.0
PD	m	914.	500.	1500.
RUNOFF	*	0.05	0.05	0.35
VG	m/s	0.01	0.0004	0.05
U	m/s	5.0	0.1	10.
VD	m/s	0.01	0.0004	0.05
XJ	m	8000.	1.	10000.
FTWIND	*	0.40	0.20	0.80
CHIQ	s/m ³	7.7E-09	1.0E-11	1.0E-08
RAM1YR	m/ano	0.789	0.505	1.093
SOILOS	ton/ha.ano	1.4	0.01	12.
RE1	*	1.0E-08	1.0E-07	1.0E-05
RE2	*	-0.15	-0.25	-0.05
RE3	*	1.0E-11	1.0E-12	1.0E-10
XKD(H-3)	cm ³ /g	0.0	0.0	0.01
XKD(C-14)	cm ³ /g	0.0	0.0	0.01

* significa adimensional

(continua...)

TABELA 3.2. Intervalo de amostragem das variáveis consideradas para as análises de sensibilidade.

(...continuação)

VARIÁVEL	UNIDADE	VALOR PADRÃO	VALOR MÍNIMO	VALOR MÁXIMO
XKD(Mn-54)	cm ³ /g	150.	0.2	10000.
XKD(Fe-55)	cm ³ /g	55.	1.4	1000.
XKD(Co-60)	cm ³ /g	55.	0.2	3600.
XKD(Ni-63)	cm ³ /g	150.	0.2	10000.
XKD(Zn-65)	cm ³ /g	18.	0.1	6000.
XKD(Sr-90)	cm ³ /g	27.	0.15	3300.
XKD(Y-90)	cm ³ /g	27.	0.15	3300.
XKD(Tc-99)	cm ³ /g	0.033	0.0028	0.28
XKD(Cd-109)	cm ³ /g	6.7	1.28	26.8
XKD(Sb-125)	cm ³ /g	45.	0.4	4500.
XKD(Cs-134)	cm ³ /g	1100.	10.	52000.
XKD(Cs-137)	cm ³ /g	1100.	10.	52000.
XKD(Ba-137m)	cm ³ /g	1100.	10.	52000.
XKD(Ce-141)	cm ³ /g	1100.	58.	6000.
XKD(Ce-144)	cm ³ /g	1100.	58.	6000.
XKD(Pm-147)	cm ³ /g	81.	0.8	8100.
XKD(Re-187)	cm ³ /g	7.5	0.7	7500.
XKD(Pb-210)	cm ³ /g	99.	4.5	7640.
XKD(Ra-226)	cm ³ /g	220.	2.2	22000.
XKD(Th-232)	cm ³ /g	60000.	2000.	510000.
XKD(U-234)	cm ³ /g	45.	10.5	4400.
XKD(U-235)	cm ³ /g	45.	10.5	4400.
XKD(U-238)	cm ³ /g	45.	10.5	4400.
XKD(U-238)	cm ³ /g	45.	10.5	4400.
XKD(Pu-239)	cm ³ /g	1800.	11.	300000.
XKD(Pu-239)	cm ³ /g	1800.	11.	300000.

* significa adimensional

independentes, no sentido se de minimizar, se possível, o número de variáveis candidatas à construção da superfície.

A Tabela 3.2 indica a presença de 74 variáveis iniciais, o que torna a construção de superfície resposta com tal número de parâmetros inviável, sob o ponto de vista de tempo de computação requerido para gerar o conjunto de vetores necessários à regressão linear múltipla.

Torna-se necessário, portanto, adotar algum método que efetue uma avaliação preliminar das variáveis que influenciam de forma significativa na resposta do modelo. Com esse objetivo, definiu-se um coeficiente de sensibilidade CS_j ,

$$CS_j = 1 - (Y_{\min}/Y_{\max}), \quad (3.1)$$

executando-se o código duas vezes para cada variável independente X_j constantes na Tabela 3.2. A primeira, com o valor mínimo de X_j , conservando-se todas as demais variáveis em seu valor padrão e a segunda, com o valor máximo de X_j , produzindo, respectivamente, as doses equivalentes efetivas $Y(X_{\min})$ e $Y(X_{\max})$; na equação (3.1), Y_{\min} é o menor dos dois valores obtidos.

O código foi processado com os valores de DWELL (distância da trincheira ao poço) fixos em 0.1, 100 e 914 metros, para que se pudesse verificar a sensibilidade de todas as variáveis em condições simultaneamente favoráveis de migração dos radionuclídeos. Diminuir a distância DWELL significa, em última análise, reduzir artificialmente o tempo de trânsito dos contaminantes.

As Tabelas 3.3 a 3.5 mostram os resultados obtidos para os coeficientes de sensibilidade, considerando-se como

saida do código as variáveis dependentes dose média anual (YA5) e dose máxima anual (YM5) em 1000 anos de simulação, para valores de DWELL iguais a 914, 100 e 0.1 metro, respectivamente. As novas variáveis CAP, STR1 e STR2 correspondem à variação conjunta de (NYR1, NYR2, PCT1 e PCT2), (NWATL, NWATA e NWATH) e (SWATL, SWATA e SWATH), respectivamente. Os valores de $Y(X_{min})$ e $Y(X_{max})$ são dados em nrem/ano.

As variáveis que apresentaram pelo menos um dos coeficientes de sensibilidade maior do que 0.01 foram selecionadas para a construção da superfície resposta. O valor adotado de 0.01 é arbitrário e reflete apenas um critério subjetivo de escolha, que poderá ser revisto caso os resultados finais indiquem a necessidade de inclusão de mais variáveis. A Tabela 3.6 sintetiza as 24 variáveis selecionadas, indicando os respectivos intervalos e distribuições de amostragem; as variáveis foram redefinidas segundo novas nomenclaturas, ou seja, A1 corresponde à PPN, A2 à TDEPTH, e B12 à XKD(Pu-239).

3.2.2. Geração dos dados de entrada

Como foi visto no Capítulo 1, a variável RELFAC (fator de liberação anual) só é acionada se o código for processado numa opção específica de lixiviação.

Foram efetuadas então duas análises de sensibilidade distintas: a primeira, à qual chamaremos de análise de sensibilidade 1, refere-se ao código processado com a opção de lixiviação centralizado no conceito de troca iônica e a segunda, à qual chamaremos de análise de sensibilidade 2, refere-se ao código processado tomando-se a lixiviação como

TABELA 3.3. Coeficientes de sensibilidade (CS) considerando-se DWELL = 914 m. Os radionuclídeos referem-se aos seus respectivos coeficientes de distribuição K_{RD}. Os valores de Y(X_{min}) e Y(X_{max}) são dados em areca/ano. Os espaços em branco indicam que CS < 0.001.

VARIÁVEL INDEPENDENTE	VARIÁVEL DEPENDENTE YA5			VARIÁVEL DEPENDENTE YM5		
	Y(X _{min})	Y(X _{max})	CS	Y(X _{min})	Y(X _{max})	CS
PPM	6.83E-09	0.265	1.00	1.09E-08	202.	1.00
TAREA						
TDEPTH				120.	94.6	0.21
OVER						
PORT						
DENCON				150.	31.3	0.79
FN				66.3	108.	0.37
PERMC						
DTRAQ						
DWELL	0.844	5.70E-09	1.00	687.-08	1.09E-08	1.00
GWV	5.70E-09	0.393	1.00	1.09E-08	130.	1.00
AGTHK						
AGDISP						
FORA						
FORV						
PERMV						
VG						
U						
VD						
XG	0.288	0.275	0.04	103.	108.	0.03
FTWIND						
CHIQ						
BDENS	0.274	0.275	0.004			
STFLOW						
EXTENT						
ADEPTH						
FORS	0.278	0.274	0.01			
PD						
RUNOFF	0.275	5.71E-09	1.00	108.	1.09E-08	1.00
RE						
EAH1YR	0.287	6.71E-09	1.00	149.	1.09E-08	1.00
SOILOS						
CAP						
STR1	2.68E-05	0.275	1.00	1.00E-03	108.	1.00
STR2						
LEAOPT	0.275	7.95E-09	1.00	108.	2.13E-08	1.00
RELFAC	1.40E-03	0.275	1.00	2.75E-03	28.1	1.00
H-3						
C-14						
Mn-54						
Fe-55						
Co-60						
Ni-63	0.299	0.275	0.06			
Zn-65						

(continua...)

TABELA 3.3. Coeficientes de sensibilidade (CS) considerando-se DWELL = 914 a. Os radionuclídeos referem-se aos seus respectivos coeficientes de distribuição KD. Os valores de $Y(X_{min})$ e $Y(X_{max})$ são dados em area/ano. Os espaços em branco indicam que $CS < 0.001$.

(...continuação)

VARIÁVEL INDEPENDENTE	VARIÁVEL DEPENDENTE YAS			VARIÁVEL DEPENDENTE YMS		
	$Y(X_{min})$	$Y(X_{max})$	CS	$Y(X_{min})$	$Y(X_{max})$	CS
Sr-90						
Y-90						
Tc-99	0.273	0.292	0.07	230.	20.0	0.91
Cd-109						
Sb-125						
Cs-134						
Cs-137						
Ba-137m						
Ce-141						
Ce-144						
Pm-147						
Rb-187						
Pb-210						
Ra-226						
Th-232						
U-234						
U-235						
U-238						
U-238						
Pu-238						
Pu-239						

TABELA 3.4. Coeficientes de sensibilidade (CS) considerando-se DWELL = 100 m. Os radionuclídeos referem-se aos seus respectivos coeficientes de distribuição K₁₀. Os valores de Y(X_{min}) e Y(X_{max}) são dados em arem/ano. Os espaços em branco indicam que CS < 0.001.

VARIÁVEL INDEPENDENTE	VARIÁVEL DEPENDENTE YA5			VARIÁVEL DEPENDENTE YM5		
	Y(X _{min})	Y(X _{max})	CS	Y(X _{min})	Y(X _{max})	CS
PPN	6.83E-09	0.329	1.00	1.09E-06	203.	1.00
TAREA				120.	94.8	0.21
TDEPTH						
OVER						
PORT						
DENCON				151.	55.2	0.63
FN	0.303	0.318	0.05	66.4	106.	0.37
PERMC						
DTRAQ	0.329	0.301	0.09			
DWELL	0.844	5.70E-09	1.00	687.	1.08E-06	1.00
GHV	5.70E-08	0.756	1.00	1.09E-06	482.	1.00
AQTHK						
AQDISP						
PORA						
PORV	0.323	0.314	0.03			
PERMV						
VG						
U						
VD						
XG	0.330	0.318	0.04	103.	106.	0.03
FTWIND						
CHIQ						
BDENS	0.318	0.319	0.003			
STFLOW						
EXTENT						
ADEPTH						
PORS	0.318	0.318	0.003			
PD						
RUNOFF	0.318	5.71E-09	1.00	106.	9.90E-07	1.00
RE						
EAM1YR	0.321	6.71E-09	1.00	148.	1.08E-06	1.00
SOILOS						
CAP						
STR1	2.69E-05	0.318	1.00	6.11E-04	106.	1.00
STR2						
LRAOPT	0.318	6.30E-09	1.00	106.	2.14E-06	1.00
RELFAC	2.59E-03	0.304	1.00	3.03E-03	28.1	1.00
H-3	0.318	0.313	0.02			
C-14						
Mn-54						
Fe-55						
Co-60						
Ni-63	2.08	0.318	0.65	186.	106.	0.43
Zn-65						

(continua...)

TABELA 3.4. Coeficientes de sensibilidade (CS) considerando-se DWELL = 100 m. Os radionuclídeos referem-se aos seus respectivos coeficientes de distribuição K_D. Os valores de Y(X_{min}) e Y(X_{max}) são dados em mrem/ano. Os espaços em branco indicam que CS < 0.001.

(...continuação)

VARIÁVEL INDEPENDENTE	VARIÁVEL DEPENDENTE YA5			VARIÁVEL DEPENDENTE YM5		
	Y(X _{min})	Y(X _{max})	CS	Y(X _{min})	Y(X _{max})	CS
Sr-90	1.21	0.318	0.74	135.	108.	0.21
Y-90	1.55	0.318	0.79	184.	108.	0.42
Tc-99	0.318	0.337	0.08	230.	55.2	0.78
Cd-109						
Sb-125						
Cs-134						
Cs-137						
Ba-137 _m						
Ce-141						
Ce-144						
Pm-147						
Re-187						
Pb-210						
Ra-226	0.657	0.318	0.63			
Th-232						
U-234						
U-235						
U-236						
U-238						
Pu-238						
Pu-239						

TABELA 3.5. Coeficientes de sensibilidade (CS) considerando-se DWELL = 0.1 m. Os radionuclídeos referem-se aos seus respectivos coeficientes de distribuição X_{CD}. Os valores de Y(X_{min}) e Y(X_{max}) são dados em arem/ano. Os espaços em branco indicam que CS < 0.001.

VARIÁVEL INDEPENDENTE	VARIÁVEL DEPENDENTE YA5			VARIÁVEL DEPENDENTE YM5		
	Y(X _{min})	Y(X _{max})	CS	Y(X _{min})	Y(X _{max})	CS
PPN	6.83E-09	13.1	1.00	1.09E-06	1060.	1.00
TAREA						
TDEPTH						
OVER						
PORT						
DENCON						
FN	0.838	0.844	0.24	374.	581.	0.38
PERMC						
DTRAQ	3.24	0.638	0.80	768.	374.	0.51
DWELL	0.844	5.70E-09	1.00	687.	1.09E-06	1.00
GWV	0.756	0.844	0.10	492.	581.	0.15
AQTHK						
AQDISP						
FORA						
PORV	0.912	0.784	0.14	649.	520.	0.20
PERMV						
V3						
U						
VD						
X3	0.855	0.844	0.01	580.	581.	0.002
FTWIND						
CHIQ						
BDENS	0.844	0.845	0.001	688.	581.	0.15
STFLOW						
EXTENT						
ADEPTH						
PORS	0.845	0.844	0.001			
PD						
RUNOFF	0.844	5.71E-09	1.00	581.	9.90E-07	1.00
RE						
EAM1YR	4.52	8.71E-09	1.00	768.	1.08E-06	1.00
SOILOS						
CAP						
STR1	2.89E-05	0.844	1.00	6.11E-04	581.	1.00
STR2						
LEAOP	0.844	1.28E-08	1.00	581.	4.89E-08	1.00
RELFAC	2.81E-03	0.858	1.00	6.11E-03	75.6	1.00
H-3	0.844	0.831	0.02	581.	406.	0.30
C-14				581.	577.	0.01
Mn-54						
Fe-55						
Co-60	141.	0.844	0.98	19800.	581.	0.87
Ni-63	3.81	0.844	0.78			
Zn-65	0.845	0.844	0.001			

(continua...)

TABELA 3.5. Coeficientes de sensibilidade (CS) considerando-se DWELL = 0.1 a. Os radionuclídeos referem-se aos seus respectivos coeficientes de distribuição X_{RD}. Os valores de Y(X_{min}) e Y(X_{max}) são dados em arem/ano. Os espaços em branco indicam que CS < 0.001.

(...continuação)

VARIÁVEL INDEPENDENTE	VARIÁVEL DEPENDENTE YA5			VARIÁVEL DEPENDENTE YM5		
	Y(X _{min})	Y(X _{max})	CS	Y(X _{min})	Y(X _{max})	CS
Sr-90	8.35	0.844	0.87	849.	581.	0.32
Y-90	8.38	0.844	0.90	1150.	581.	0.49
Tc-99	0.842	0.863	0.02	811.	581.	0.28
Cd-109						
Sb-125						
Cs-134						
Cs-137	1.16	0.844	0.27			
Ba-137m	1.01	0.844	0.18			
Ce-141						
Ce-144						
Pm-147						
Re-187						
Pb-210	0.848	0.844	0.005			
Ra-226	1.51	0.844	0.44			
Th-232						
U-234	0.856	0.844	0.01			
U-235	0.673	0.844	0.03			
U-238	0.848	0.844	0.002			
U-238	10.8	0.844	0.82			
Pu-238	0.845	0.844	0.001			
Pu-239	0.998	0.844	0.18			

TABELA 3.6. Variáveis independentes selecionadas para a construção da superfície resposta.

VARIÁVEL INDEPENDENTE		UNIDADE	INTERVALO DE VARIAÇÃO		DISTRIBUIÇÃO
PPN	(A1)	m/ano	1.04	- 1.22	uniforme
TDEPTH	(A2)	m	4.9	- 7.3	uniforme
DENCON	(A3)	g/cm ³	1.0	- 10.	uniforme
FN	(A4)	*	0.5	- 1.0	uniforme
DTRAQ	(A5)	m	3.0	- 12.1	uniforme
GWV	(A6)	m/ano	0.06	- 15.	log-uniforme
PORV	(A7)	*	0.30	- 0.50	uniforme
XG	(A8)	m	1.	- 10000.	uniforme
BDENS	(A9)	g/cm ³	1.3	- 1.9	uniforme
RUNOFF	(A10)	*	0.05	- 0.35	uniforme
EAM1YR	(A11)	m/ano	0.750	- 0.648	uniforme
RELFAC	(A12)	*	0.00001	- 0.1	log-uniforme
XKD(H-3)	(B1)	cm ³ /g	0.0	- 0.01	uniforme
XKD(Co-60)	(B2)	cm ³ /g	0.2	- 3600.	log-uniforme
XKD(Ni-63)	(B3)	cm ³ /g	0.2	- 10000.	log-uniforme
XKD(Sr-90)	(B4)	cm ³ /g	0.15	- 3300.	log-uniforme
XKD(Y-90)	(B5)	cm ³ /g	0.15	- 3300.	log-uniforme
XKD(Tc-99)	(B6)	cm ³ /g	0.0029	- 0.28	log-uniforme
XKD(Cs-137)	(B7)	cm ³ /g	10.	- 52000.	log-uniforme
XKD(Ba-137m)	(B8)	cm ³ /g	10.	- 52000.	log-uniforme
XKD(Ra-226)	(B9)	cm ³ /g	2.2	- 22000.	log-uniforme
XKD(U-235)	(B10)	cm ³ /g	10.5	- 4400.	log-uniforme
XKD(U-238)	(B11)	cm ³ /g	10.5	- 4400.	log-uniforme
XKD(Pu-239)	(B12)	cm ³ /g	11.	- 30000.	log-uniforme

* significa adimensional

variável de entrada a ser fornecido pelo usuário através de RELFAC.

Para a análise de sensibilidade 1 foram gerados 500 vetores (A1, A2,....., A11, B1, B2,....., B12), amostrados aleatoriamente pela técnica de Monte Carlo simples, de acordo com os intervalos de variação e distribuições apresentados na Tabela 3.8. Posteriormente, o código PRESTO-II foi processado 500 vezes com esses vetores, com a opção de lixiviação LEAOPT=1 e mantendo-se sempre as demais variáveis em seus valores padrões recomendados para o sítio de Barnwell, gerando-se as variáveis dependentes YA1,....,YA5, YM1,....,YM5.

Analogamente, para a análise de sensibilidade 2 foram gerados outros 500 vetores (A1, A2,...., A12, B1, B2,...., B12), o código PRESTO-II foi processado mais 500 vezes com a opção de lixiviação LEAOPT=5 e gerou-se novamente as variáveis YA1,...., YA5, YM1,....,YM5.

3.2.3. Regressão linear múltipla

Dado o conjunto de vetores definido no sub-item anterior, efetuou-se uma regressão linear múltipla passo a passo através do sistema estatístico SAS⁽⁴⁹⁾, disponível no Centro de Processamento de Dados do IPEN. Foram utilizados os valores de R^2 (coeficiente de determinação) e de C_p (estatística de Mallows) como critério de escolha do passo em que a regressão é interrompida, uma vez que é característica da regressão passo a passo a inclusão de todas as variáveis estatisticamente significativas a determinado nível pré-estabelecido, mesmo que elas pouco acrescentem à capacidade da superfície resposta em produzir os mesmos resultados do modelo a ser substituído.

Uma vez definidas as k variáveis independentes X_i componentes da superfície resposta, esse subconjunto foi expandido de forma a incluir todos os quadrados e produtos cruzados das variáveis. Nesta etapa da regressão, o novo conjunto seria constituído então das $k(k+3)/2$ seguintes variáveis:

$$\begin{array}{ll} X_i, & i=1, \dots, k \quad (k \text{ variáveis}) \\ X_i^2, & i=1, \dots, k \quad (k \text{ variáveis}) \\ X_i X_j, & i=1, \dots, k; j=1, \dots, k; i \neq j; \quad (k(k-1)/2 \text{ variáveis}) \end{array}$$

Foram introduzidos, ainda, m quocientes $X_i X_j^{-1}$, $i \neq j$, seleccionados dentre aquelas variáveis com coeficientes de correlação significativos e cujos quocientes pudessem ter algum significado físico razoável, como por exemplo a relação precipitação pluviométrica/evapotranspiração.

Normalmente, a selecção dessas k variáveis poderia ser efectuada analisando-se os coeficientes de correlação. Optou-se, porém, por uma regressão preliminar em virtude do facto de que ela permite estabelecer critérios de selecção mais objetivos do que pela análise dos coeficientes de correlação. A partir desse conjunto de $(k(k+3)/2 + m)$ variáveis foi efectuada a regressão final para definir a superfície resposta procurada.

CAPITULO 4

ANALISE DE SENSIBILIDADE 1: RESULTADOS E DISCUSSOES

Este capítulo apresenta as superfícies resposta obtidas, a classificação das variáveis mais importantes do modelo e os testes de validação das superfícies resposta ajustadas em função dos dados da análise de sensibilidade 1. Somente as variáveis dependentes YA5 e YH5 foram consideradas para as análises de sensibilidade pois elas representam a soma das quatro outras componentes respectivas (YA1,....., YA4 e YH1,....., YH4).

Além do mais, note-se que as variáveis YH1, YH2, YH3 e YH4 não correspondem necessariamente às doses anuais máximas por ingestão, inalação, inersão atmosférica e exposição à contaminação superficial, respectivamente, observadas no período de anos simulado pelo código. Essas variáveis correspondem aos valores da dose no ano em que a soma delas assume o valor máximo, e não cada uma individualmente. PRESTO-II não está programado para gerar esta informação.

4.1. AJUSTE DAS SUPERFÍCIES RESPOSTA

Duas formas de regressão foram efetuadas para se tentar o ajuste da superfície resposta. Primeiro efetuou-se a regressão com os dados originais, ou seja, sem efetuar nenhuma espécie de transformada nas variáveis e, depois, os dados foram substituídos pela suas respectivas posições dentro do conjunto de vetores utilizados para a regressão.

As Tabelas 4.1 a 4.4 mostram os resultados obtidos com as regressões preliminares efetuadas com as 23 variáveis independentes $A_1, A_2, \dots, A_{11}, B_1, B_2, \dots, B_{12}$ e os resultados obtidos com as regressões finais efetuadas a partir do conjunto formado pelas variáveis selecionadas na regressão preliminar respectiva. Para que as variáveis fossem incluídas ou excluídas da regressão, estabeleceu-se como nível de significância o valor $F=0.15$.

Cada tabela contém as seguintes informações: (1) o número de variáveis incluídas na regressão, (2) as variáveis selecionadas e os valores dos respectivos parâmetros que definem os coeficientes da regressão, (3) o coeficiente de determinação R^2 do modelo e (4) o coeficiente de Mallows. Adotou-se como sendo a regressão mais adequada aquela em que o valor do coeficiente de Mallows mais se aproximou do número de graus de liberdade da equação ajustada.

4.1.1. Em função da dose média anual

Os resultados obtidos efetuando-se as regressões com os valores não transformados, considerando-se a dose média

Tabela 4.1. Resultados da regressão linear para a dose média anual (YA5), com os valores não transformados.

No. de variáveis	variáveis selecionadas	coeficientes da regressão	R ²	C _p
Regressão preliminar				
4	A1	0.3480	0.5295	2.7950
	A8	0.0344		
	A10	-0.3647		
	A11	-0.0003		
Regressão final				
10	A8	0.2218	0.6440	8.5523
	A1.A1	-0.7205		
	A1.A8	0.1201		
	A1.A10	4.1348		
	A1.A11	0.0009		
	A8.A8	-0.0044		
	A8.A10	-0.0979		
	A8.A11	-0.0003		
	A10.A10	-4.4754		
	A10.A11	-0.0037		

Tabela 4.2. Resultados da regressão linear para a dose média anual (YA5), com os valores transformados por posição.

No. de variáveis	variáveis selecionadas	coeficientes da regressão	R ²	C _p
Regressão preliminar				
7	A2	0.0845	0.8831	8.9093
	A6	0.6166		
	A8	-0.1057		
	A9	0.0861		
	A10	-0.1515		
	B2	0.2683		
	B7	0.2174		
Regressão final				
11	A10	-0.6632	0.8970	9.3015
	A2.A6	-0.7013		
	A2.A8	0.1544		
	A2.A9	0.0976		
	A6.A8	0.3719		
	A6.A10	1.0785		
	A6.B2	0.2787		
	A6.B7	0.2661		
	A8.A10	-0.1372		
	A8/A6	-0.6517		
	A10/A6	0.9040		

Tabela 4.3. Resultados da regressão linear para a dose máxima anual (YM5), com os valores não transformados.

No. de variáveis	variáveis selecionadas	coeficientes da regressão	R ²	C _p
----- Regressão preliminar -----				
7	A1	-72.8417	0.4387	7.3637
	A3	-1.4868		
	A4	21.9586		
	A6	3.6044		
	A10	-132.8532		
	A11	-0.0620		
	B6	-96.5003		
----- Regressão final -----				
28	A3	16.7858	0.7025	29.8583
	A4	147.1847		
	A6	-15.5702		
	A10	-688.4273		
	A1.A3	-21.2585		
	A1.A6	23.4553		
	A1.A11	0.2083		
	A1.B6	-499.2153		
	A3.A3	0.4332		
	A3.A4	-3.7645		
	A3.A6	-0.4805		
	A3.A10	17.3992		
	A3.B6	9.3575		
	A4.A4	-66.8237		
	A4.A6	8.7476		
	A4.A10	-127.8777		
	A6.A6	-0.4951		
	A6.10	-21.3280		
	A6.B6	-23.7303		
	A10.A10	378.2414		
	A10.A11	0.4231		
	A10.B6	1025.9084		
	A1.A11	-0.0002		
	B6.B6	1134.8804		
	A10/A6	10.8841		
	A11/A6	-0.0036		

Tabela 4.4. Resultados da regressão linear para a dose máxima anual (YM5), com os valores transformados por posição.

No. de variáveis	variáveis selecionadas	coeficientes da regressão	R ²	C _p
Regressão preliminar				
10	A1	0.0839	0.8912	8.8614
	A2	0.0552		
	A4	0.0687		
	A6	0.6201		
	A8	-0.0878		
	A9	0.0811		
	A10	-0.2469		
	A11	-0.0713		
	B2	0.2936		
	B7	0.1969		
Regressão final				
11	A8	-3.8471	0.9065	10.2789
	A4.A6	3.2897		
	A4.A11	-0.3682		
	A8.A8	0.2958		
	A8.A10	1.4501		
	A9.A10	0.2009		
	B2.B7	0.3072		
	A8/A6	-0.5182		
	A10/A1	-0.6998		
	A10/A6	-0.6473		
	A11/A6	1.5377		

anual (YA5) como variável dependente, são apresentados na Tabela 4.1. Na regressão preliminar foram selecionadas as variáveis A1 (precipitação pluviométrica), A6 (velocidade linear média da água no aquífero), A10 (fração da precipitação pluviométrica que se escoou superficialmente) e A11 (evapotranspiração). Para o ajuste da regressão definitiva foram acrescentados os seus respectivos quadrados, todos os produtos cruzados possíveis e os seguintes quocientes:

$$A10.A1^{-1}, A10.A6^{-1}, A11.A1^{-1} \text{ e } A11.A6^{-1}$$

Foram escolhidos esses quocientes porque as variáveis que compõem cada um deles apresentam coeficientes de correlação de Pearson com sinais opostos entre si.

Na Tabela 4.2 são apresentados os resultados obtidos efetuando-se as regressões com os dados transformados por posição, sendo selecionadas as variáveis A2 (profundidade da trincheira), A6, A8 (distância da trincheira ao grupo crítico), A9 (densidade do solo superficial), A10, B2 (coeficiente de distribuição do Co-80) e B7 (coeficiente de distribuição do Cs-137). Para o ajuste da regressão final, além dessas variáveis foram considerados os seus respectivos quadrados, produtos cruzados e os quocientes $A8.A6^{-1}$ e $A10.A6^{-1}$.

A análise destas duas formas de regressão, ou seja, com e sem transformação de dados, mostra resultados de certa forma discrepantes entre si quanto às variáveis escolhidas para comporem a superfície resposta, visto que somente A6 e A10 são comuns às duas regressões. Nos itens subsequentes discute-se mais detalhadamente as respostas obtidas.

4.1.2. Em função da dose máxima anual

Da mesma forma que foram efetuadas as regressões para a dose média anual, ajustou-se duas superfícies resposta considerando-se a dose máxima anual (YH5) como variável dependente: com dados não transformados e com dados transformados por posição.

Na Tabela 4.3 são apresentados os resultados obtidos efetuando-se as regressões com os dados não transformados, sendo selecionadas as variáveis A1, A3 (densidade média dos rejeitos), A4 (fração de infiltração vertical sob a cobertura da trincheira), A6, A10, A11 e B8 (coeficiente de distribuição do Tc-99), seus respectivos quadrados, produtos cruzados e os quocientes $A10.A1^{-1}$, $A10.A6^{-1}$, $A11.A1^{-1}$ e $A11.A6^{-1}$.

Na Tabela 4.4 são apresentados os resultados obtidos efetuando-se as regressões com os valores transformados por posição, sendo selecionadas as variáveis A1, A2, A4, A6, A8, A9, A10, A11, B2 e B7, seus respectivos quadrados, produtos cruzados e os quocientes $A6.A1^{-1}$, $A8.A6^{-1}$, $A10.A1^{-1}$, $A10.A6^{-1}$, $A11.A1^{-1}$ e $A11.A6^{-1}$.

4.2. VALIDAÇÃO DAS SUPERFÍCIES RESPOSTA

A avaliação do grau de ajuste das superfícies resposta obtidas foi efetuada analisando-se as respectivas funções de distribuição empíricas e as funções de frequência de distribuição de dose, em função das distribuições obtidas processando-se o próprio código PRESTO-II.

As Figuras 4.1 e 4.2 mostram os gráficos envolvendo funções de distribuição empíricas para a dose média anual

(YA5), considerando os dados não transformados e transformados por posição, respectivamente.

As Figuras 4.3 e 4.4 mostram os gráficos envolvendo funções de distribuição empíricas para a dose máxima anual (YM5), considerando os dados não transformados e transformados por posição, respectivamente.

Em cada uma das figuras são apresentados os gráficos de duas funções; a linha sólida representa a função de distribuição empírica gerada pelos cálculos efetuados por PRESTO-II e a linha pontilhada representa as previsões da superfície resposta. Quanto mais próximas entre si, melhor é a concordância entre o resultado do modelo e as previsões da superfície resposta associada.

Do ponto de vista estritamente matemático, o conjunto dos valores de dose gerado pela superfície resposta, caracterizado por uma função de distribuição $G(x)$, e o conjunto gerado por PRESTO-II, caracterizado por $F(x)$, teriam que pertencer à mesma população se o ajuste da superfície fosse ideal. Tal hipótese poderia ser verificada aplicando-se, por exemplo, os testes estatísticos não paramétricos de Kolmogorov-Smirnov e Cramér-von Mises, desde que as funções de distribuição obtidas representem variáveis contínuas.

Os gráficos evidenciam, no entanto, que a distribuição de doses obtida não é contínua, o que torna os testes citados instrumentos estatísticos inadequados como critério de aceitação ou rejeição das superfícies construídas. De fato, tanto o teste de Kolmogorov-Smirnov como o de Cramér-von Mises, indicam um nível de significância virtualmente nulo para a hipótese de que as funções de distribuição $F(x)$ e $G(x)$.

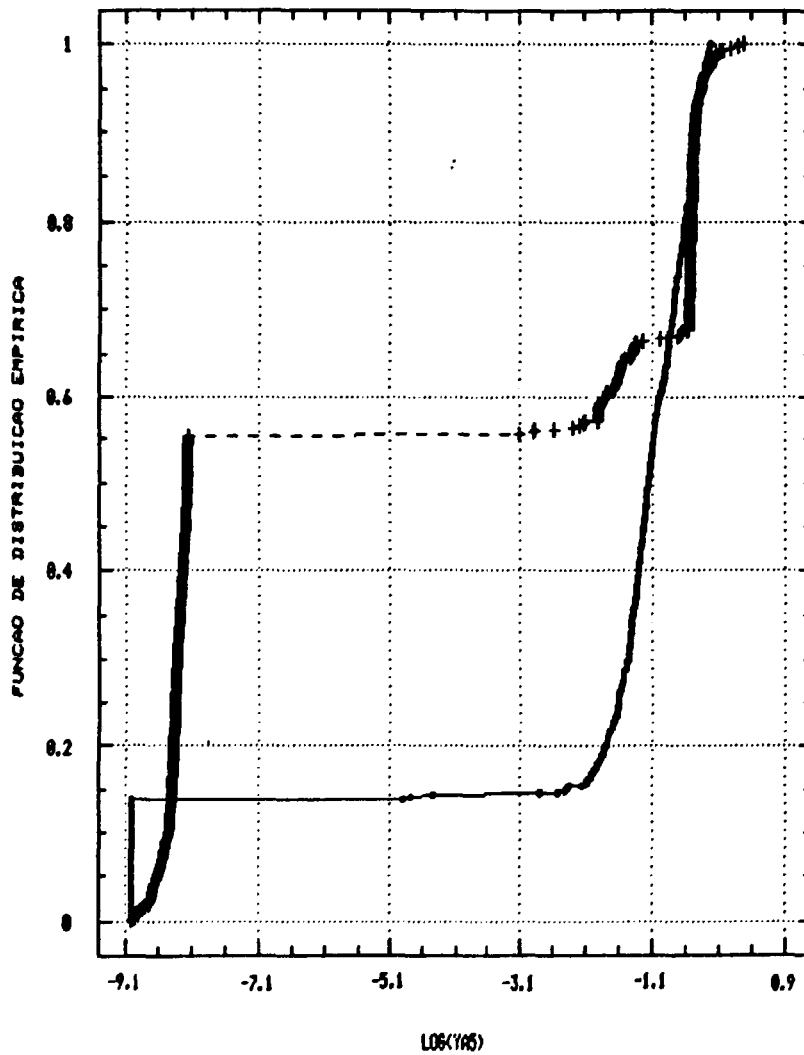


Figura 4.1. Função de distribuição empírica para a dose média anual YAS

→ cálculos de Presto-II

→ cálculos da superfície resposta ajustada sem transformação dos dados

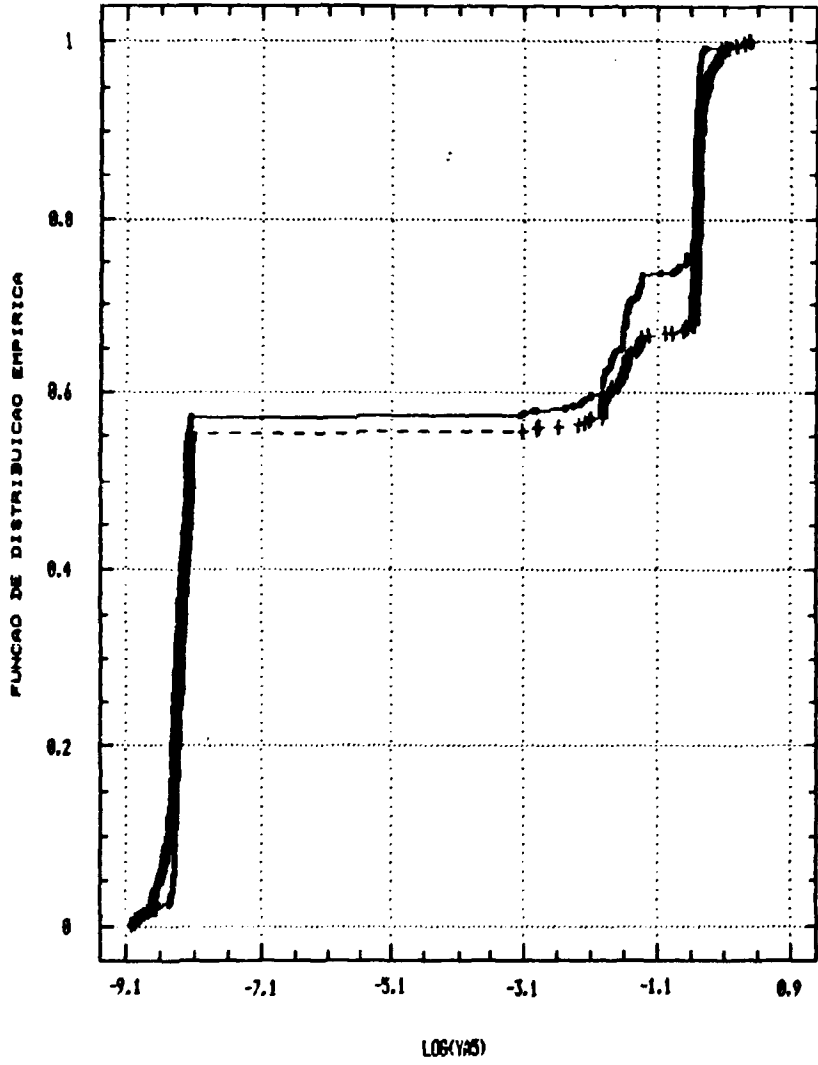


Figura 4.2. Função de distribuição empírica para a dose média anual YAS
-+ cálculos de Presto-II
-o cálculos da superfície resposta ajustada com os dados transformados por posição

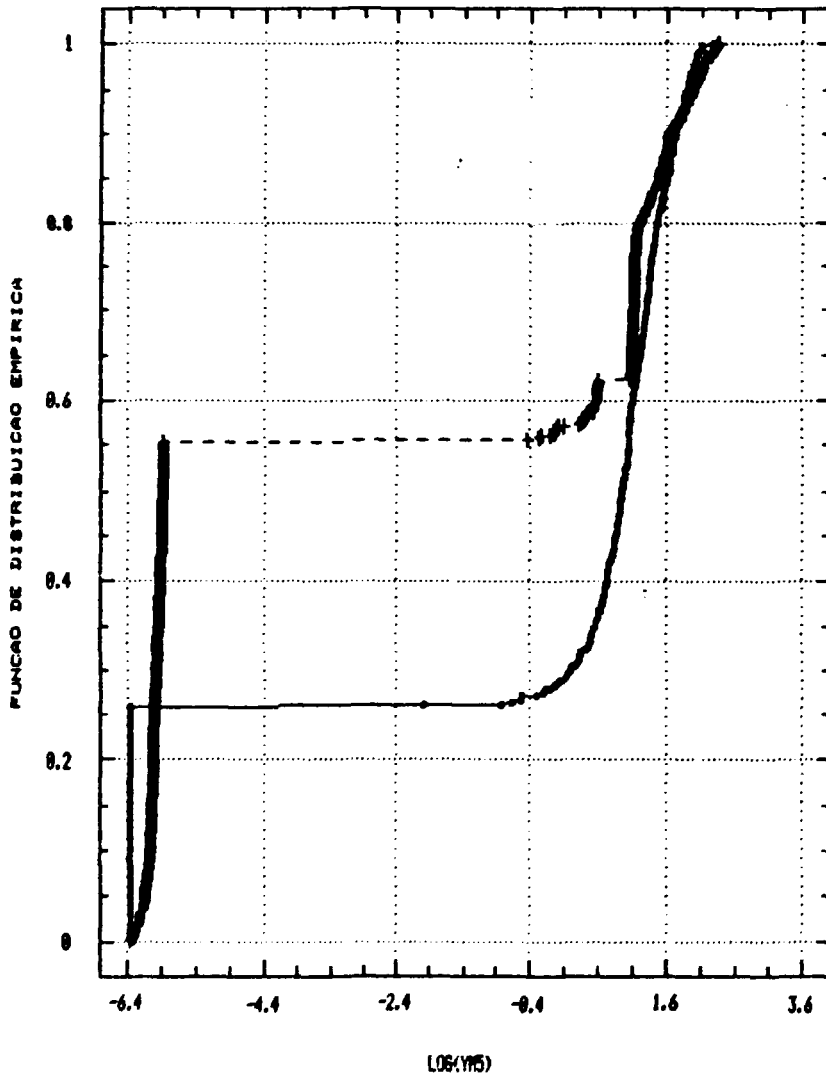


Figura 4.3. Função de distribuição empírica para a dose máxima anual YMS

- + cálculos de Presto-II
- cálculos da superfície resposta ajustada sem transformação dos dados

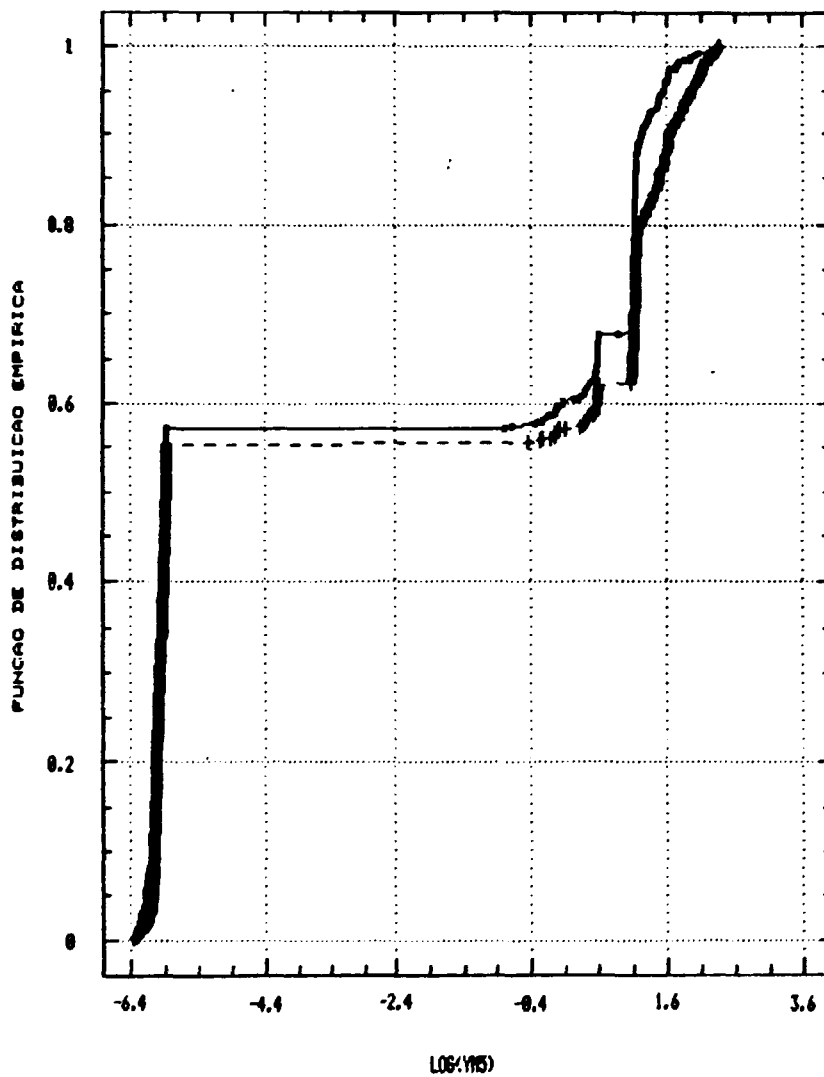


Figura 4.4. Função de distribuição empírica para a dose máxima anual YMS

- +— cálculos de Presto-II
- cálculos da superfície resposta ajustada com os dados transformados por posição

00

obtidas com dados não transformados sejam iguais, e um nível de significância da ordem de 1% considerando os dados transformados.

Testes estatísticos menos rigorosos, como os de Wilcoxon^(*), que são sensíveis essencialmente a diferenças entre médias, mas que podem não detectar diferenças de outros tipos tais como variâncias, produzem no entanto resultados satisfatórios quando se considera as superfícies ajustadas a partir dos dados transformados. Nesse caso, obtém-se um nível de significância da ordem de 99% para a hipótese $H_0: F(x)=G(x)$, tanto em função das doses médias anuais como em função das doses máximas.

As Figuras 4.5 a 4.10 mostram de uma forma comparativa mais direta, através do histograma da distribuição das doses calculadas por PRESTO-II e pelas superfícies resposta, a sensível superioridade dos ajustes obtidos com a transformação dos dados por posição e o quão satisfatoriamente podem ser utilizados para a análise de sensibilidade paramétrica.

4.3. CLASSIFICAÇÃO DAS VARIÁVEIS SEGUNDO SUA IMPORTANCIA NO MODELO

Determinou-se a influência de cada variável no modelo calculando-se os coeficientes de correlação posicional parcial (CCPP) e os coeficientes da regressão posicional padronizada (CRPP); todas as regressões efetuadas para se obter a classificação das variáveis foram portanto baseadas exclusivamente nos dados transformados por posição. É importante a utilização de dois indicadores de sensibilidade

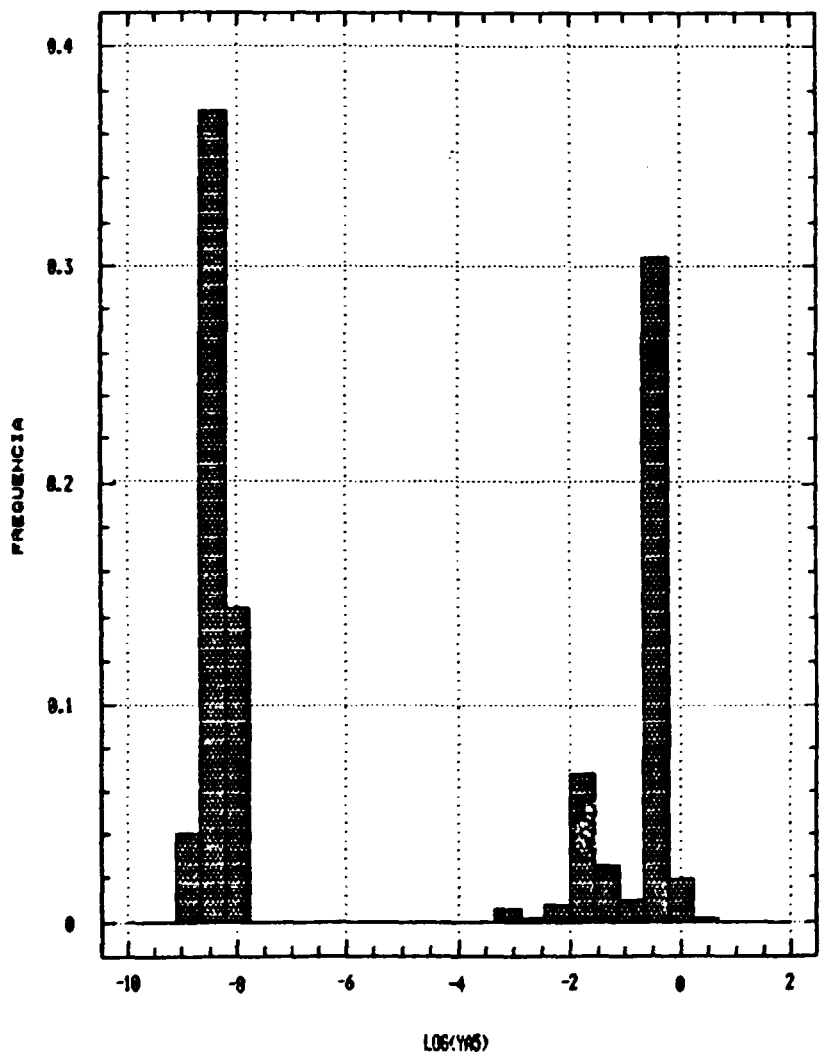


Figura 4.5. Histograma da distribuição da dose média anual (YAS), obtida através de PRESTO-II

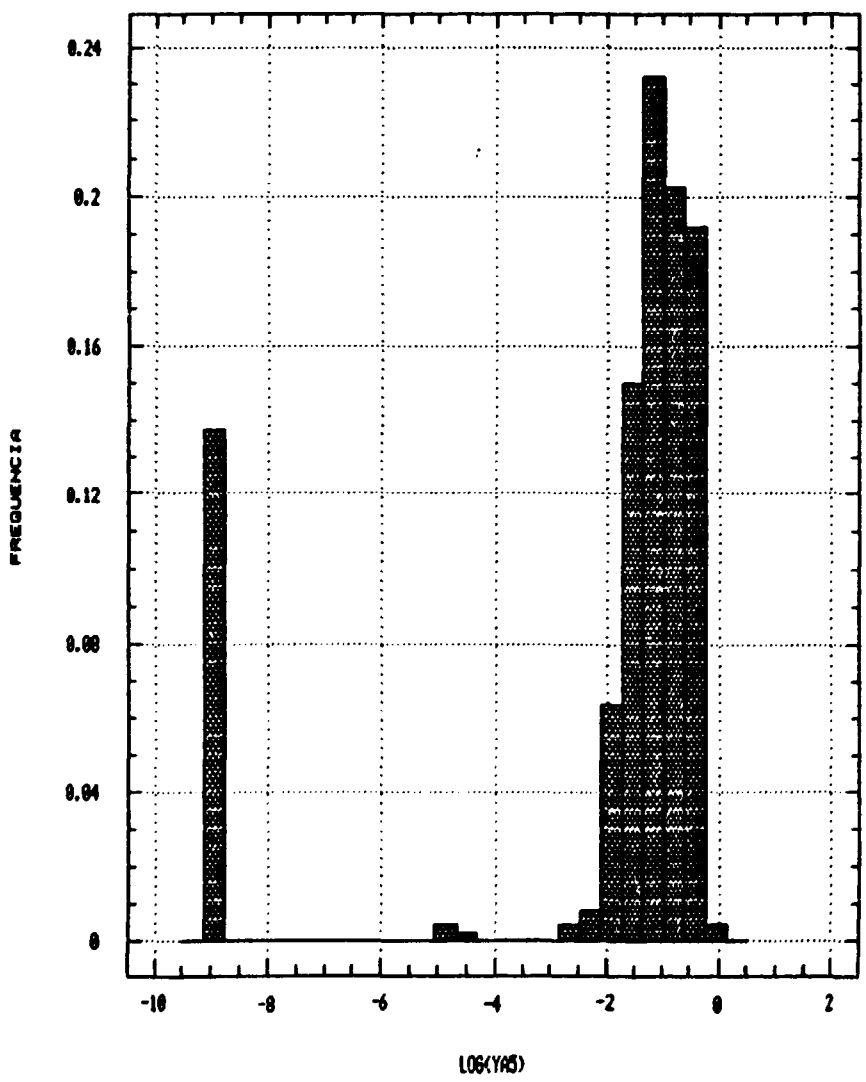


Figura 4.6. Histograma da distribuição da dose média anual (YA5), obtida através da superfície resposta ajustada sem transformação de dados

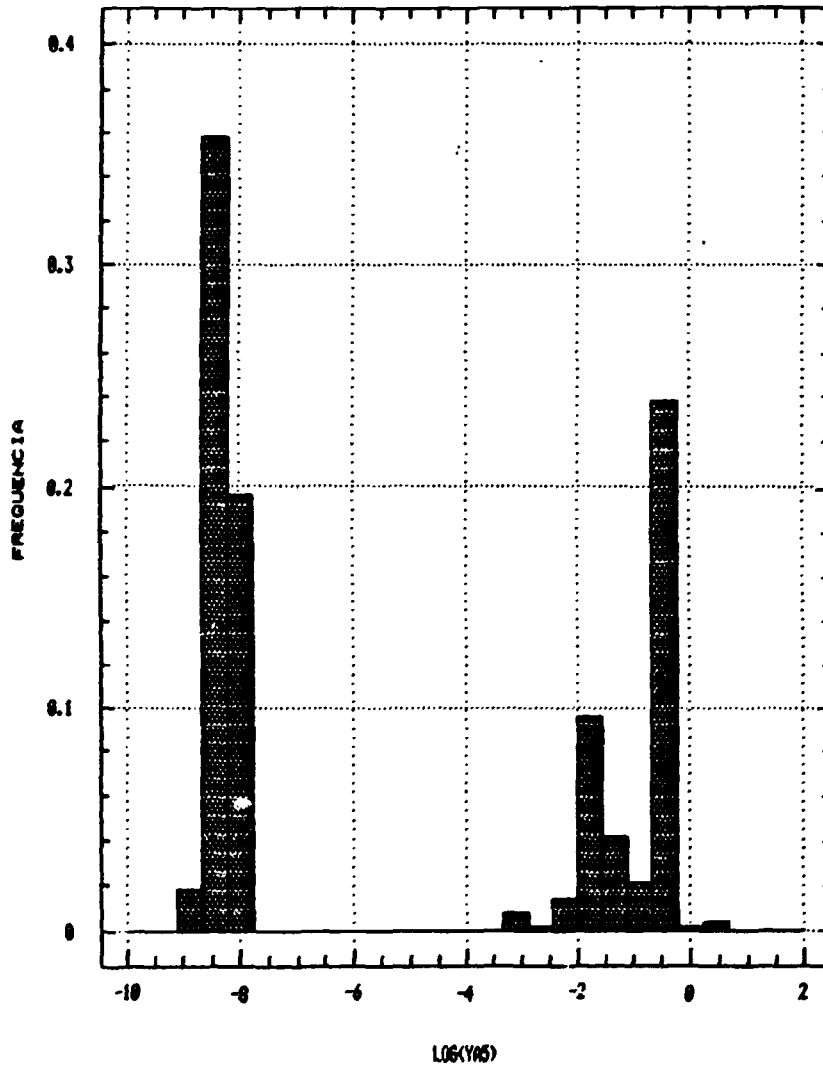


Figura 4.7. Histograma da distribuição da dose média anual (YA5), obtida através da superfície resposta ajustada com os dados transformados por posição

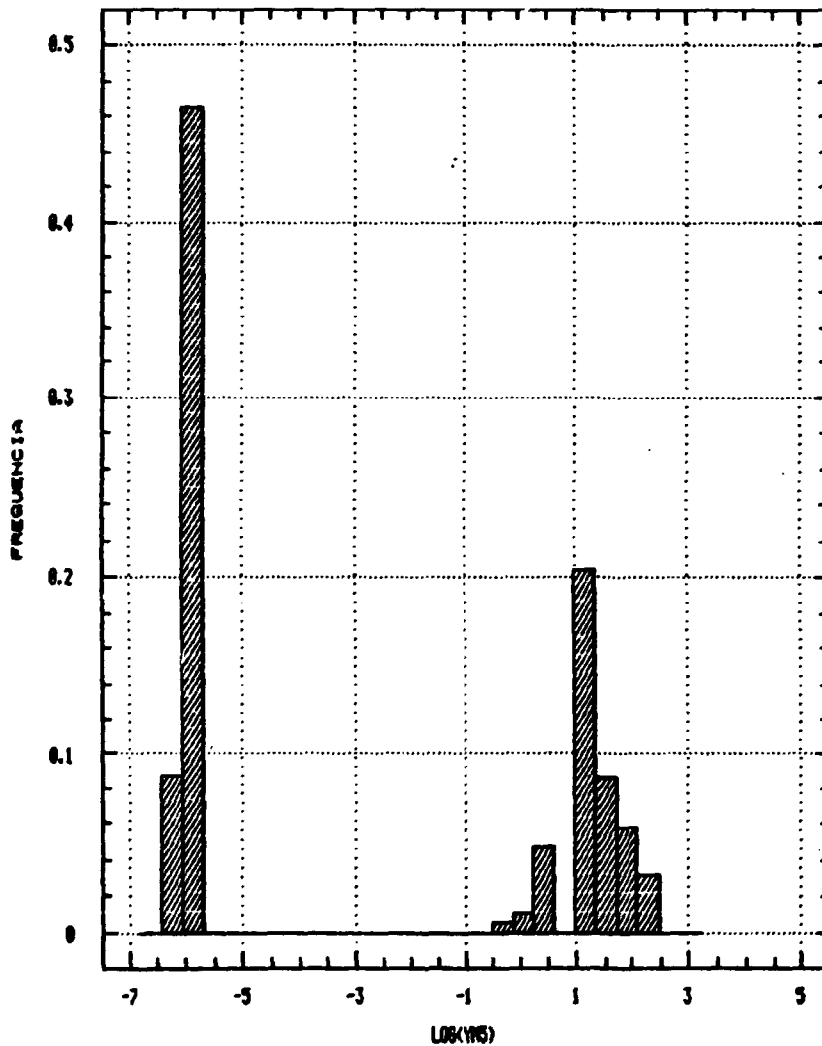


Figura 4.8. Histograma da distribuição da dose máxima anual (YMS), obtida através de PRESTO-II

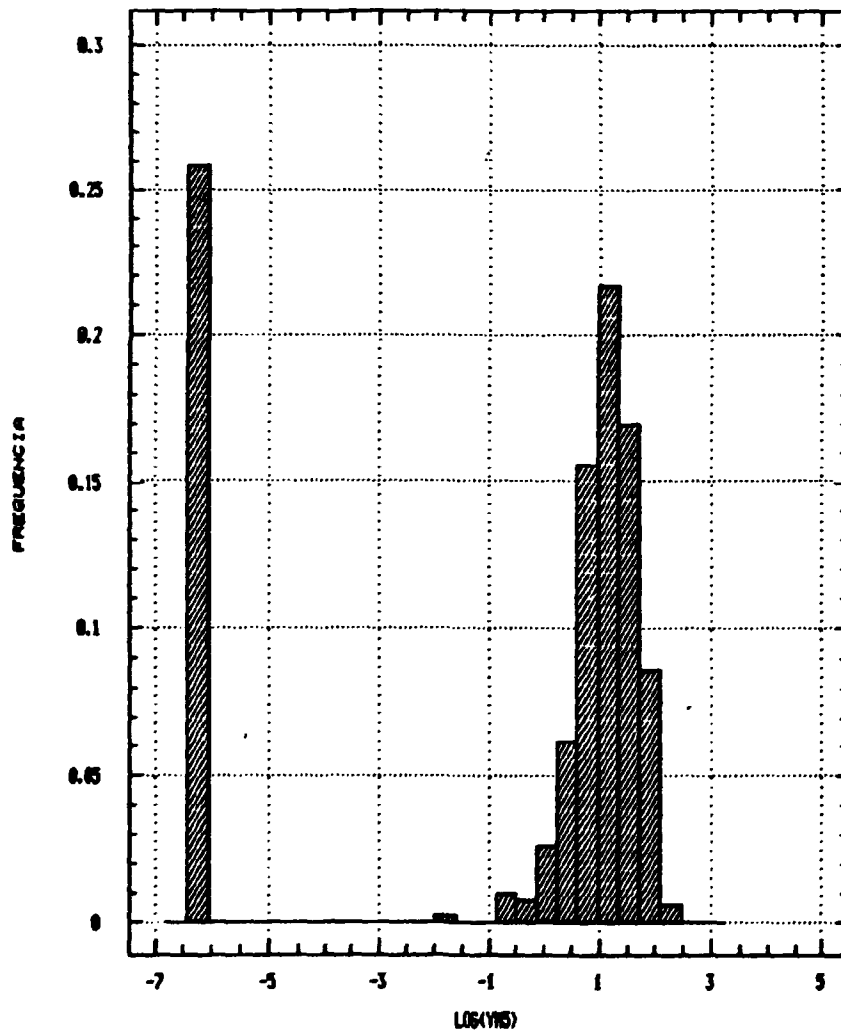


Figura 4.9. Histograma da distribuição da dose máxima anual (YMS), obtida através da superfície resposta ajustada sem transformação de dados

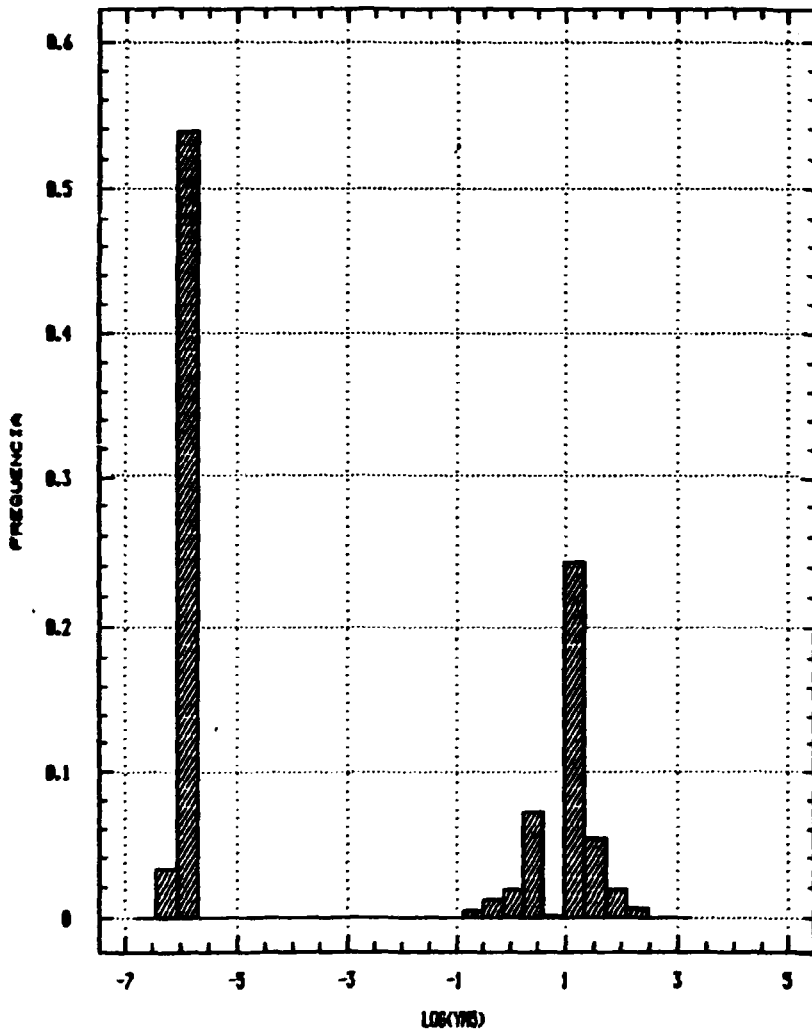


Figura 4.10. Histograma da distribuição da dose máxima anual (YMS), obtida através da superfície resposta ajustada com os dados transformados por posição

distintos, visto que ambos são parâmetros estatísticos e, como tal, podem se comportar de forma não idêntica dependendo das particularidades de cada regressão.

Analisando-se as funções de distribuição, tanto da dose média anual (Figura 4.5) como da dose máxima anual (Figura 4.8), nota-se claramente que as doses resultantes, para as condições específicas do sítio de Barnwell, podem ser agrupadas em dois conjuntos distintos de valores que, provavelmente, correspondem a diferentes vias de exposição. A fim de se obter um maior número de informações, efetuou-se as regressões separadamente para cada um desses conjuntos, cujos resultados são apresentados nas Tabelas 4.5 a 4.10.

Cada tabela contém as seguintes informações: (1) os coeficientes de correlação de Spearman (RHO) das doses parciais de ingestão (Y_1), inalação (Y_2), inersão atmosférica (Y_3) e contaminação superficial (Y_4), em relação à dose total (Y_5), e as respectivas probabilidades t ($PROB T$) para testar a hipótese $H_0: RHO=0$; (2) os coeficientes de determinação (R^2) das regressões ajustadas; (3) os coeficientes $CCPP$ e $CRPP$, considerando-se como variáveis dependentes a dose total e as doses parciais. Nas tabelas estão listadas somente as variáveis cujos coeficientes apresentaram $PROB T < 0.10$, ao se testar a hipótese $H_0: CCPP=0$ e $H_0: CRPP=0$.

Considerando-se a dose média anual como variável dependente de interesse, fica evidente, pela análise dos coeficientes de correlação de Spearman, que na região de dose: mais elevadas a via dominante de exposição é a ingestão, enquanto que doses menores estão relacionadas com a contaminação superficial; as doses decorrentes de inalação e

Tabela 4.5. Coeficientes de correlação posicional parcial (CCPP) e coeficientes da regressão posicional padronizada (CRPP) em função da dose média anual, considerando-se o conjunto total de 500 vetores.

Y5			Y1			Y2			Y3			Y4		
			RND(Y1, Y5) = 0.9817 Prob T = 0.0001			RND(Y2, Y5) = 0.1492 Prob T = 0.0008			RND(Y3, Y5) = 0.3018 Prob T = 0.0001			RND(Y4, Y5) = 0.5978 Prob T = 0.0001		
VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP
A6	0.434	1.222	A6	0.433	1.223	B11	0.906	1.676	B2	0.978	1.924	B2	0.378	1.036
B2	0.136	0.530	B7	0.137	0.458	B1	0.735	0.877	B7	0.346	0.319	B7	0.184	0.636
B7	0.090	0.424	A10	0.073	-0.373	A1	0.138	-0.211	A1	0.199	-0.144	A8	0.176	-0.616
A10	0.058	-0.328	B2	0.065	0.354	A10	0.024	-0.082	A9	0.053	0.069	A6	0.147	0.355
A8	0.025	-0.217	A9	0.014	0.157	A3	0.017	-0.070	A10	0.045	-0.062	A9	0.007	0.113
A9	0.015	0.167	A8	0.013	-0.154	A8	0.016	-0.067	A3	0.031	-0.052			
A11	0.007	-0.119	A11	0.013	-0.155	A11	0.015	0.066	A11	0.027	0.049			
			A4	0.007	0	A9	0.012	0.058	B6	0.009	-0.017			
			B3	0.006	-0.105	A7	0.011	-0.053	A8	0.005	-0.022			
			A1	0.006	0.104	A6	0.004	-0.043						
R ² = 0.8862			R ² = 0.8851			R ² = 0.9823			R ² = 0.9947			R ² = 0.8872		

Tabela 4.6. Coeficientes de correlação posicional parcial (CCPP) e coeficientes da regressão posicional padronizada (CRPP) em função da dose média anual, considerando-se o subconjunto de 277 vetores com $Y5 < 1.0E-05$ arem/ano.

Y5			Y1			Y2			Y3			Y4		
			RND(Y1,Y5) = 0.9070 Prob T = 0.0001			RND(Y2,Y5) = 0.4009 Prob T = 0.0001			RND(Y3,Y5) = 0.8235 Prob T = 0.0001			RND(Y4,Y5) = 0.9900 Prob T = 0.0001		
VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP
B2	0.787	1.282	B7	0.869	1.615	B11	0.911	1.682	B2	0.974	1.902	B2	0.848	1.429
B7	0.752	0.162	B2	0.576	0.728	B2	0.729	0.857	B7	0.510	0.319	B7	0.742	1.025
A1	0.107	-0.229	A1	0.075	-0.176	A1	0.079	-0.172	A1	0.152	-0.131	A1	0.133	-0.235
A9	0.059	0.169	A2	0.047	-0.135	A10	0.052	-0.125	A10	0.056	-0.078	A9	0.063	0.158
B11	0.012	0.073	A9	0.041	0.129	A9	0.046	0.116	A9	0.049	0.072	A7	0.611	-0.063
A3	0.011	-0.070	B4	0.025	0.101	A2	0.039	-0.102	A11	0.028	0.055			
A7	0.011	-0.068	A10	0.016	-0.081	A8	0.024	-0.082	A3	0.026	-0.051			
						A7	0.020	-0.074						
						A3	0.017	-0.069						
						A11	0.016	0.070						
						A4	0.012	-0.057						
R ² = 0.9725			R ² = 0.9758			R ² = 0.9831			R ² = 0.9940			R ² = 0.9774		

Tabela 4.7. Coeficientes de correlação posicional parcial (CCPP), e coeficientes da regressão posicional padronizada (CRPP) em função da dose média anual, considerando-se o subconjunto de 223 vetores com $Y5 > 1.0E-05$ arez/ano.

Y5			Y1			Y2			Y3			Y4		
			RND(Y1,Y5) = 0.9719 Prob T = 0.0001			RND(Y2,Y5) = 0.0346 Prob T = 0.6070			RND(Y3,Y5) = -0.0465 Prob T = 0.4895			RND(Y4,Y5) = -0.2242 Prob T = 0.0007		
VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP
A6	0.347	1.043	A6	0.318	0.946	B11	0.907	1.659	B2	0.975	1.945	A8	0.397	-1.263
A10	0.147	0.578	A8	0.217	0.736	B2	0.745	0.877	B7	0.521	0.330	B2	0.295	0.732
A8	0.104	0.491	A10	0.124	0.508	A1	0.200	-0.261	A1	0.247	-0.178	A6	0.168	0.695
B7	0.035	0.263	B3	0.031	-0.234	B1	0.032	-0.095	A11	0.047	0.069	B7	0.049	0.336
A1	0.033	-0.250	A1	0.026	-0.216	A11	0.028	0.089	A3	0.030	-0.054	A11	0.041	0.306
B6	0.032	-0.244	B7	0.024	0.210	B6	0.021	-0.076	B12	0.030	-0.054	B9	0.025	0.235
B3	0.027	-0.222	B6	0.019	-0.164	A3	0.019	-0.071	A9	0.027	0.051			
A11	0.023	0.208	B2	0.016	-0.154				B6	0.021	-0.046			
									B1	0.018	-0.042			
R ² = 0.8909			R ² = 0.8972			R ² = 0.9838			R ² = 0.9942			R ² = 0.8723		

Tabela 4.8. Coeficientes de correlação posicional parcial (CCPP) e coeficientes da regressão posicional padronizada (CRPP) em função da dose máxima anual, considerando-se o conjunto total de 500 vetores.

Y5			Y1			Y2			Y3			Y4		
			RND(Y1,Y5) = 0.9895 Prob T = 0.0001			RND(Y2,Y5) = -0.5997 Prob T = 0.0001			RND(Y3,Y5) = -0.5348 Prob T = 0.0001			RND(Y4,Y5) = -0.1490 Prob T = 0.0008		
VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP
A6	0.468	1.217	A6	0.466	1.222	A6	0.348	-1.022	A6	0.335	-1.015	B2	0.133	0.696
B2	0.172	0.589	A10	0.133	-0.504	B11	0.234	0.788	B2	0.239	0.798	A8	0.039	-0.359
A10	0.136	-0.507	B7	0.119	0.483	A10	0.132	0.539	A10	0.137	0.562	A10	0.038	0.350
B7	0.076	0.375	B2	0.119	0.480	B2	0.098	0.460	B7	0.058	0.356	A11	0.037	0.352
A8	0.019	-0.178	A1	0.018	0.178	A11	0.050	0.324	A11	0.038	0.286	A6	0.023	-0.277
A1	0.016	0.165	A11	0.016	-0.171	A1	0.017	-0.185	B4	0.011	0.151	B9	0.028	0.250
A9	0.016	0.165	A8	0.016	-0.167	B9	0.013	0.162	B9	0.009	0.138	B7	0.013	0.205
A11	0.012	-0.147	A9	0.015	0.164	B4	0.010	0.139	A1	0.009	-0.135	A3	0.008	0.161
A4	0.011	0.139	A4	0.013	0.147	B3	0.009	0.131	B3	0.008	0.134	A2	0.007	0.147
B6	0.010	-0.129	B6	0.008	-0.116	A9	0.006	0.108	B11	0.006	-0.117			
R ² = 0.8932			R ² = 0.8915			R ² = 0.8759			R ² = 0.8707			R ² = 0.7979		

Tabela 4.9. Coeficientes de correlação posicional parcial (CCPP) e coeficientes da regressão posicional padronizada (CRPP) em função da dose máxima anual, considerando-se o subconjunto de 277 vetores com $Y5 < 1.0E-04$ area/ano.

Y5			Y1			Y2			Y3			Y4		
			RND(Y1,Y5) = 0.71 Prob T = 0.0001			RND(Y2,Y5) = 0.5495 Prob T = 0.0001			RND(Y3,Y5) = 0.7994 Prob T = 0.0001			RND(Y4,Y5) = 0.8176 Prob T = 0.0001		
VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP
B2	0.762	1.282	B7	0.825	1.483	B11	0.859	1.478	B2	0.984	1.938	B2	0.978	1.916
B7	0.707	1.114	B2	0.643	0.921	B2	0.776	1.107	B7	0.458	0.226	B7	0.494	0.285
B11	0.088	0.224	A1	0.067	-0.182	A1	0.079	-0.172	A1	0.159	-0.106	A1	0.181	-0.134
A1	0.086	-0.218	A9	0.060	0.174	A10	0.058	-0.151	A9	0.088	0.077	A9	0.064	0.076
A9	0.053	0.170	A2	0.027	-0.111	A2	0.047	-0.129	A10	0.078	-0.073	A10	0.028	-0.050
A10	0.026	-0.119	A10	0.023	-0.102	A8	0.033	-0.108	B6	0.017	-0.033	A3	0.022	-0.043
A3	0.018	-0.098	A11	0.015	-0.086	A9	0.030	0.106	A3	0.014	-0.029	A11	0.017	0.040
A7	0.015	-0.086	B4	0.012	0.078	A7	0.025	-0.093	A11	0.012	0.028			
						A11	0.017	0.081						
						A4	0.016	-0.076						
						A3	0.015	-0.073						
$R^2 = 0.9683$			$R^2 = 0.9709$			$R^2 = 0.9781$			$R^2 = 0.9963$			$R^2 = 0.9949$		

Tabela 4.10. Coeficientes de correlação posicional parcial (CCPP) e coeficientes da regressão posicional padronizada (CRPP) em função da dose máxima anual, considerando-se o subconjunto de 223 vetores com $Y5 > 1.0E-04$ area/ano.

Y5			Y1			Y2			Y3			Y4		
			RND(Y1,Y5)= 0.9979 Prob T = 0.0001			RND(Y2,Y5)=-0.3111 Prob T = 0.0001			RND(Y3,Y5)=-0.2814 Prob T = 0.0001			RND(Y4,Y5)=-0.3070 Prob T = 0.0001		
VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP
B6	0.379	-0.966	B6	0.370	-0.968	A8	0.168	-0.773	A8	0.173	-0.809	A8	0.298	-1.107
A6	0.309	0.875	A6	0.306	0.873	B11	0.146	0.681	B7	0.148	0.701	A6	0.228	0.918
A8	0.159	0.574	A8	0.160	0.577	A6	0.069	0.466	A6	0.077	0.505	B9	0.037	0.398
A10	0.104	-0.434	A10	0.102	-0.432	A11	0.043	0.347	B9	0.044	0.360	A11	0.048	0.362
A1	0.084	0.375	A1	0.077	0.358	A9	0.036	0.309	A11	0.027	0.280	B2	0.033	0.291
A4	0.058	0.301	A4	0.057	0.301	B12	0.034	0.297	B2	0.025	0.264	A3	0.022	0.232
B2	0.042	0.255	A2	0.040	0.247	B9	0.025	0.263	A10	0.021	0.248	A10	0.021	0.240
A2	0.040	0.247	B2	0.031	0.219	A3	0.024	0.246				A4	0.018	0.211
A7	0.029	0.210	A7	0.025	0.196	A10	0.014	0.196						
A5	0.015	0.151	A5	0.016	0.158									
			B4	0.014	0.145									
R ² = 0.9085			R ² = 0.9077			R ² = 0.8437			R ² = 0.8358			R ² = 0.8478		

de imersão atmosférica não contribuem de forma significativa à dose total.

No processo de ingestão, a variação de dose pode ser explicada quase que exclusivamente pelas variáveis A6 (velocidade linear da água no lençol freático), A8 (distância ao grupo crítico) e A10 (escoamento superficial). O domínio marcante da variável A6 demonstra a importância do fenômeno de transporte dos radionuclídeos através do lençol freático e explica a presença de dois grupos distintos de dose, pois a contaminação superficial passa a ser o processo principal de exposição somente quando os contaminantes presentes nas águas subterrâneas não conseguem atingir a biosfera.

No processo de contaminação superficial, B2 (coeficiente de distribuição do Co-60) e B7 (coeficiente de distribuição do Cs-137) são as variáveis dominantes. Isso explica a presença de ambas posicionadas como segunda e terceira, respectivamente, na classificação geral de importância mostrada na Tabela 4.5; os valores positivos de CRPP confirmam que a influência desses elementos na distribuição de doses está associada à contaminação superficial, ou seja, valores elevados de K_d dificultam a lixiviação dos radionuclídeos, aumentando conseqüentemente suas concentrações no solo.

Os resultados obtidos considerando-se a dose máxima anual mostram essencialmente as mesmas conclusões quanto à ordenação da importância de cada variável, apenas com a inclusão de B6 (coeficiente de distribuição do Te-99) como variável dominante no grupo de doses elevadas. Ao contrário de B2 e B7, B6 aparece com o CRPP negativo, evidenciando sua associação com o tempo de trânsito através do aquífero e não

com a retenção do tecnécio em solos superficiais. Em relação às vias de exposição, a ingestão é sempre o processo dominante no cômputo da dose máxima anual.

CAPITULO 5

ANALISE DE SENSIBILIDADE 2: RESULTADOS E DISCUSSOES

Este capítulo apresenta as superfícies resposta obtidas, a classificação das variáveis mais importantes do modelo e os testes de validação das equações ajustadas, considerando-se o cenário da análise de sensibilidade 2. Os resultados são mostrados nas Tabelas 5.1 a 5.10 e Figuras 5.1 a 5.10, obedecendo-se à mesma sequência e critérios adotados na análise de sensibilidade 1.

O cenário difere apenas no que se refere à forma pela qual o processo de lixiviação dos radionuclídeos depositados na trincheira foi equacionado. A introdução da variável A12 (fração de liberação anual) basicamente não altera as conclusões extraídas da análise anterior, pois as regressões mostram praticamente a mesma ordenação da influência das vias de exposição e da importância de cada variável no modelo, apenas acrescidas de A12.

O interesse maior em apresentar os resultados completos da análise, embora similares aos mostrados no capítulo anterior, é no sentido de demonstrar o comportamento estável das metodologias adotadas neste trabalho.

Tabela 5.1. Resultados da regressão linear para a dose média anual (YA5), com os valores não transformados.

No. de variáveis	variáveis selecionadas	coeficientes da regressão	R²	C_p
Regressão preliminar				
3	A6	0.2889	0.4433	1.3753
	A12	91.4897		
	B6	-5.3823		
Regressão final				
7	A6	0.4057	0.7509	6.8338
	A12	58.7223		
	B6	-1.0438		
	A6.A6	-0.0402		
	A6.A12	25.7172		
	A12.A12	-292.8236		
	A12.B6	-197.2945		

Tabela 5.2. Resultados da regressão linear para a dose média anual (YA5), com os valores transformados por posição.

No. de variáveis	variáveis selecionadas	coeficientes da regressão	R ²	C _p
Regressão preliminar				
9	A1	0.0784	0.8700	7.3945
	A6	0.5668		
	A8	-0.1834		
	A9	0.0772		
	A10	-0.1415		
	A12	0.1330		
	B2	0.2717		
	B7	0.1308		
	B10	0.0657		
Regressão final				
18	A6	1.2799	0.8132	11.7588
	A9	0.3783		
	A10	0.9740		
	A12	1.1088		
	A1.A9	-0.3440		
	A8.A8	0.1487		
	A8.A9	-3.0492		
	A8.A10	1.2046		
	A8.A9	0.6838		
	A8.A10	-0.3337		
	A8.B10	-0.3483		
	A9.A10	0.5577		
	A12.B2	0.3478		
	B7.B10	0.1587		
	B10.B10	0.2810		
	A8/A8	-1.1791		
	A10/A1	-2.0872		
	A10/A12	1.2218		

Tabela 5.3. Resultados da regressão linear para a dose máxima anual (YN5), com os valores não transformados.

No. de variáveis	variáveis selecionadas	coeficientes da regressão	R²	C_p
Regressão preliminar				
4	A3	0.00759	0.4452	1.9072
	A5	-0.0050		
	A6	0.0179		
	A12	1.6993		
Regressão final				
8	A6	0.0367	0.5889	7.2173
	A12	3.1718		
	A3.A6	0.0015		
	A5.A6	-0.0016		
	A6.A6	-0.0020		
	A6.A12	0.4650		
	A12.A12	-42.9045		
	A5/A12	-0.0001		

Tabela 5.4. Resultados da regressão linear para a dose máxima anual (YM5), com os valores transformados por posição.

No. de variáveis	variáveis selecionadas	coeficientes da regressão	R ²	C _p
Regressão preliminar				
9	A1	0.0827	0.8860	9.2760
	A5	-0.0538		
	A6	0.6174		
	A8	-0.1189		
	A9	0.0768		
	A10	-0.1440		
	A12	0.1192		
	B2	0.2632		
	B7	0.1575		
Regressão final				
11	A5	-0.3437	0.9158	10.1481
	A6	-1.0243		
	A12	0.1384		
	A6.A10	2.0037		
	A6.A9	0.4813		
	A6.A10	-0.2135		
	A6.B2	0.2854		
	A10.B7	0.1580		
	A5/A6	1.3720		
	A6/A6	-1.1472		
	A10/A1	-0.8885		

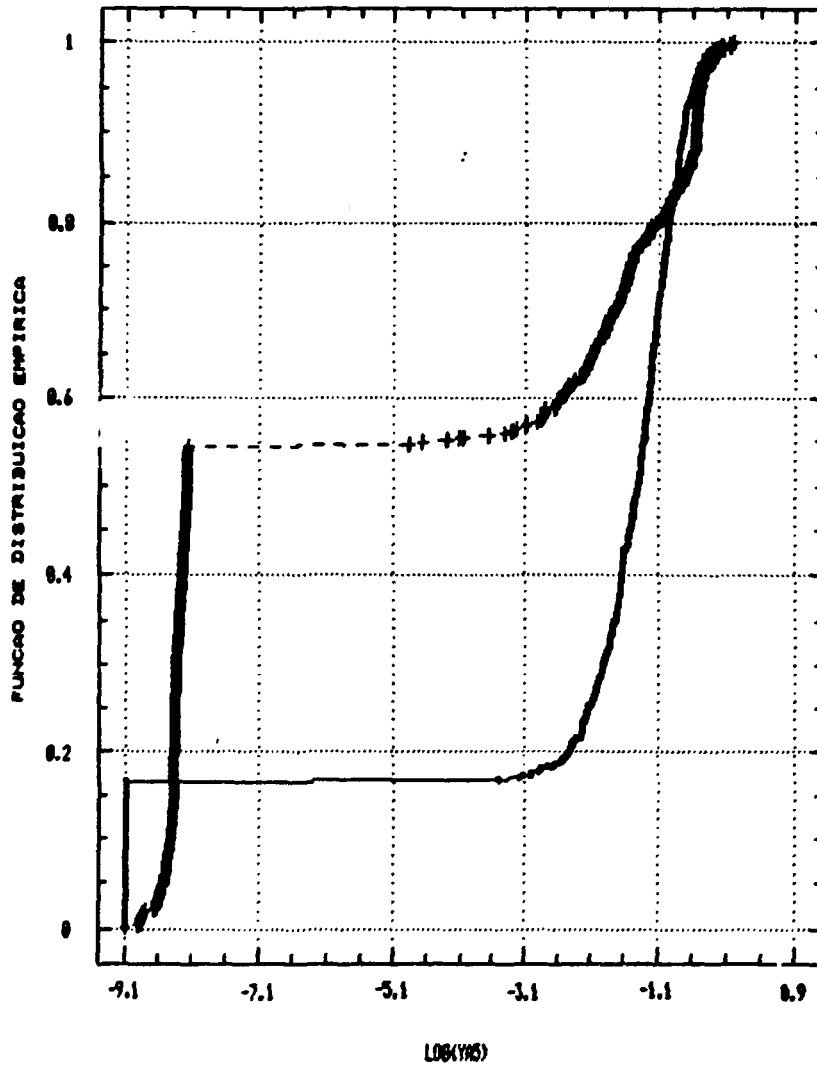


Figura 5.1. Função de distribuição empírica para a dose média anual YAS

- + cálculos de Presto-II
- cálculos da superfície resposta ajustada sem transformação dos dados

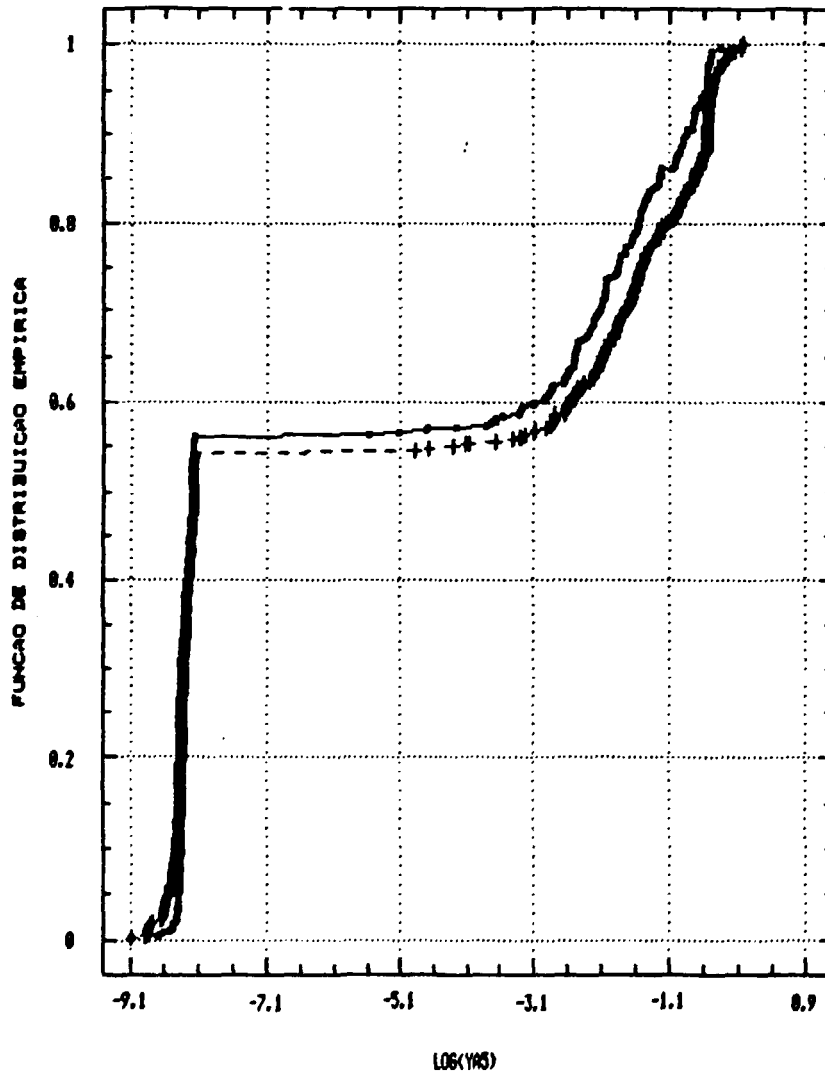


Figura 5.2. Função de distribuição empírica para a dose média anual YA5

- + cálculos de Presto-II
- cálculos da superfície resposta ajustada com os dados transformados por posição

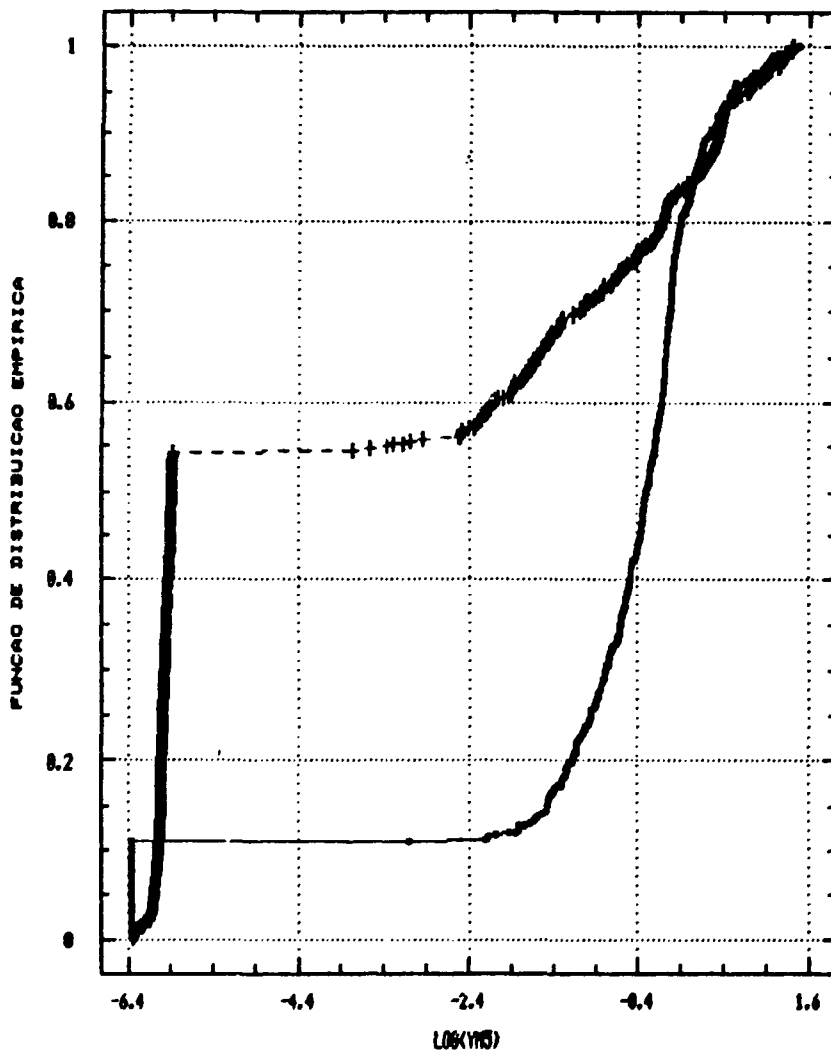


Figura 5.3. Função de distribuição empírica para a dose máxima anual YMS

- + cálculos de Presto-II
- cálculos da superfície resposta ajustada sem transformação dos dados

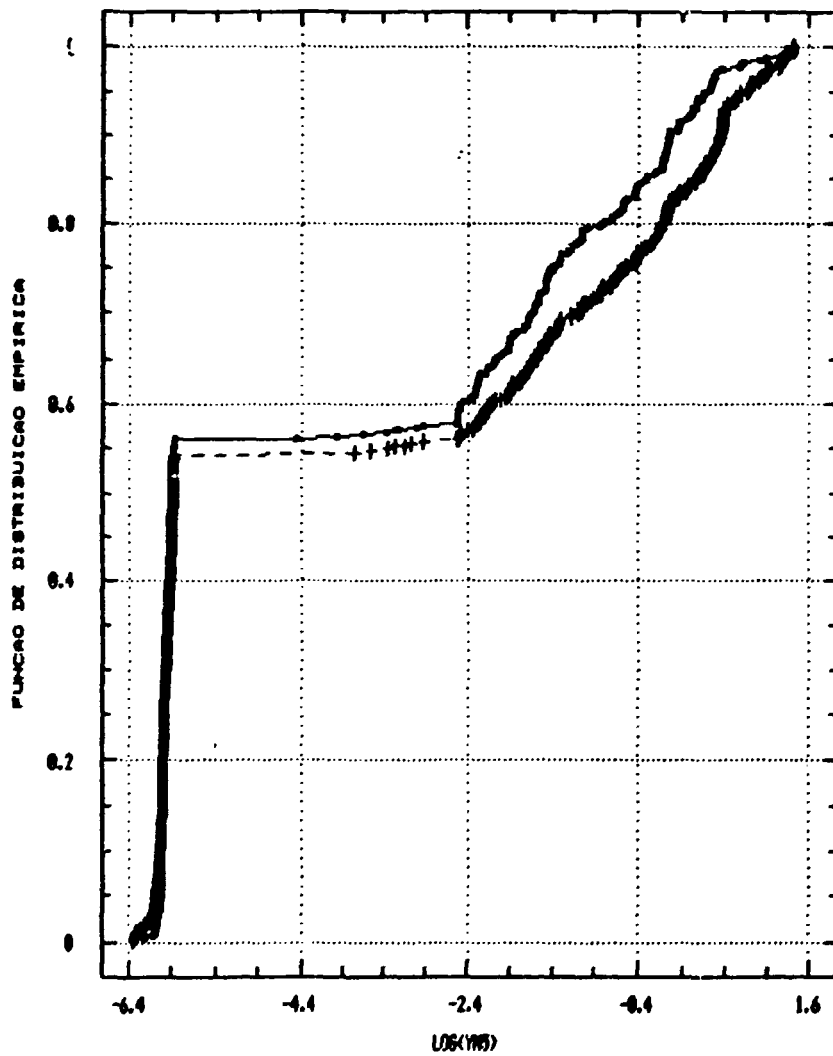


Figura 5.4. Função de distribuição empírica para a dose máxima anual Y_{15}

- +— cálculos de Presto-II
- o— cálculos da superfície resposta ajustada com os dados transformados por posição

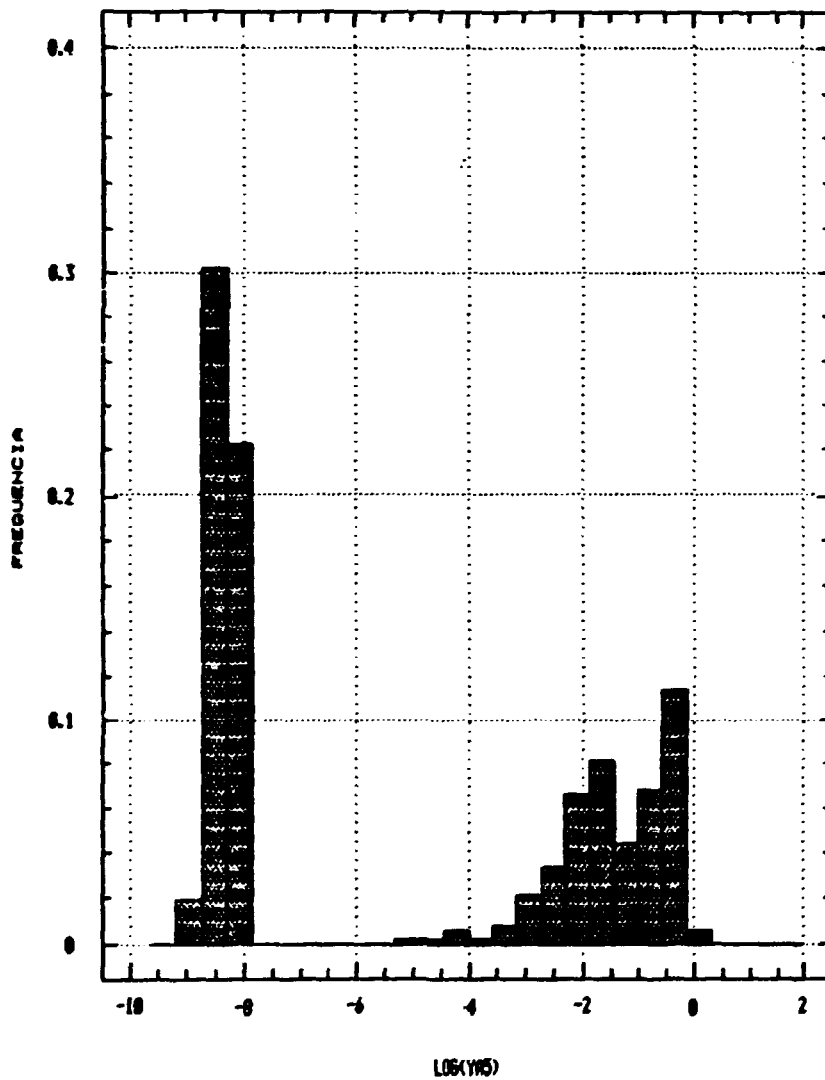


Figura 5.5. Histograma da distribuição da dose média anual (YAS), obtida através de PRESTO-II

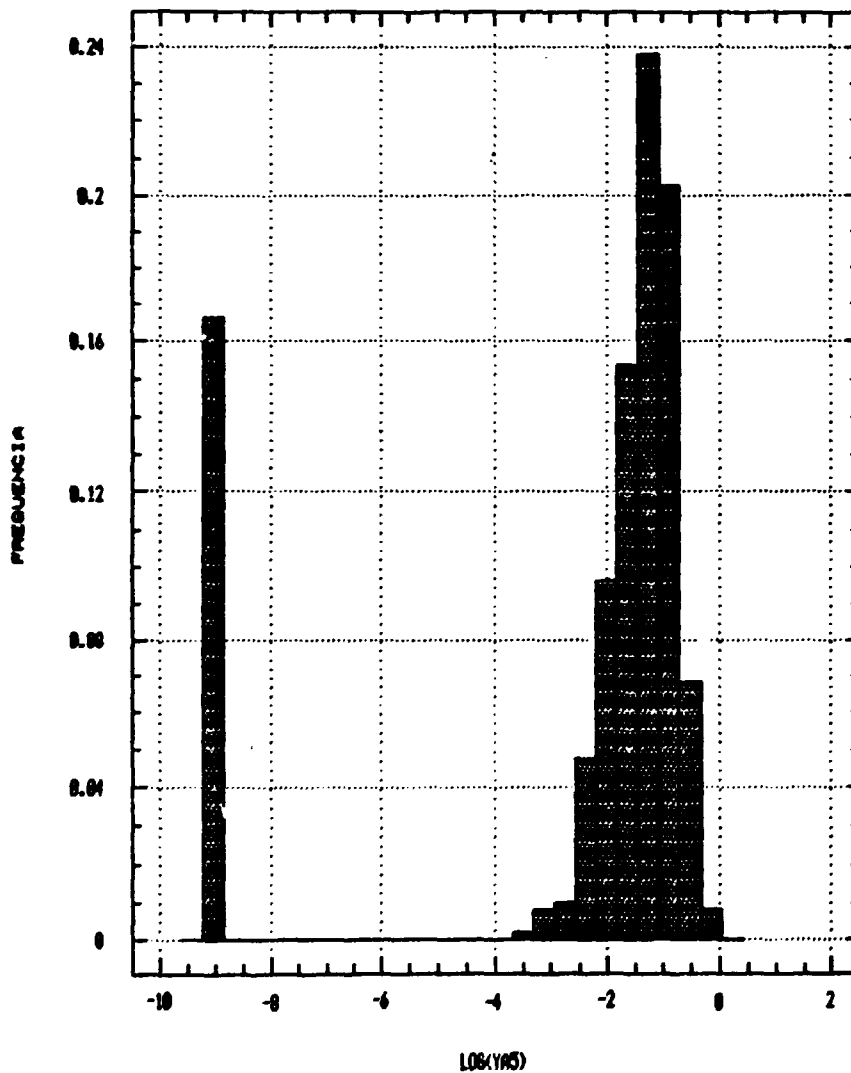


Figura 5.6. Histograma da distribuição da dose média anual (YA5), obtida através da superfície resposta ajustada sem transformação de dados

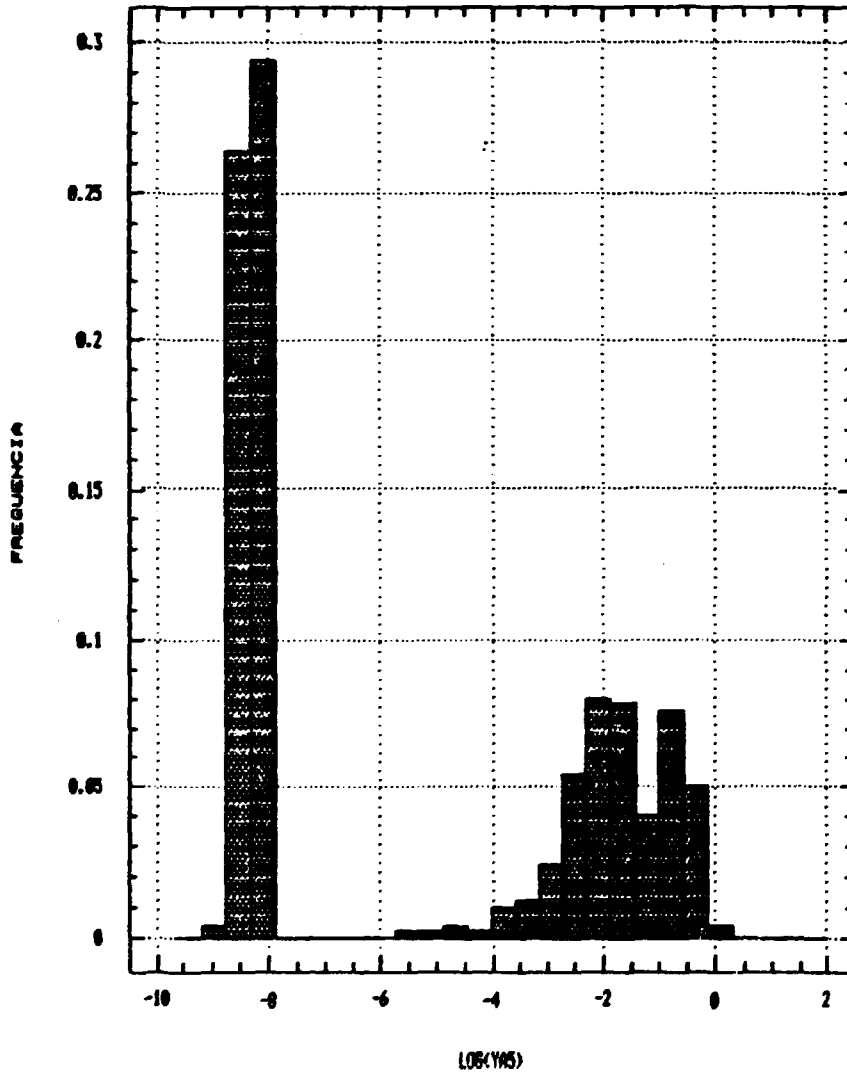


Figura 5.7. Histograma de distribuição da dose média anual (YA5), obtida através da superfície resposta ajustada com os dados transformados por posição

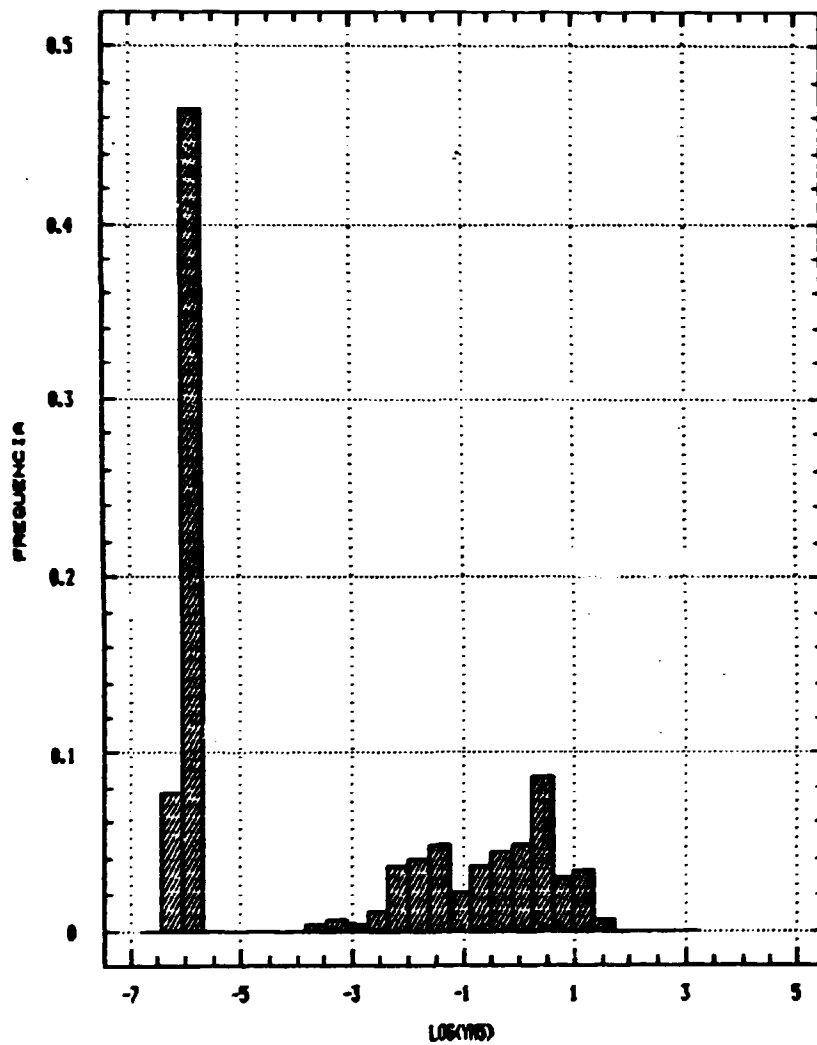


Figura 5.8. Histograma da distribuição da dose máxima anual (YMS), obtida através de FRESTO-II

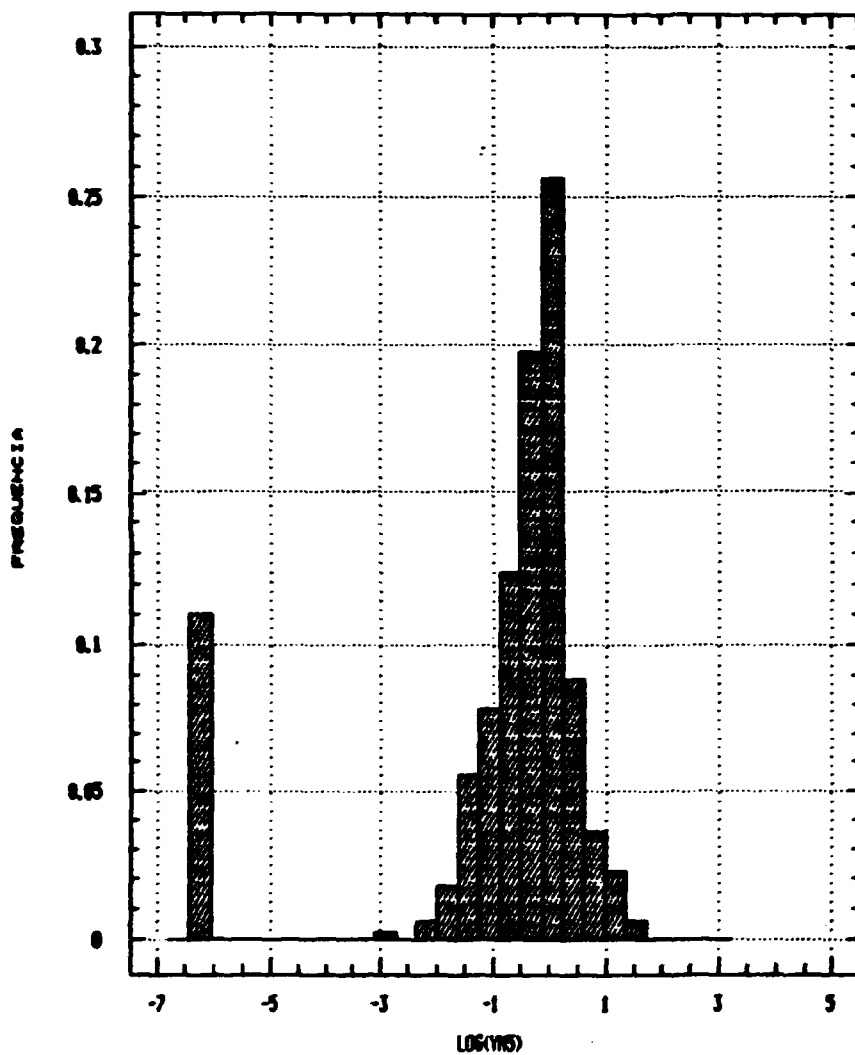


Figura 5.9. Histograma da distribuição da dose máxima anual (YMS), obtida através da superfície resposta ajustada sem transformação de dados

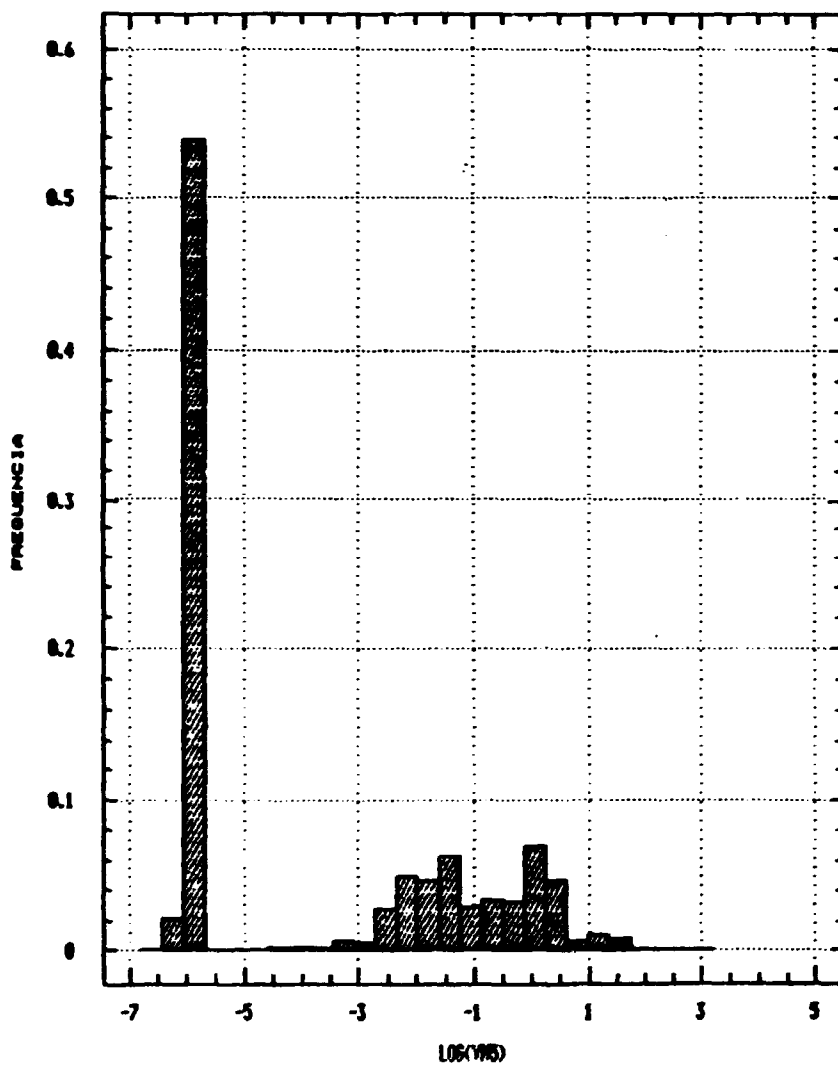


Figura 5.10. Histograma da distribuição da dose máxima anual (Y15), obtida através da superfície resposta ajustada com os dados transformados por posição

Tabela 5.5. Coeficientes de correlação posicional parcial (CCPP) e coeficientes de regressão posicional padronizada (CIPP) em função da dose aditiva anual, considerando-se o conjunto total de 300 vetores.

Y5			Y1			Y2			Y3			Y4		
			RND(Y1,Y5)= 0.9640 Prob T = 0.0001			RND(Y2,Y5)= 0.1070 Prob T = 0.0148			RND(Y3,Y5)= 0.2783 Prob T = 0.0001			RND(Y4,Y5)= 0.5498 Prob T = 0.0001		
VAR	CCPP	CIPP	VAR	CCPP	CIPP	VAR	CCPP	CIPP	VAR	CCPP	CIPP	VAR	CCPP	CIPP
A6	0.461	1.223	A6	0.383	1.277	B11	0.906	1.672	B2	0.978	1.933	B2	0.335	1.007
B2	0.133	0.321	B7	0.109	0.444	B2	0.726	0.886	B7	0.520	0.308	B7	0.234	0.809
B7	0.032	0.317	A10	0.068	-0.335	A1	0.114	-0.191	A1	0.179	-0.133	B8	0.129	-0.322
A10	0.007	-0.298	B2	0.030	0.277	A10	0.026	-0.007	A9	0.081	0.086	A6	0.085	0.412
B8	0.033	-0.231	A12	0.022	0.177	B1	0.026	-0.005	A11	0.032	0.032	A11	0.014	0.163
A12	0.031	0.239	A1	0.020	0.183	B12	0.023	-0.003	A2	0.028	-0.049	A12	0.010	0.136
A1	0.012	-0.148	B8	0.014	-0.157	A9	0.016	0.049	A10	0.019	-0.041			
A9	0.010	0.137	A9	0.014	0.136	A11	0.013	0.040	A6	0.012	-0.032			
B6	0.006	-0.104	A5	0.007	-0.110	A7	0.008	-0.051	B8	0.009	-0.027			
			A2	0.006	0.078	A6	0.006	-0.043						
R ² = 0.0000			R ² = 0.0945			R ² = 0.9815			R ² = 0.9947			R ² = 0.0045		

Tabola 3.4. Coeficientes de correção posicional (COP) e coeficientes de regressão posicional padronizada (COP) em função do tipo de solo anual, considerando-se o subconjunto de 272 vetores com $V3 < 1,0E-06$ g/m³/ano.

V3	V1	V2	V3	V4
$RMQ(V1,V3) = 0,45271$ $PMQ\ T = 0,0004$	$RMQ(V2,V3) = 0,33332$ $PMQ\ T = 0,0004$	$RMQ(V3,V3) = 0,0000$ $PMQ\ T = 0,0004$	$RMQ(V4,V3) = 0,9633$ $PMQ\ T = 0,0004$	
V31 0,1401 V32 0,8336 V33 1,7177 V34 0,8790 V35 1,6703	V11 0,1401 V12 0,5082 V13 0,7497 V14 0,7150 V15 0,7981	V21 0,1401 V22 0,1300 V23 -0,2222 V24 0,1877 V25 0,1077	V31 0,0111 V32 0,0111 V33 -0,0111 V34 0,0111 V35 0,0111	V41 0,0111 V42 0,0111 V43 -0,0111 V44 0,0111 V45 -0,0111
V6 0,014 V7 0,014 V8 0,014 V9 0,014 V10 0,014	V11 0,014 V12 0,014 V13 -0,014 V14 0,014 V15 -0,014	V16 0,014 V17 0,014 V18 -0,014 V19 0,014 V20 -0,014	V21 0,014 V22 0,014 V23 -0,014 V24 0,014 V25 -0,014	V26 0,014 V27 0,014 V28 -0,014 V29 0,014 V30 -0,014
V31 0,0111 V32 0,0111 V33 -0,0111 V34 0,0111 V35 -0,0111	V36 0,0111 V37 0,0111 V38 -0,0111 V39 0,0111 V40 -0,0111	V41 0,0111 V42 0,0111 V43 -0,0111 V44 0,0111 V45 -0,0111	V46 0,0111 V47 0,0111 V48 -0,0111 V49 0,0111 V50 -0,0111	V51 0,0111 V52 0,0111 V53 -0,0111 V54 0,0111 V55 -0,0111
$R^2 = 0,9626$	$R^2 = 0,9662$	$R^2 = 0,9797$	$R^2 = 0,9762$	$R^2 = 0,9782$

Tabela 3.7. Coeficientes de correlação posicional parcial (CCPP) e coeficientes da regressão posicional padronizada (CRPP) em função da dose média anual, considerando-se o subconjunto de 228 valores com $Y5 > 1.0E-06$ area/ano.

Y5			Y1			Y2			Y3			Y4		
			RND(Y1,Y5)= 0.9180 Prob T = 0.0001			RND(Y2,Y5)=-0.0398 Prob T = 0.3502			RND(Y3,Y5)= 0.0330 Prob T = 0.6205			RND(Y4,Y5)= 0.1715 Prob T = 0.0095		
VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP
A12	0.650	1.468	A12	0.557	1.245	B11	0.918	1.702	B2	0.981	1.940	A8	0.310	-0.999
A6	0.280	0.659	A6	0.389	0.869	B2	0.742	0.851	B7	0.564	0.312	B7	0.201	0.722
B6	0.038	-0.207	A8	0.105	0.387	A1	0.111	-0.172	A1	0.188	-0.125	B2	0.070	0.385
			A5	0.023	-0.164	B12	0.067	-0.132	A2	0.062	-0.069	A11	0.067	0.363
			B6	0.020	-0.154	B1	0.047	-0.112	A9	0.045	0.058	A12	0.047	0.327
			A2	0.016	0.134	A3	0.040	-0.103	A11	0.032	0.046	A6	0.036	0.278
						A10	0.029	-0.091	A3	0.014	-0.032	B12	0.021	0.203
						A9	0.028	0.085				B3	0.017	0.193
						A2	0.013	-0.058				A4	0.014	0.177
R ² = 0.9354			R ² = 0.9313			R ² = 0.9847			R ² = 0.9956			R ² = 0.8803		

Tabela 5.8. Coeficientes de correlação posicional parcial (CCPP) e coeficientes da regressão posicional padronizada (CRPP) em função da dose máxima anual, considerando-se o conjunto total de 500 valores.

Y5			Y1			Y2			Y3			Y4		
			RND(Y1,Y5)= 0.9478 Prob T = 0.0001			RND(Y2,Y5)=-0.4705 Prob T = 0.0001			RND(Y3,Y5)=-0.4155 Prob T = 0.0001			RND(Y4,Y5)=-0.0944 Prob T = 0.0349		
VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP
A6	0.381	1.112	A6	0.464	1.239	A6	0.369	-1.024	A6	0.347	-1.015	B2	0.133	0.669
B2	0.122	0.530	B7	0.081	0.406	B11	0.237	0.753	B2	0.248	0.804	A6	0.099	-0.559
A8	0.062	-0.366	A10	0.065	-0.397	B2	0.111	0.477	A10	0.087	0.438	A10	0.041	0.354
A10	0.039	-0.290	B2	0.065	0.332	A10	0.080	0.402	B7	0.069	0.390	A8	0.039	-0.342
B7	0.033	0.266	A12	0.030	0.235	A11	0.074	0.376	A11	0.056	0.336	A11	0.036	0.325
A12	0.031	0.256	A9	0.015	0.165	B12	0.030	0.237	A5	0.022	0.209	A12	0.031	0.301
A1	0.012	0.134	A8	0.014	-0.162	A5	0.024	0.209	B12	0.020	0.202	B7	0.024	0.269
B11	0.010	0.144	A1	0.013	0.134	A12	0.013	0.157	A12	0.010	0.140	B12	0.011	0.180
A9	0.009	0.134	A2	0.008	0.124	B7	0.010	0.138	A7	0.007	0.117	A5	0.010	0.166
			A5	0.007	-0.116	A7	0.008	0.126						
						A1	0.006	-0.105						
R ² = 0.8728			R ² = 0.8872			R ² = 0.8860			R ² = 0.8768			R ² = 0.8203		

Tabela 3.9. Coeficientes de correlação posicional parcial (CCPP) e coeficientes da regressão posicional padronizada (CRPP) em função da dose máxima anual, considerando-se o subconjunto de 272 vetores com $Y5 < 1.0E-05$ area/ano.

Y5			Y1			Y2			Y3			Y4		
			RND(Y1,Y5)= 0.8789 Prob T = 0.0001			RND(Y2,Y5)= 0.4918 Prob T = 0.0001			RND(Y3,Y5)= 0.8133 Prob T = 0.0001			RND(Y4,Y5)= 0.6254 Prob T = 0.0001		
VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP
B2	0.736	1.409	B7	0.761	1.534	B11	0.837	1.339	B2	0.980	1.969	B2	0.973	1.935
B7	0.580	1.015	B2	0.556	0.933	B2	0.732	1.100	B7	0.415	0.241	B7	0.441	0.283
A1	0.097	-0.276	A1	0.056	-0.206	A1	0.103	-0.228	A1	0.213	-0.145	A1	0.199	-0.155
B11	0.027	0.141	A9	0.028	0.147	A11	0.014	0.081	A9	0.150	0.120	A9	0.123	0.120
A10	0.018	-0.121	B6	0.014	-0.104	A4	0.014	-0.078	A11	0.039	0.058	A11	0.040	0.045
A9	0.014	0.104	B11	0.012	-0.093	B1	0.012	-0.074	A10	0.050	-0.053	A12	0.015	-0.038
B1	0.014	-0.099	A10	0.011	-0.097				A12	0.015	-0.034	A7	0.013	-0.036
A11	0.013	0.097	B5	0.011	-0.094				A7	0.012	-0.031	A8	0.013	-0.035
R ² = 0.9564			R ² = 0.9557			R ² = 0.9726			R ² = 0.9152			R ² = 0.9941		

Tabela 5.10. Coeficientes de correlação posicional parcial (CCPP) e coeficientes de regressão posicional padronizada (CRPP) em função da dose máxima anual, considerando-se o subconjunto de 228 vetores com $Y5 > 1.0E-05$ arez/ano.

Y5			Y1			Y2			Y3			Y4		
			RND(Y1,Y5)= 0.6549 Prob T = 0.0001			RND(Y2,Y5)= 0.3227 Prob T = 0.0001			RND(Y3,Y5)=-0.3337 Prob T = 0.0001			RND(Y4,Y5)=-0.4759 Prob T = 0.0001		
VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP	VAR	CCPP	CRPP
A12	0.722	1.634	A12	0.689	1.917	B11	0.269	0.917	B7	0.286	0.949	A8	0.295	-1.049
A8	0.153	-0.438	A6	0.231	0.947	A8	0.240	-0.890	A8	0.245	-0.888	A6	0.168	0.765
B6	0.021	-0.144	A8	0.166	0.442	A11	0.102	0.483	B11	0.076	0.426	A11	0.061	0.375
B12	0.018	0.128	A2	0.036	0.190	B12	0.066	0.387	A6	0.059	0.378	B11	0.059	0.387
			A5	0.026	-0.160	A6	0.061	0.389	A11	0.052	0.331	B7	0.043	0.331
			A11	0.020	-0.133	B6	0.039	-0.301	A7	0.030	0.267	B3	0.035	0.363
			B3	0.017	-0.131	B7	0.020	0.220	A4	0.019	0.215	A12	0.021	0.235
			A9	0.014	0.118	A7	0.018	0.209	B6	0.018	-0.200	B6	0.020	-0.218
						A5	0.015	0.186	A2	0.014	-0.176	B12	0.013	0.173
						A4	0.013	0.193						
						B3	0.014	0.184						
R ² = 0.9427			R ² = 0.9423			R ² = 0.8650			R ² = 0.8691			R ² = 0.8301		

CAPITULO 8

CONCLUSOES

Os resultados obtidos demonstram que a metodologia empregada no presente trabalho, baseada na construção de superfície resposta, pode ser um meio eficaz de se efetuar análises de sensibilidade em códigos computacionais complexos como PRESTO-II, que envolvem centenas de variáveis de entrada apresentando extensos intervalos de variação. Em particular, a linearização do modelo através de transformadas por posição e a utilização dos coeficientes de correlação parcial e dos coeficientes da regressão padronizada como metodologia para posicionar a importância das variáveis, mostraram-se instrumentos poderosos de análise, utilizáveis em investigações futuras, em diferentes condições de cenário.

No caso específico do sítio de Barnwell, observa-se claramente que a principal via de transporte dos radionuclídeos é através de águas subterrâneas. Quais seriam então as consequências ao se introduzir barreiras de engenharia que permitissem reduzir ou retardar a contaminação do lençol freático? Em termos de modelagem matemática, parece-nos pois importante que se equacione de forma mais abrangente os aspectos relativos ao aumento do tempo de retenção dos

radionuclídeos na trincheira, quer pela hipotética adição de barreiras que dificultem a sua migração vertical, cu que diminuam a probabilidade de infiltração de água na trincheira.

Esses estudos seriam importantes nos projetos otimizados de novos repositórios, principalmente se localizados em clima relativamente úmido, se levarmos em consideração que a construção de barreiras de engenharia não significa automaticamente uma diminuição de dose na população, em virtude do possível surgimento de novas vias críticas de exposição.

Há ainda um potencial muito grande de informações que podem ser obtidas deste trabalho, como por exemplo, através da análise mais detalhada dos indicadores de sensibilidade; tais estudos nos levariam, seguramente, a uma simplificação no equacionamento de determinados processos que se revelaram pouco significativos em termos de contribuição à dose no público.

Em continuidade a este trabalho, sugerimos:

- Modificar os critérios de amostragem dos vetores de entrada, utilizando alguma forma estratificada de amostragem por Monte Carlo, como por exemplo através do método de amostragem por hipercubo.
 - Desenvolver metodologias de construção de superfícies resposta através de regressões não lineares.
 - Efetuar uma detalhada comparação entre vários indicadores estatísticos de sensibilidade.
 - Desenvolver critérios para a análise de incerteza do modelo.
-

REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

1. ANSPAUGH, L.R.; SHINN, J.H.; PHELPS, P.L.; KENNEDY, N.C. Resuspension and redistribution of plutonium in soils. *Health Physics*, 29:571-82, 1975.
2. BAES-III, C.F. & SHARP, R.D. A proposal for estimating of soil leaching and leaching constants for use in assessment models. *J.Environmental Quality*, 12(1):17-28, 1983.
3. BANDROWSKY, M.S. & HUNG, C.Y. Environmental transport pathways of the EPA model (PRESTO-EPA) used to determine health impact from low-level radioactive waste disposal. *Proceedings of the eighteenth mdyear topical symposium of the Health Physics Society, January 6-10, 1985. Colorado Springs, Colorado.*
4. BANDROWSKY, M.S.; HUNG, C.Y.; MEYER, G.L. Results of sensitivity analysis on EPA's codes for assessing potential health impact from land disposal of low-level radioactive wastes. *Proceedings of the thirty-first annual meeting of the Health Physics Society, June 29-July 3, 1986. Pittsburgh, Pennsylvania.*
5. BEGOVICH, C.L.; ECKERMAN, K.F.; SCHLATTER, E.C.; OHR, S.Y. DARTAB: A program to combine airborne radionuclide environmental exposure data with dosimetric and health effects data to generate tabulations of predicted impacts. Oak Ridge, TN, Oak Ridge National Laboratory, 1981. (ORNL-5692).
6. CHEM-NUCLEAR SYSTEMS, INC. *Environmental assessment for Barnwell low-level radioactive waste disposal facility. Columbia, S.C., 1980.*
7. CHEN, H.H. *Transient simulation and sensitivity analysis for transport of radionuclides in a saturated-unsaturated groundwater flow system. Knoxville, TN, 1980. (Tese de doutoramento, The University of Tennessee).*
8. CONOVER, W.J. *Practical nonparametric statistics. 5.ed. New York, N.Y., John Wiley, 1980.*
9. CONOVER, W.J. & IMAN, R.L. On some alternative procedures using ranks for the analysis of experimental designs. *Commun. Statist., A5(14):1349-66, 1976.*
10. DRAPPER, M.R. & SMITH, H. *Applied regression analysis. 2.ed. New York, N.Y., John Wiley, 1981.*
11. DUNNING JR., D.E.; LEGETT, R.W.; YALCINTAS, M.G. *RADRISK: A combined methodology for estimating dose rates and health effects from exposures to radioactive pollutants. Oak Ridge, TN, Oak Ridge National Laboratory, 1981. (ORNL/TM-7105).*
12. FIELDS, D.E. & MILLER, C.W. *User's Manual for DWNWD: An interactive implementation of the gaussian plume atmospheric transport model with eight dispersion parameter*

- options.* Oak Ridge, TN, Oak Ridge National Laboratory, 1980. (ORNL/TH-8674).
13. FIELDS, D.E.; EMERSON, C.J.; CHESTER, R.O.; LITTLE, C.A.; HIROMOTO, G. *PRESTO-II: A low-level waste environmental transport and risk assessment code.* Oak Ridge, TN, Oak Ridge National Laboratory, 1986. (ORNL-5970).
 14. FLETCHER, J.F. & DOTSON, W.L. *HERMES: A digital computer code for estimating regional radiological effects from the nuclear power industry.* Washington, D.C., United States Atomic Energy Commission, 1971. (USAEC Report HEDL-TME-71-188).
 15. FRANK, P.M. *Introduction to system sensitivity theory.* New York, N.Y., Academic, 1978.
 16. FREEZE, R.A. & CHERRY, J.A. *Groundwater.* Englewood Cliffs, N.J., 1979.
 17. GRAYBILL, F.A. *An introduction to linear statistical models.* New York, N.Y., MacGraw-Hill, 1961. v.1.
 18. HELTON, J.C. & IMAN, R.L. *Risk methodology for geologic disposal of radioactive waste: sensitivity analysis of the environmental transport model.* Albuquerque, N.M., Sandia National Laboratories, 1980. (SAND79-1393, NUREG/CR-1838, v.2)
 19. HELTON, J.C.; IMAN, R.L.; JOHNSON, J.D.; LEIGH, C.D. Uncertainty and sensitivity analysis of a model for multi-component aerosol dynamics. *Nuclear Technology* 73(2): 320-42, 1988.
 20. HOFFMAN, F.O. & BAES-III, C.F. *A statistical analysis of selected parameters for predicting food chain transport and internal dose of radionuclides.* Oak Ridge, TN, Oak Ridge National Laboratory, 1979. (ORNL/NUREG/TH-282, NUREG/CR-1004).
 21. HOFFMAN, F.O. & GARDNER, R.H. Evaluation of uncertainties in radiological assessment models. In: TILL, J.B. & MEYER, H.R., eds. *Radiological assessments.* Washington, D.C., U. S. Nuclear Regulatory Commission, 1983. v.2, cap.11.
 22. IMAN, R.L. A power study of a rank transform for the two-way classification model when interaction may be present. *Canadian J. Statist. Appl.*, 2(2):227-39, 1974.
 23. IMAN, R.L. & CONOVER, W.J. The use of the rank transform in regression. *Technometrics*, 21(4):499-509, 1979.
 24. IMAN, R.L. & CONOVER, W.J. *Sensitivity analysis techniques: self-teaching curriculum.* Albuquerque, N.M., Sandia National Laboratories, 1982. (SAND81-1978, NUREG/CR-2350).
 25. IMAN, R.L. & HELTON, J.C. *Comparison of uncertainty and sensitivity analysis techniques for computers models.* Albuquerque, N.M., Sandia National Laboratories, 1985. (SAND84-1461, NUREG/CR-3904).

26. IMAN, R.L. & HELTON, J.C. An investigation of uncertainty and sensitivity analysis techniques for computer models. *Risk Analysis*, 8(1):71-90, 1988.
27. IMAN, R.L.; HELTON, J.C.; CAMPBELL, J.E. *Risk methodology for geologic disposal of radioactive waste: sensitivity analysis techniques*. Albuquerque, N.M., Sandia National Laboratories, 1978. (SAND78-0912, NUREG/CR-0394).
28. IMAN, R.L.; SHORTECARRIER, M.J.; JOHNSON, J.D. *A FORTRAN-77 program and user's guide for the calculation of partial correlation and standardized regression coefficients*. Albuquerque, N.M., Sandia National Laboratories, 1985. (SAND85-0044, NUREG/CR-4122).
29. INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY. *Shallow ground disposal of radioactive wastes*. Vienna, 1981. (Safety Series No. 53).
30. INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY. *Underground disposal of radioactive wastes*. Vienna, 1981. (Safety Series No. 54).
31. INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY. *Criteria for underground disposal of solid radioactive wastes*. Vienna, 1983. (Safety Series No. 60).
32. INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY. *Safety analysis methodologies for radioactive waste repositories in shallow ground*. Vienna, 1984. (Safety Series No. 64).
33. INTERNATIONAL COMMISSION OF RADIOLOGICAL PROTECTION. *Radiation protection principles for the disposal of solid radioactive waste*. Oxford, Pergamon, 1985. (ICRP-46).
34. LARGE, D.E. USDOE needs in modeling for low-level radioactive waste management. In: LITTLE, C.A. ed. *Modeling and low-level waste management: An interagency workshop, Denver, Colorado, December 1-4, 1980*. Oak Ridge, TN, 1981. (ORO-821). p.3-8.
35. LEBART, L.; MORINEAU, A.; FENELON, J.P. *Traitement des données statistiques*. 2.ed. Paris, Dunod, 1982.
36. LITTLE, C.A.; FIELDS, D.E.; EMERSON, C.J.; HIROMOTO, G. *Environmental assessment model for shallow land disposal of low-level radioactive wastes: Interim report*. Oak Ridge, TN, Oak Ridge National Laboratory, 1981. (ORNL/TM-7943).
37. McELROY, A. D.; CHIN, S. Y.; NEBGEN, J. W.; ALETI, A.; BENNETT, F.W. *Loading function for assessment of water pollution from nonpoint sources*. Washington, D.C., Environmental Protection Agency, 1976. (EPA-600/2-76-151).
38. MEYER, G.L. Recent experience with the land burial of solid low-level radioactive wastes. In: INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY. *Management of radioactive wastes from the nuclear fuel cycle: proceedings of a symposium held in Vienna, 22-26 March, 1976*. Vienna, 1976, v.2, p.383-95. (IAEA-SM-207/84).

39. MEYER, G.L. Modeling and analysis to support EPA's low-level radioactive waste standards. In: LITTLE, C.A. ed. *Modeling and low-level waste management: An interagency workshop, Denver, Colorado, December 1-4, 1980*. Oak Ridge, TN, 1981, (ORO-821). p.9-19.
40. MOORE, R.E.; BAES-III, C.F.; McDOWELL-BOYER, L.H.; WATSON, A. P.; HOFFMAN, F. O.; PLEASANT, J. C.; MILLER, C. W. *AIRDOS-EPA. A computerized methodology for estimating environmental concentrations and dose to man from airborne releases of radionuclides*. Oak Ridge, TN, Oak Ridge National Laboratory, 1979. (ORNL-5532).
41. MORTON, F.I. Climatological estimates of evapotranspiration. *Proc. ASCE, Journal Hydraulics Div. Paper 11974*. 102(HY3):257-90, 1974.
42. MORTON, F.I. Estimating evapotranspiration from potential evaporation: Practicality of an iconoclastic approach. *J. Hydrology*, 38:1-32, 1978.
43. MYERS, R.H. *Response surface methodology*. Boston, Massachusetts, Allyn and Bacon, 1971.
44. PLEASANT, J.C. *INGDOS: A conversational computer code to implement U. S. Nuclear Regulatory Commission Regulatory Guide 1.109 models for estimation of annual doses from ingestion of atmospherically released radionuclides in foods*. Oak Ridge, TN, Oak Ridge National Laboratory, 1979. (ORNL/TM-8571).
45. PINNER, A.V. & MAPLE, J.P. *Radiological impact of shallow land burial: Sensitivity to site characteristics and engineered features of burial facilities*. Luxemburgo, Commission of the European Communities, 1987. (EUR-10816 EN)
46. PORN, K. & AKERLUND, O. *Procedures for uncertainty and sensitivity analysis in repository performance assessment*. Nykoping, Studsvik Energiteknik AB, 1985. (SKB Technical Report 65-18).
47. SALTELLI, A. *PREP and SPOP Utilities. Two FORTRAN programs for sample preparation, uncertainty analysis and sensitivity analysis in Monte Carlo simulation. Programs description and user's guide*. Luxemburgo, Commission of the European Communities, 1987. (EUR-11034-EN)
48. SALTELLI, A. & HARIVOET, J. *Performance of non-parametric statistics in sensitivity analysis and parameter ranking*. Luxemburgo, Commission of the European Communities, 1987.
49. SAS INSTITUTE INC. *SAS user's guide: Statistics, version 5.ed.* Cary, N.C., 1985.
50. SHINN, J. J.; KENNEDY, W. C.; KOVAL, J. S.; CLESS, B. A.; PORCH, W.M. Observations of dust flux in the surface boundary layer for steady and non-steady cases. In: ENSELMANN, R. J. & SEHMEL, G. A., eds. *Atmosphere-surface exchange of particulate and gaseous pollutants*. Rich-

land, Washington, 1974. (ERDA Symposium Series No. 38, CONF-740921).

51. SYKES, J.F.; PAIWA, S.B.; LANTZ, R.B.; WARD, D.S. Numerical simulation of flow and contaminant migration at an extensively monitored landfill. *Water Resources Research*, 18(6):1687-704, 1982.
52. SYKES, J. F.; SOYUPAK, S.; FARQUHAR, G. J. Modeling of leachate organic migrations and attenuation in groundwaters bellow sanitary landfills. *Water Resources Research*, 18(1):135-45, 1982.
53. TOMOVIC, R. & VUKOBRATOVIC, M. *General sensitivity theory* New York, N.Y., Elsevier, 1972.
54. UNITED STATES DEPARTMENT OF AGRICULTURE. *An universal equation for predicting rainfall-erosion losses*. U.S. Agricultural Research Service, Special Report 22-6, 1961.
55. UNITED STATES ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. *PRESTO-EPA: A low-level waste environmental transport and risk assessment code - Methodology and user's manual*. Washington, D.C., U.S.Environmental Protection Agency, 1983. (EPA 520/5-83-004).
56. UNITED STATES NUCLEAR REGULATORY COMMISSION. *Calculation of annual doses to man from routine releases of reactor effluents for the purpose of evaluating compliance with 10 CFR Part 50, Appendix I*. Washington, D. C., 1977. (Regulatory Guide 1.109(Rev.1)).
57. UNITED STATES NUCLEAR REGULATORY COMMISSION. *Environmental assesment for the Barnwell low-level waste disposal facility*. Washington, D. C., 1982. (NUREG-0879).
58. WESOLOWSKY, G.O. *Multiple regression and analysis of variance*. New York, N.Y., John Wiley, 1976.