



DETERMINAÇÃO DA CORREÇÃO DA EFICIÊNCIA DE DETECÇÃO EM
ENSAIOS DE ESPECTROMETRIA GAMA DE AMOSTRAS MULTIFÁSICAS
UTILIZANDO MONTE CARLO PARA USO EM REDES NEURAIAS

Fernando Bouzon Nagem Assad

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

Orientador(es): Inaya Lima Rocha
Rogério de Andrade Filgueiras

Rio de Janeiro
Fevereiro de 2024

DETERMINAÇÃO DA CORREÇÃO DA EFICIÊNCIA DE DETECÇÃO EM
ENSAIOS DE ESPECTROMETRIA GAMA DE AMOSTRAS MULTIFÁSICAS
UTILIZANDO MONTE CARLO PARA USO EM REDES NEURAIAS

Fernando Bouzon Nagem Assad

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

Orientador(es): Inaya Lima Rocha
Rogério de Andrade Filgueiras

Aprovada por: Prof. Inaya Lima Rocha
Prof. Rogério de Andrade Filgueiras
Prof. Jardel Lemos Thallofer
Prof. Alphonse Germaine Albert Charles

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL
FEVEREIRO DE 2024

Assad, Fernando Bouzon Nagem

Determinação da Correção da Eficiência de Detecção em Ensaio de Espectrometrias Gama de Amostras Multifásicas Utilizando Monte Carlos para Uso em Redes Neurais / Fernando Bouzon Nagem Assad. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2024.

XII, 56 p.: il.; 29,7 cm.

Orientadores: Inaya Lima Rocha

Rogério de Andrade Filgueiras

Dissertação (mestrado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Nuclear, 2024.

Referências Bibliográficas: p. 54-56.

1. Espectrometria Gama. 2. Monte Carlos. 3. Redes Neurais Artificiais. I. Rocha, Inaya Lima et al. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Nuclear. III. Título.

*Dedicado à Arnaldo Barros
Nagem Assad, que esteve
presente, mesmo não podendo.*

Agradecimentos

Este trabalho agradece o órgão de fomento CNPq pelo financiamento da bolsa de pesquisa e toda equipe do Laboratório de Análises Ambientais e Simulação Computacional (LAASC) da COPPE pelo suporte e apoio. Gostaria de agradecer a todos.

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

DETERMINAÇÃO DA CORREÇÃO DA EFICIÊNCIA DE DETECÇÃO EM
ENSAIOS DE ESPECTROMETRIA GAMA DE AMOSTRAS MULTIFÁSICAS
UTILIZANDO MONTE CARLO PARA USO EM REDES NEURAIIS

Fernando Bouzon Nagem Assad

Fevereiro/2024

Orientador (es): Inaya Lima Rocha

Rogério de Andrade Filgueiras

Programa: Engenharia Nuclear

A espectrometria de raios gama é um método analítico que permite a identificação e quantificação de isótopos emissores de gama em uma variedade de matrizes. O detector HPGe utilizado na instrumentação deve ser calibrado para a geometria do bquer utilizado. Algumas amostras coletadas em campo para este tipo de análise, depois de certo tempo de armazenamento, podem sofrer decantação (tal como a borra de petróleo e fluídos de perfuração). Este trabalho tem como objetivo determinar os valores de correção para os dados obtidos experimentalmente em amostras heterogêneas, uma vez que o processo de decantação influencia na eficiência da detecção de radionuclídeos e analisar a possibilidade de usar esses dados para treinar uma rede neural. Através de simulações com o MCNPX, foi montada uma base de dados para o treinamento da RNA a fim de identificar o quanto a decantação afeta nos dados em função da sua geometria, da energia a ser detectada e da quantidade de compartimentos que o recipiente será dividido. Os resultados obtidos serão usados como parâmetros para corrigir os valores de concentração de atividade obtidos experimentalmente em laboratórios. Os resultados mostraram que a RNA, junto com a simulação de Monte Carlo, é capaz de calcular a diferença entre os valores de eficiência de amostras decantadas e amostras homogêneas usadas como padrão. Obteve-se os valores de correção de eficiências com geometrias mais simples para os radionuclídeos mais comuns encontrados, por exemplo, em um bquer de 5cm de altura e 5cm de diâmetro, um fator de correção de 0.652616 para o potássio-40 foi encontrado para correção de valores experimentais. Logo, este método permite a correção acurada dos valores das medições.

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

DETERMINATION OF THE CORRECTION FOR DETECTION EFFICIENCY IN
GAMMA SPECTROMETRY OF MULTIPHASE SAMPLES USING MONTE
CALOR FOR NEURAL NETWORK APPLICATIONS

Fernando Bouzon Nagem Assad

February/2024

Advisor: Inaya Lima Rocha

Department: Nuclear Engineering

Gamma spectrometry is an analytical method that allows for the identification and quantification of gamma-emitting isotopes in various matrices. The HPGe detector used in the instrumentation must be calibrated for the geometry of the beaker used. Some field-collected samples for this type of analysis, after a certain storage period, may experience settling. The creation of a compartmentalized container can bring a distribution closer to homogeneity for such samples. This work aims to develop an Artificial Neural Network (ANN) capable of providing correction values for experimentally obtained data in heterogeneous samples since the settling process influences the efficiency of radionuclide detection.

Through simulations with MCNPX, a database was assembled for training the ANN to identify how settling affects the data based on the container's geometry, the energy to be detected, and the number of compartments the container will be divided into. The obtained results will be used as parameters to correct the concentration values of activity obtained experimentally in laboratories. The results showed that the ANN, along with Monte Carlo simulation, can calculate the difference between the efficiency values of settled and homogeneous samples used as a standard. Therefore, this method allows for accurate correction of measurement values.

Sumário

Lista de Figuras	ix
Lista de Tabelas	xi
1 Introdução	1
2 Fundamentação Teórica	4
2.1 Radioatividade natural	4
2.1.1 Decaimentos radioativos naturais	4
2.2 Detecção de radioatividade	8
2.2.1 Desafios na detecção precisa de radioatividade	8
2.2.2 Relevância para a indústria do petróleo:	9
2.2.3 Importância da classificação de rejeitos	10
2.3 RNA(Rede Neural Artificial)	11
2.3.1 Introdução	11
2.3.2 Neurônio Artificial	13
2.3.3 Redes Neurais Multicamadas	16
2.3.4 Back-up Propagation.....	17
2.3.5 Validação Cruzada.....	19
2.3.6 Redes neurais Convolucionais	20
2.4 Método de Monte Carlo	21
2.4.1 Introdução	21
2.4.2 MCNP	22
2.5 Espectrometria gama.....	24
2.5.1 Introdução	24
2.5.2 Fundamentos da radiação:	25
2.5.3 Interação com a matéria.....	26
2.5.4 Atenuação do feixe de fótons:	27
2.5.5 Detectores de Radiação.....	28
3 Revisão Bibliográfica	33

4 Método Proposto	36
5 Resultados e Discussões	44
5.1 Análise da Eficiência em função dos parâmetros de entrada em soluções homogêneas	44
5.2 Análise da Eficiência em função dos parâmetros de entrada em soluções heterogêneas	46
6 Conclusões e Perspectivas Futuras	50
7 Anexos	52
Referências Bibliográficas	53

Lista de Figuras

2.1	Série do Actínio[1].....	5
2.2	Série do Urânio-238[1].....	6
2.3	Série do Tório[1].....	7
2.4	Ilustração de neurônios conectados[2].....	13
2.5	Modelo básico do neurônio artificial.....	14
2.6	Exemplos de funções de ativação.....	15
2.7	Função sigmoide.....	16
2.8	RNA multicamadas.....	17
2.9	RNA com realimentação.....	18
2.10	Interpretação de uma Rede Neural Convulacional.....	20
2.11	Poder de Freamento de Alumínio para vários íons.....	29
2.12	Coefficiente de Absorção para um cristal de NaI.....	30
3.1	Visualização do detector HPGe simulado.....	33
4.1	Desenho esquemático didático de um béquer de 4 divisões com raio da base de 5cm e altura 5cm.....	37
4.2	Amostra homogênea em corte longitudinal.....	38
4.3	Amostra homogênea em corte longitudinal.....	38
4.4	Amostra Heterogênea em corte longitudinal, com 5 divisões.....	39
4.5	Vistas em perspectivas superior.....	40
4.6	Vistas em perspectivas inferior.....	41
4.7	Vista em perspectivas superior béquer montado.....	42
4.8	Vistas em perspectivas inferior do béquer montado.....	42
5.1	Gráfico de Energia por Eficiência em uma amostra homogênea em um béquer de 5 cm por 5 cm.....	44
5.2	Gráfico de Energia por Eficiência em uma amostra homogênea em um béquer de 5 cm por 15 cm.....	45
5.3	Gráfico de Energia por Eficiência em uma amostra homogênea em um béquer de 15 cm por 5 cm.....	45

5.4	Gráfico de Energia por Eficiência em uma amostra homogênea em um bquer de 13 cm por 9 cm.....	46
5.5	Eficiências do K-40 no bquer de 5x5 cm com diferentes números de divisões.....	47
5.6	Eficiências do Pb-214(295.2KeV) nos diferentes béqueres.....	47
5.7	Eficiências do Pb-214(351.9KeV) nos diferentes béqueres	48
5.8	Eficiências do Pb-212 nos diferentes béqueres	48
5.9	Fatores de correção para o K-40 em um bquer compartimentado.....	49

Lista de Tabelas

2.1	Características do Silício (Si) e Germânio (Ge).....	32
3.1	Dimensões do detector simulado.....	34
4.1	Parâmetros de entrada	36

Capítulo 1

Introdução

Atualmente, existe um desafio significativo no campo da espectrometria gama: a medição precisa da atividade de radionuclídeos em amostras com distribuição heterogênea. Um exemplo pragmático desse desafio é observado nas borras de petróleo, que são resíduos resultantes do processo de produção e refino de petróleo. Essas borras frequentemente exibem uma variabilidade notável na concentração de radionuclídeos naturais, abrangendo uma faixa que vai do nível de background ambiental, que é relativamente baixo, até valores surpreendentemente elevados, chegando a milhares de Becquerels por quilograma (Bq/kg). Esta ampla variação demanda uma vigilância rigorosa, especialmente do ponto de vista ambiental.[3]

A determinação precisa da concentração de atividade dos radionuclídeos em amostras de borra de petróleo é crucial para determinar o tratamento adequado desses materiais. E de acordo com o nível de concentração encontrada, essas amostras podem ser classificadas como rejeitos radioativos, o que tem implicações significativas para as empresas da indústria de petróleo e gás. Uma classificação incorreta pode resultar em consequências legais, financeiras e ambientais graves. Portanto, a obtenção de medidas precisas é de suma importância para garantir o tratamento adequado desses resíduos.

No entanto, a complexidade das amostras de borra de petróleo representa um desafio para a medição precisa da atividade dos radionuclídeos. Essas amostras são notoriamente heterogêneas em termos de estados físicos e químicos. Por exemplo, é comum encontrar uma fase sólida imersa em uma emulsão de água em óleo ou óleo em água. Em algumas amostras, a fase sólida tende a decantar, concentrando-se no fundo do recipiente, enquanto em outras, a borra de petróleo exibe uma fase sólida granulada dispersa em uma matriz predominantemente oleosa, com viscosidades variáveis.[3]

É possível observar, que mesmo em amostras de borra de petróleo com alta viscosidade, observa-se uma tendência das frações mais pesadas a se depositarem no fundo do recipiente após um determinado período. Essa segregação de fases e

a não homogeneidade da amostra introduzem erros significativos nas medidas de atividade, comprometendo a precisão e confiabilidade dos resultados obtidos.[3]

Embora os softwares proprietários, que se baseiam no método de Monte Carlo e são desenvolvidos por fabricantes de detectores, ofereçam maior flexibilidade na criação de geometrias específicas, eles têm limitações. Esses softwares não possibilitam a simulação de amostras compostas por duas ou mais fases distintas, onde cada fase contém radionuclídeos em proporções variadas.[4]

Buscando as medições precisas de radionuclídeos, é proposto um novo projeto de recipiente que armazena a amostra, um béquer compartimentado. Para otimizar seu design e funcionalidade, o interior do béquer é segmentado em múltiplos compartimentos menores.[3] Esses compartimentos são delineados pelas camadas horizontais do béquer, as quais são compostas por diversos módulos empilháveis. Esses módulos interconectam-se de maneira integrada, resultando na configuração final do volume do béquer.

Uma alternativa para contornar essa limitação seria o uso de softwares de simulação Monte Carlo de propósito geral, como o MCNPX, que foi empregado neste estudo específico. No entanto, essa abordagem também apresenta desafios. Ao optar por um software de uso mais amplo, o usuário se depararia com a necessidade de simular não apenas o detector, mas também a amostra complexa. Além disso, em amostras bifásicas ou multifásicas, seria difícil determinar ou estimar a distribuição dos radionuclídeos entre as diferentes fases, o que comprometeria a precisão e a viabilidade da simulação.

O uso de códigos Monte Carlo e LabSOCS como ferramentas para obter curvas de eficiência é considerado aceitável, conforme indicado por várias fontes. [5][4][6] Portanto, neste trabalho, um detector de Germânio de Alta Pureza, fabricado pela Canberra e também modelado no MCNP[4], foi empregado para calcular o fator de correção de autoabsorção para algumas geometrias já descritas na literatura[7].

O uso de um fator de correção é essencial porque a absorção de fótons pela amostra pode significativamente modificar a eficiência de detecção, apresentando variações que podem alcançar até várias dezenas de por cento. Para abordar essa questão, muitos autores costumam apresentar, na literatura, valores **experimentais** de fatores de correção para autoabsorção a serem aplicados em espectrometria.[7] No entanto, esses fatores de correção são sensíveis à geometria utilizada, o que obriga o pesquisador a adotar o mesmo suporte de amostra descrito pelo autor original. Isso pode ser impraticável para alguns laboratórios. Além disso, essa abordagem pode introduzir erros se a composição química da amostra não for considerada adequadamente.

Visando contornar as dificuldades envolvidas na medição precisa, técnicas de inteligência artificial (IA), especialmente redes neurais artificiais (RNAs) podem ser

empregadas para trazer, para uma ou mais geometrias previamente simuladas, fatores de correção para medidas que reflitam as condições ideais de distribuição homogênea de radionuclídeos.

As RNAs são modelos matemáticos inspirados no cérebro humano que possuem a capacidade de extrair conhecimento por experiência, a partir de um conjunto finito de exemplos (padrões), e generalizá-lo, ou seja, ter a capacidade de responder adequadamente a situações não contidas nos padrões de treinamento. As RNAs têm sido aplicadas com sucesso em diversas classes com problemas, tais como reconhecimento e classificação de imagens, voz e sinais em geral, identificação de comportamentos e tendências [8]. O conjunto de padrões utilizado para treinamento e avaliação de generalização da RNA pode ser obtido por simulação matemática utilizando um código computacional baseado no método de Monte Carlo(MC).

Portanto, a busca por metodologias e técnicas robustas que possam superar esses desafios e fornecer medidas precisas da atividade dos radionuclídeos em amostras de borra de petróleo é uma área de pesquisa e desenvolvimento em constante evolução. A capacidade de obter medidas precisas não apenas facilitará o tratamento adequado desses resíduos, mas também contribuirá para a proteção ambiental e a segurança pública, garantindo que os materiais sejam manuseados, armazenados e descartados de maneira segura e responsável.

Capítulo 2

Fundamentação Teórica

2.1 Radioatividade natural

2.1.1 Decaimentos radioativos naturais

Os decaimentos radioativos representam um fenômeno intrínseco e espontâneo que caracteriza a radioatividade natural. Este processo de transformação nuclear é marcado pela instabilidade dos núcleos atômicos, que buscam alcançar um estado mais estável e equilibrado.

Dentro do vasto domínio da radioatividade natural, identificamos especificamente três séries radioativas predominantes: a série de urânio(²³⁸U), a série de actínio(²³⁵U) e a série do tório(²³²Th). Cada uma dessas séries é distinguida e nomeada com base no elemento radioativo que serve como ponto de partida ou início da sequência de decaimentos.

Séries radioativas:

²³⁵U

A série do actínio, por exemplo, tem seu nome derivado do elemento urânio, um dos elementos mais notáveis e reconhecidos no contexto da radioatividade.

A série de decaimento do urânio-235 é um conjunto de transformações radioativas que ocorrem naturalmente, levando a uma cadeia de elementos filhos até que um isótopo estável seja alcançado. O urânio-235 (²³⁵U) é um isótopo do urânio e constitui uma pequena fração do urânio natural. Aqui está uma explicação simplificada da série de decaimento do ²³⁵U:

- **Decaimento Alfa do ²³⁵U:** O ²³⁵U sofre um decaimento alfa, onde emite uma partícula alfa e se transforma no primeiro elemento filho, o ²³¹Th (tório-231).

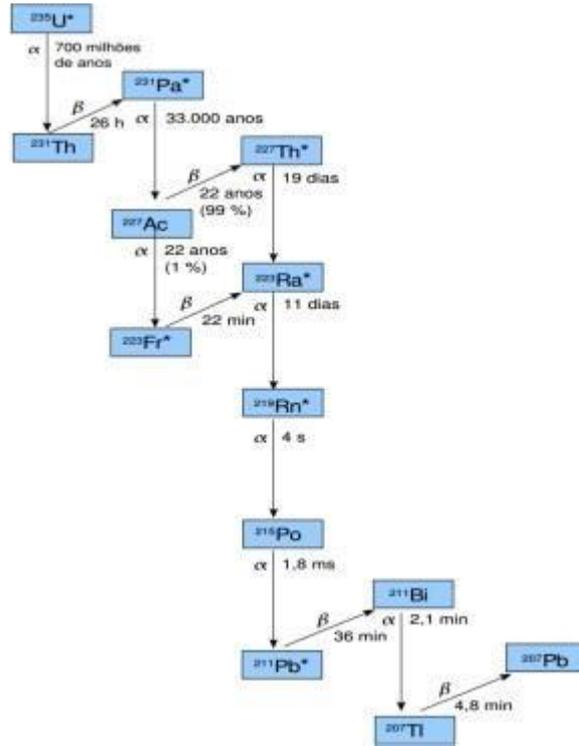


Figura 2.1: Série do Actínio[1]

- **Decaimento Beta do ^{231}Th :** O ^{231}Th sofre um decaimento beta negativo, transformando-se em ^{231}Pa (protactínio-231).
- **Série de Elementos Filhos:** O ^{231}Pa passa por uma série de decaimentos radioativos, resultando em outros isótopos, incluindo actínio-227 (^{227}Ac), rádio-223 (^{223}Ra) e radônio-219 (^{219}Rn), entre outros.
- **Decaimento Estável do ^{207}Pb :** A série continua com uma série de decaimentos alfa e beta até que o isótopo ^{207}Pb (chumbo-207) seja alcançado. Este é o fim da série de decaimento do ^{235}U porque o ^{207}Pb é um isótopo estável e não sofrerá decaimento adicional.

^{238}U

A série de decaimento do urânio-238 (^{238}U) refere-se a uma cadeia sequencial de transformações radioativas que ocorrem naturalmente, levando a uma progressão de elementos filhos até que um isótopo estável seja formado. Esta série radioativa é frequentemente referida como "série de urânio" ou "série de rádio".

- **Início com o ^{238}U :** A série começa com o isótopo ^{238}U , que é o isótopo de urânio mais comum encontrado na natureza. Ele possui uma meia-vida muito longa, tornando-o uma fonte estável para a série de decaimento.

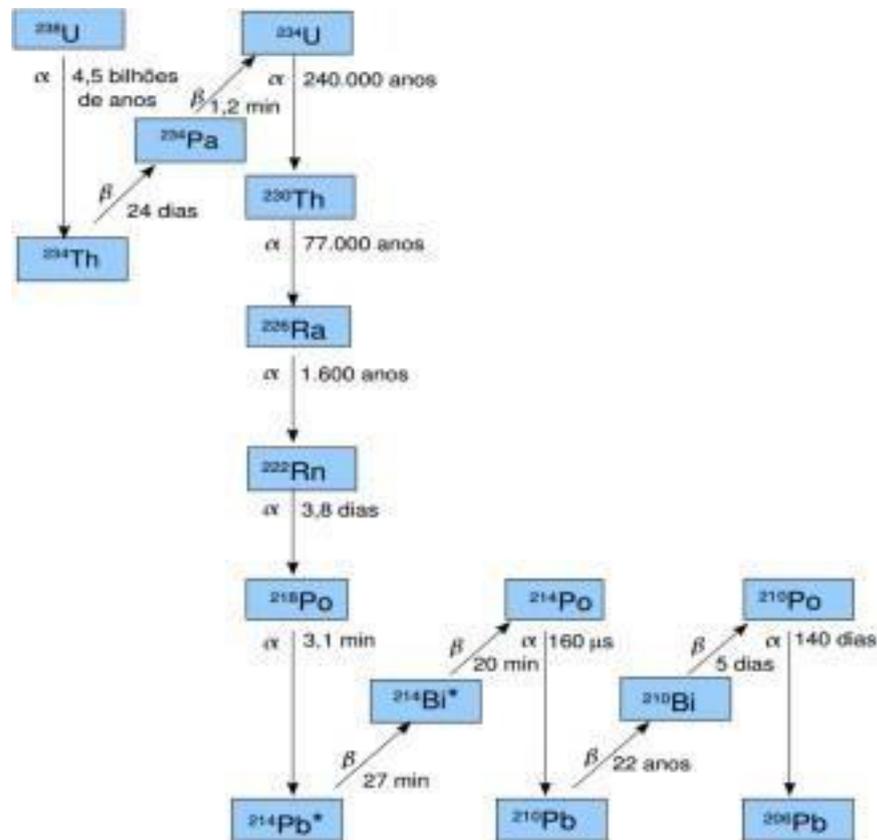


Figura 2.2: Série do Urânio-238[1]

- Progressão de Elementos Filhos:** À medida que o ^{238}U decai, ele se transforma em uma série de elementos filhos por meio de diferentes tipos de decaimentos radioativos, incluindo decaimento alfa, beta e gama. Alguns dos elementos filhos incluem tório-234 (^{234}Th), protactínio-234 (^{234}Pa), rádio-226 (^{226}Ra), polônio-210 (^{210}Po), chumbo-210 (^{210}Pb), entre outros. Cada elemento na série de decaimento tem sua própria meia-vida, que pode variar de segundos a milhares de anos. Isso significa que alguns elementos filhos têm uma vida útil muito curta e desaparecem rapidamente, enquanto outros persistem por períodos mais longos.
- Estabilidade Final:** A série de decaimento do ^{238}U culmina com a formação do isótopo (^{206}Pb (chumbo-206), que é estável e não sofre mais decaimento radioativo. O chumbo-206 marca o fim da série de decaimento do ^{238}U , representando o destino final da progressão de transformações nucleares.

^{232}Th

A série de decaimento do tório-232 (^{232}Th) é um processo radioativo natural que envolve uma sequência de transformações nucleares, levando a uma progressão de elementos filhos até que um isótopo estável seja formado. Esta série radioativa é conhecida como a "série do tório".

- **Início com o ^{232}Th :** A série começa com o isótopo ^{232}Th , um isótopo de tório estável e relativamente comum encontrado na natureza.

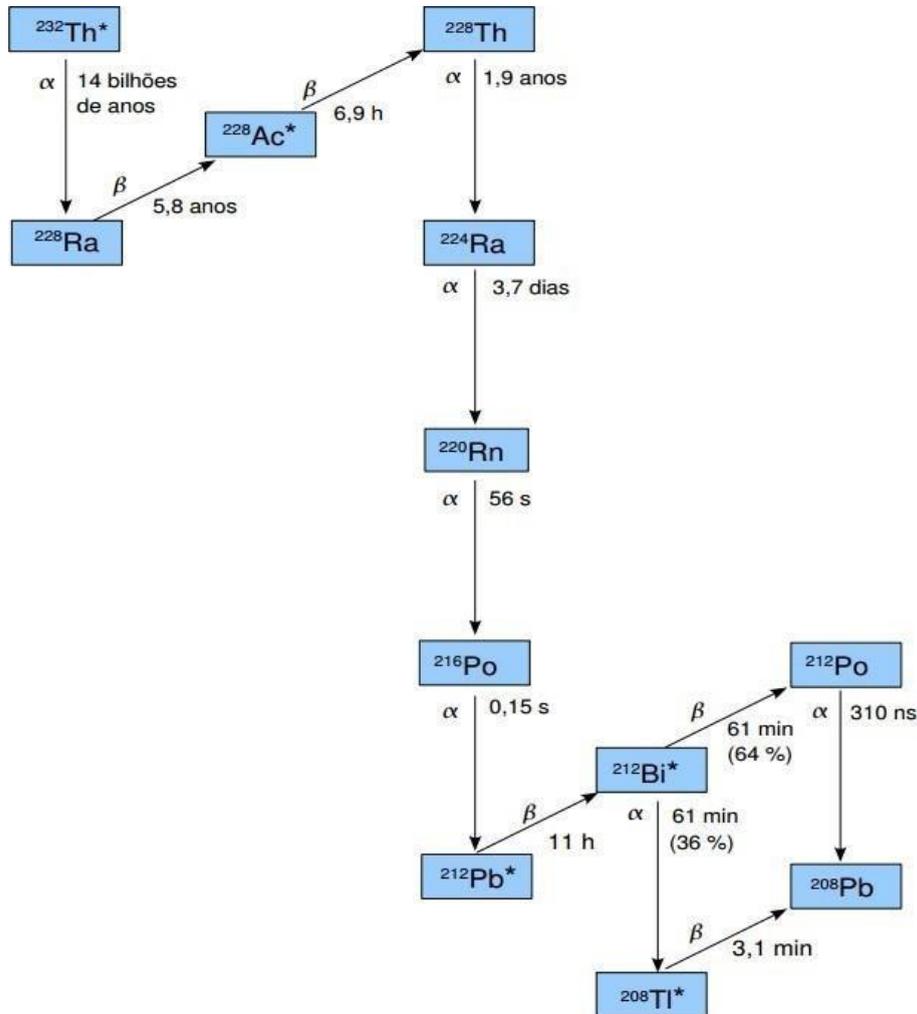


Figura 2.3: Série do Tório[1]

- **Progressão de Elementos Filhos:** À medida que o ^{232}Th decai, ele se transforma em uma série de elementos filhos por meio de diferentes tipos de decaimentos radioativos, incluindo decaimento alfa, beta e gama. Alguns dos elementos filhos na série incluem rádio-228 (^{228}Ra), tório-228 (^{228}Th), radônio-224 (^{224}Rn), polônio-220 (^{220}Po), chumbo-212 (^{212}Pb), entre outros. Cada elemento na série de decaimento do ^{232}Th tem sua própria meia-vida, que

pode variar de frações de segundos a milhares de anos. Isso resulta em uma progressão contínua de elementos filhos ao longo do tempo.

- **Estabilidade Final:** A série de decaimento do ^{232}Th culmina com a formação do isótopo ^{212}Pb (chumbo-208), que é estável e não sofre mais decaimento radioativo. O chumbo-208 marca o fim da série de decaimento do ^{232}Th , representando o destino final da progressão de transformações nucleares.

2.2 Detecção de radioatividade

2.2.1 Desafios na detecção precisa de radioatividade

A detecção de radioatividade em amostras pode apresentar diversos desafios, principalmente devido às características físicas e químicas dos materiais que podem interferir na medição e no resultado final. Alguns dos desafios mais comuns encontrados na detecção de radioatividade em amostras incluem:[9]

- **Baixa atividade:** em algumas amostras, a atividade radioativa pode ser muito baixa, o que pode dificultar a detecção, principalmente em equipamentos menos sensíveis.
- **Efeito de matriz:** a presença de outros elementos ou compostos na amostra pode interferir na detecção de radioatividade, reduzindo a sensibilidade e a precisão das medições.
- **Interferência de radiação de fundo:** a presença de radiação natural de fundo pode interferir na detecção de radioatividade em amostras, reduzindo a sensibilidade dos equipamentos de medição.
- **Contaminação cruzada:** a contaminação cruzada entre amostras pode ocorrer, principalmente durante a preparação e manuseio das amostras, o que pode interferir nos resultados das medições.

Para superar esses desafios, é importante adotar técnicas e procedimentos adequados para a preparação das amostras e para a detecção de radioatividade, além de utilizar equipamentos sensíveis e calibrados para a medição. Além disso, é fundamental garantir a segurança dos profissionais envolvidos na coleta e análise das amostras, através do uso de equipamentos de proteção individual e da adoção de procedimentos seguros para a manipulação de materiais radioativos.[9]

Outro desafio importante na detecção de radioatividade em amostras é a distribuição de massa da amostra, ou seja, a forma como os elementos radioativos estão

distribuídos na matriz da amostra. Em alguns casos, a distribuição pode ser homogênea e bem definida, o que facilita a detecção de radioatividade. No entanto, em outras situações, a distribuição pode ser heterogênea e complexa, o que pode dificultar a detecção precisa da atividade radioativa.[10]

A distribuição de massa da amostra pode afetar a eficiência de detecção dos equipamentos, principalmente em técnicas de detecção que dependem da interação dos raios gama com o material da amostra. Em casos em que a distribuição de massa é desconhecida ou variável, é importante utilizar técnicas de correção para estimar a atividade radioativa real da amostra.[11]

Por isso, a distribuição de massa da amostra é uma consideração importante na detecção de radioatividade, e é fundamental realizar uma análise cuidadosa da amostra para determinar a melhor técnica de detecção e as correções adequadas para obter resultados precisos e confiáveis.

2.2.2 Relevância para a indústria do petróleo:

A indústria do petróleo é uma das que mais gera rejeitos radioativos, principalmente durante o processo de exploração e produção de petróleo e gás natural. Os rejeitos radioativos gerados na indústria do petróleo são classificados de acordo com sua origem e composição, podendo ser classificados como:

- Resíduos de perfuração: gerados durante a perfuração de poços de petróleo, são compostos por lamas de perfuração, cascalhos e outros materiais contaminados com materiais radioativos, como o urânio e o tório.
- Água produzida: durante o processo de extração do petróleo e do gás natural, é gerada uma grande quantidade de água salgada, conhecida como água produzida. Essa água pode conter materiais radioativos, como o radônio e o rádio.
- Borra (escrever sobre)
- Incrustação (escrever sobre)
- Equipamentos e materiais contaminados: durante as atividades de exploração e produção de petróleo, os equipamentos e materiais utilizados podem se tornar contaminados com materiais radioativos.

A classificação dos rejeitos radioativos na indústria do petróleo é realizada seguindo as mesmas diretrizes e normas estabelecidas para a gestão de resíduos radioativos em geral, descritos na norma CNEN 8.02 [12]. É importante ressaltar que a gestão de rejeitos radioativos na indústria do petróleo requer uma abordagem cuidadosa e rigorosa, devido aos riscos associados à radiação ionizante.

Entre as práticas de gestão de rejeitos radioativos na indústria do petróleo, incluem-se a minimização da geração de rejeitos, o tratamento e acondicionamento

adequados dos resíduos gerados, o transporte seguro e a disposição final em instalações apropriadas e licenciadas para esse fim. Além disso, é importante garantir a capacitação e treinamento dos profissionais envolvidos na gestão dos rejeitos radioativos, bem como a implementação de um sistema de monitoramento e controle dos níveis de radiação nas instalações e áreas próximas.

2.2.3 Importância da classificação de rejeitos

A classificação de rejeitos radioativos é de extrema importância para garantir a segurança radiológica e proteção da saúde humana e do meio ambiente.

Os rejeitos radioativos são resíduos gerados a partir de atividades que envolvem materiais radioativos, tais como usinas nucleares, hospitais, laboratórios, indústrias, entre outros. Esses resíduos podem apresentar diferentes níveis de radiação e riscos associados, exigindo uma classificação adequada para um gerenciamento seguro. A classificação de rejeitos radioativos é realizada com base em critérios estabelecidos por normas e regulamentações nacionais e internacionais. Esses critérios levam em consideração a natureza do material radioativo, seu tempo de decaimento, atividade, concentração, forma física, entre outros aspectos.[13]

A partir da classificação, os rejeitos radioativos são encaminhados para tratamentos adequados, armazenamento e disposição final, de forma a garantir a segurança radiológica e proteção da saúde humana e do meio ambiente. Portanto, a classificação de rejeitos radioativos é uma etapa fundamental para o gerenciamento seguro e responsável desses resíduos, garantindo a proteção radiológica e ambiental, e contribuindo para a segurança das atividades que envolvem materiais radioativos.[13]

Na indústria do petróleo, os rejeitos radioativos são gerados principalmente a partir da perfuração de poços e da produção de petróleo e gás natural. Esses rejeitos podem incluir tubos e equipamentos contaminados, lamas de perfuração e resíduos radioativos líquidos ou sólidos.[13]

Tratamento de rejeitos:

O tratamento de rejeitos radioativos na indústria do petróleo é uma questão crítica, pois a contaminação radioativa pode representar um risco para o meio ambiente e para a saúde humana. Por isso, é importante que os rejeitos sejam tratados e descartados de forma segura e adequada.[14] Existem diferentes técnicas de tratamento de rejeitos radioativos na indústria do petróleo, dependendo da natureza dos rejeitos e da sua atividade radioativa. Alguns dos métodos mais comuns incluem:

- **Separação e segregação:** essa técnica envolve a separação dos rejeitos em diferentes tipos, com base na sua atividade radioativa e na sua natureza química

e física. Isso permite que os rejeitos possam ser tratados de forma mais eficaz e segura.

- Descarte em aterros especiais: os rejeitos de baixa atividade radioativa podem ser armazenados em aterros especiais, que são projetados para minimizar a exposição à radiação. Esses aterros são monitorados regularmente para garantir a segurança do meio ambiente e da saúde pública.
- Tratamento térmico: essa técnica envolve a incineração dos rejeitos radioativos em altas temperaturas, o que reduz o seu volume e a atividade radioativa. No entanto, essa técnica pode gerar gases tóxicos e resíduos sólidos perigosos, que precisam ser tratados adequadamente.
- Tratamento químico: essa técnica envolve o uso de soluções químicas para dissolver os rejeitos radioativos e separar os materiais contaminados. Essa técnica é eficaz para tratar resíduos líquidos radioativos, mas pode gerar subprodutos químicos perigosos que precisam ser tratados adequadamente.

2.3 RNA(Rede Neural Artificial)

2.3.1 Introdução

O cérebro humano, composto por redes neurais biológicas, é uma estrutura notavelmente complexa, capaz de processamento não linear e paralelo, organizando-se para realizar tarefas específicas [8]. Essa capacidade de organização paralela possibilita ao ser humano armazenar e representar conhecimento adquirido, tornando-o acessível. O desenvolvimento de unidades de processamento inspiradas nos neurônios biológicos é historicamente atribuído inicialmente à McCulloch & Pitts (1943), com seu modelo de neurônio artificial que fora baseado principalmente em estudos em neurologia da década de 30 [15].

Ao comparar computadores e cérebros humanos, observa-se que os computadores executam tarefas sequencialmente, seguindo programações em sua memória. Embora sejam mais rápidos e precisos em cálculos matemáticos do que o cérebro humano, os computadores são menos eficientes na realização de funções aparentemente simples para os seres humanos, como identificação e reconhecimento de padrões visuais ou sonoros. Enquanto para um computador essas tarefas são desafiadoras, o cérebro humano pode realizá-las em menos de 200 milissegundos[8]. Essa característica inspirou pesquisadores a desenvolver modelos baseados no funcionamento do cérebro humano, conhecidos como Redes Neurais Artificiais (RNAs).

As RNAs destacam-se por sua capacidade de aprendizado por meio de exemplos, permitindo descobrir comportamentos e padrões a partir de um conjunto finito de

informações, denominado conjunto de treinamento. Quando fornecido um conjunto de treinamento apropriado, a RNA é capaz de generalizar o conhecimento adquirido durante o processo de treinamento, respondendo adequadamente a novas situações não incluídas no conjunto original. O aprendizado de uma Rede Neural Artificial (RNA) é concretizado por meio de processos iterativos de adequações aplicadas aos pesos sinápticos, denominado treinamento. Ou seja, treinar uma rede é encontrar o valor para esses “pesos” que, para cada vetor de entrada, resulta num vetor de saída desejado. As redes artificiais multicamadas possuem as camadas escondidas, que também são chamadas de intermediárias ou ocultas[16].

Uma RNA é composta por unidades de processamento interconectadas chamadas neurônios artificiais, responsáveis por mapear dados de entrada e saída por meio de funções matemáticas, geralmente não lineares. RNAs têm demonstrado aplicabilidade fácil, tanto por meio de software quanto de hardware, sendo eficientes, especialmente em problemas sem formulação analítica ou nos quais não é necessário conhecimento prévio da distribuição das variáveis (dados de entrada e saída), ou ainda em situações em que o problema se modifica ao longo do tempo. O funcionamento de uma RNA pode ser descrito em duas fases distintas[8]:

- A fase de “treinamento” ou “aprendizado”, a qual é realizada pelo uso de um algoritmo de treinamento, onde é necessário que a RNA aprenda características (comportamentos, padrões etc) de um conjunto finito de exemplos previamente e cuidadosamente fornecidos. A etapa de aprendizagem é freqüentemente chamada de fase off-line, consiste em um processo iterativo de ajuste dos parâmetros da rede - os pesos das conexões entre os neurônios - que guardam o conhecimento adquirido pela rede que obteve do ambiente (conhecimento prévio) em que está operando (representando).
- A fase de “operação” (ou uso da RNA), na qual a RNA é usada para responder a novas situações (mundo real). Refere-se a esta fase como fase on-line. Nesta fase a RNA não precisa mais do conjunto de treinamento.

Importante ressaltar que as RNAs tem outras características relevantes na concepção de uma variedade de aplicações:

- Adaptabilidade: algoritmos de aprendizagem que permitem a adaptação em ambientes dinâmicos.
- Processamento não-linear: habilidade de executar tarefas que envolvam relacionamentos não-lineares e tolerantes a ruídos torna as RNAs uma boa técnica para classificação, predição e agrupamentos.

2.3.2 Neurônio Artificial:

O neurônio artificial é a unidade básica de processamento em redes neurais artificiais, que são sistemas computacionais inspirados no funcionamento do cérebro humano, representado na figura 2.4. O objetivo das redes neurais artificiais é aprender a partir de exemplos e realizar tarefas complexas, como reconhecimento de padrões, classificação, previsão, entre outras.

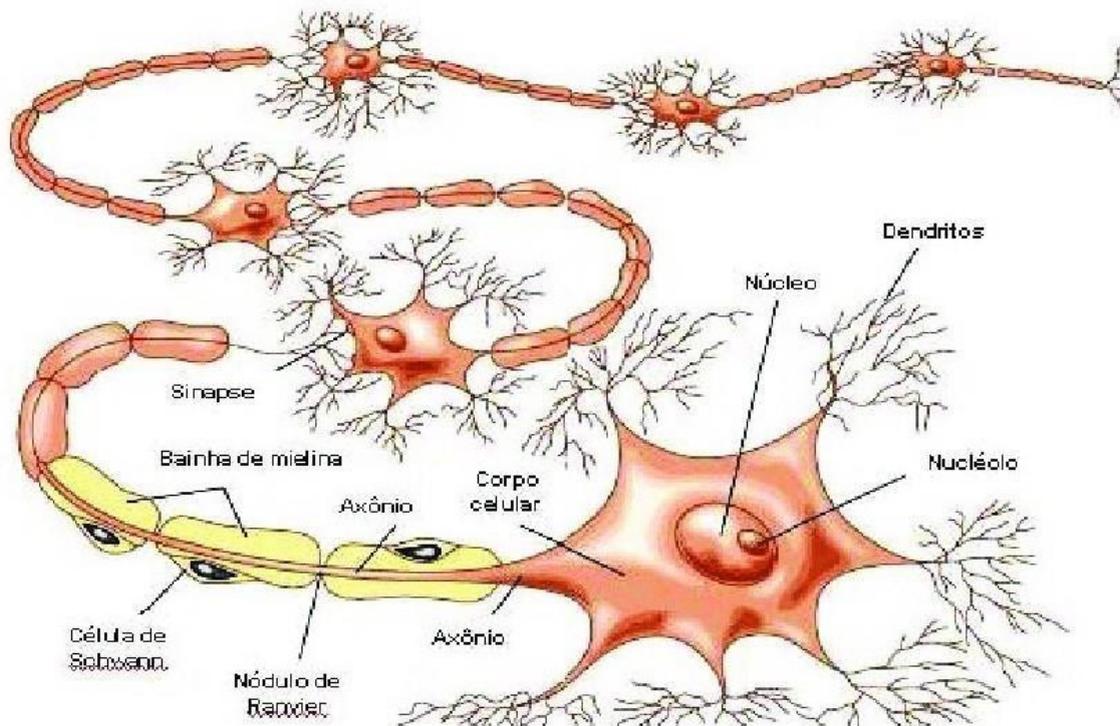


Figura 2.4: Ilustração de neurônios conectados[2]

O cérebro é composto por células altamente especializadas conhecidas como neurônios. Cada neurônio possui um corpo celular contendo o núcleo, onde a maioria dos orgânulos está localizada. Prolongamentos se estendem a partir do corpo celular, funcionalmente divididos em axônios e dendritos [8]. Sinais elétricos são recebidos pelo neurônio através de seus dendritos, processados no corpo celular e, por fim, transmitidos através do axônio para os dendritos de outros neurônios. Essa conexão entre axônio e dendrito é chamada de sinapse. As sinapses são ligações temporárias e químicas, ocorrendo por meio de neurotransmissores. Na sinapse, um pré-processamento pode modificar o sinal de entrada, atenuando-o ou amplificando-o. Por outro lado, em um neurônio artificial, os impulsos/sinais de entrada são representados por valores escalares, e as sinapses são modeladas por pesos que ponderam os sinais de entrada. Esses sinais ponderados são então transmitidos para o

corpo celular, que aplica uma transformação não linear ao somatório das entradas ponderadas. O modelo simplificado do neurônio artificial é ilustrado na Figura 2.5.

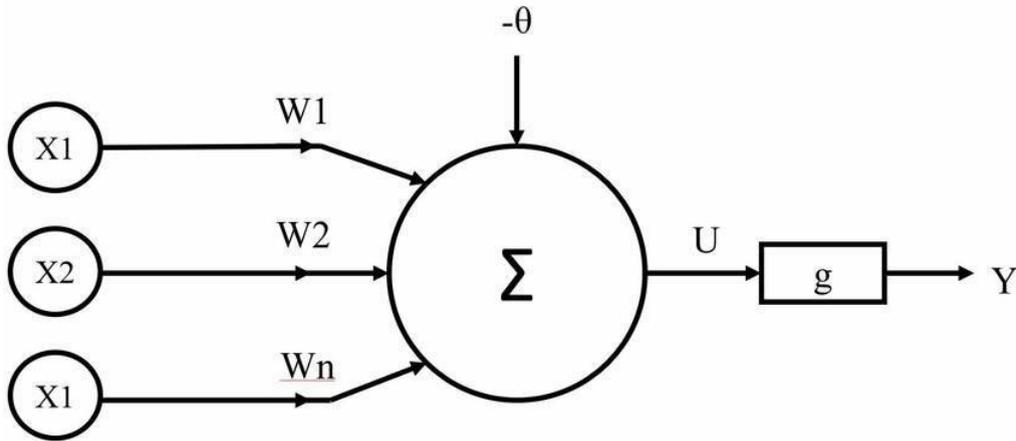


Figura 2.5: Modelo básico do neurônio artificial

O neurônio artificial é composto por um conjunto de entradas, um conjunto de pesos sinápticos, uma função de ativação, um peso de polarização e uma saída. Cada entrada representa um aspecto do sinal de entrada e é multiplicada por um peso sináptico correspondente. O limiar (*threshold*), ϑ , possui a função de deslocar a função de ativação g , mudando o ponto onde a região de ativação do neurônio ocorre. A função de ativação g , tipicamente sigmóide ou logística, é responsável pela intensidade do sinal a ser transmitido limitando a amplitude de saída do neurônio.

O limiar de disparo do neurônio é representado por uma função de transferência que promove a ativação ou a inibição do neurônio onde a função matemática é fornecida pela Equação 2.1.

$$v = g \cdot \left(\sum_{i=1}^n w_i x_i - \vartheta \right) \quad (2.1)$$

onde:

- $X_i (X_1, X_2, \dots, X_m)$ representam as entradas da rede;
- $W_i (W_{t1}, W_{t2}, \dots, W_{tm})$ representam os pesos sinápticos associados a cada componente, “xm”;
- ϑ representa o peso da polarização (**bias**);
- g representa a função de ativação.

A função de ativação é geralmente uma função não linear, que permite que o neurônio artificial realize tarefas complexas e aprenda a partir de exemplos. Alguns

exemplos de funções de ativação comuns são a função identidade(a), a função limiar(b), a função logística(c), a função tangente hiperbólica(d), a função sigmoide e a função ReLU (Rectified Linear Unit), representados nas figuras 2.6 e 2.7.

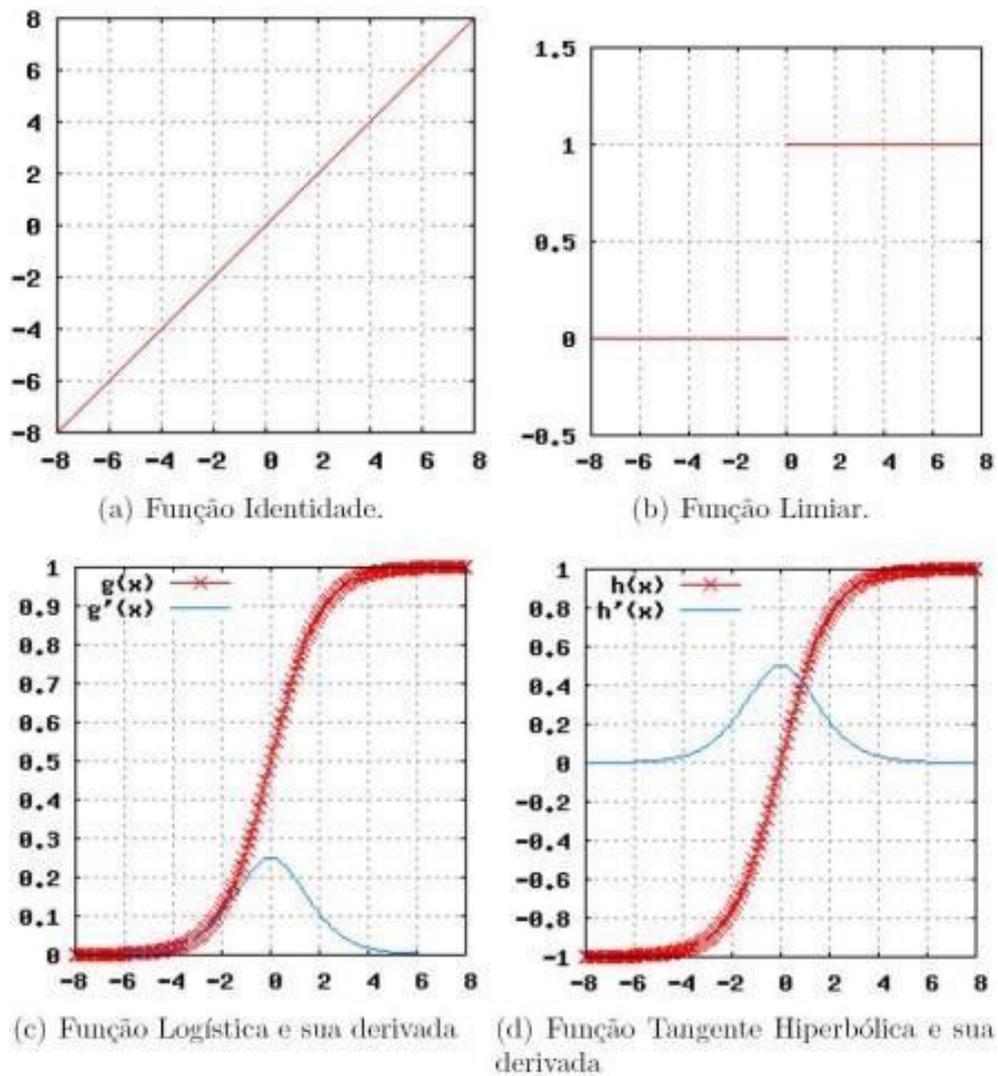


Figura 2.6: Exemplos de funções de ativação

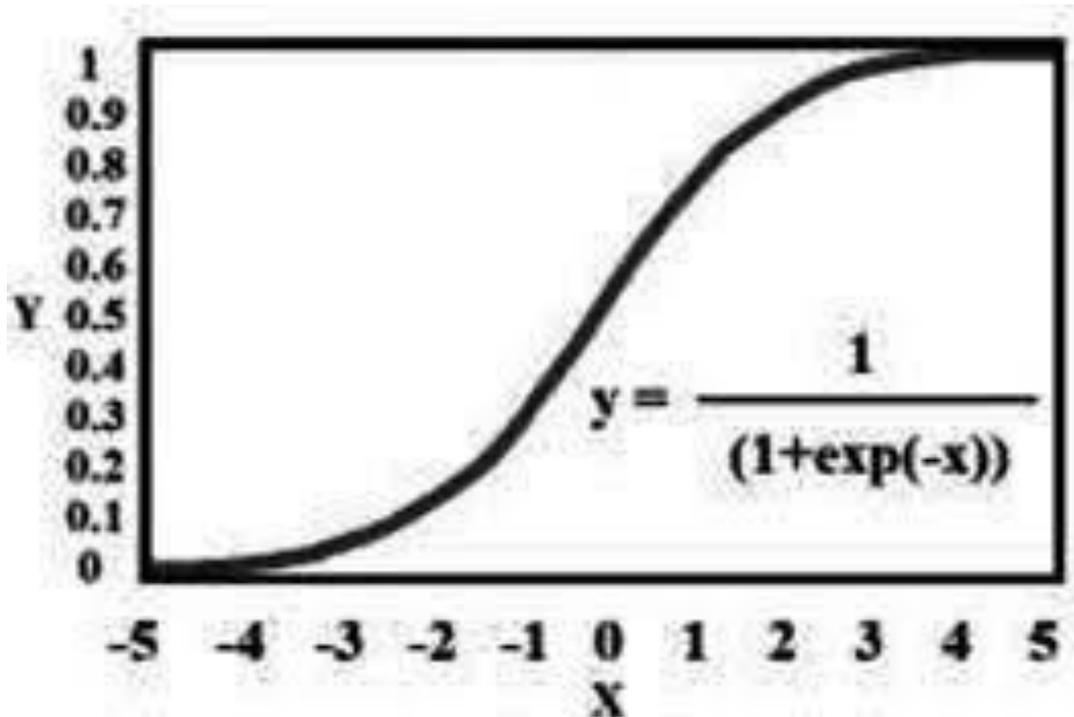
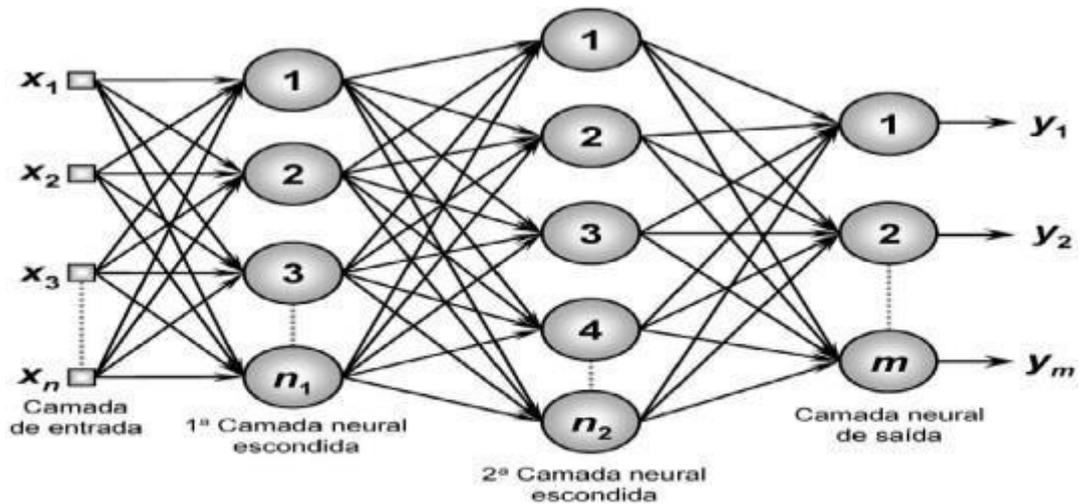


Figura 2.7: Função sigmoide

Os pesos sinápticos são ajustados durante o treinamento da rede neural, de modo que a saída do neurônio se aproxime o máximo possível da saída desejada para cada exemplo de treinamento. Esse processo é repetido para todos os neurônios da rede neural, permitindo que a rede aprenda a partir dos exemplos e realize tarefas complexas.

2.3.3 Redes Neurais Multicamadas

Uma RNA multicamadas com propagação do sinal adiante, do inglês *feed-forward Multilayer Perceptron* (MLP), é composta de várias camadas de neurônios, como ilustrado na Figura 2.8. Este tipo de arquitetura caracteriza-se pela organização dos neurônios em uma camada de entrada, uma ou mais camadas intermediárias, onde ocorre a maior parte do processamento por meio das conexões ponderadas, e uma camada de saída. As saídas dos neurônios de uma camada são conectadas aos neurônios da próxima camada, sem realimentação.



(fonte: SILVA et al, 2010, p.48).

Figura 2.8: RNA multicamadas

A rede MLP é reconhecida como um aparelho capaz de aproximar funções de forma universal, pois tem a capacidade de mapear tanto funções lineares quanto não-lineares. A precisão dessa aproximação é notadamente influenciada pelo número de neurônios na rede, além da seleção criteriosa do conjunto de dados de treinamento. O aprendizado de uma RNA é feito por meio de treinamento, desta forma, a rede adapta-se aos dados de forma a assimilar o conhecimento neles contido. De uma forma geral, o treinamento de uma rede pode ser caracterizado como supervisionado ou não- supervisionado.

- No treinamento não-supervisionado (auto-organizável) os pesos são ajustados em função da similaridade (classes ou grupos) dos dados de entrada formando grupamentos (clusters). Neste tipo de treinamento não existe saída previamente conhecida. Para extrair características relevantes é necessário que entradas semelhantes sejam apresentadas à RNA.
- No treinamento supervisionado, por sua vez, cada padrão de treinamento compreende um vetor de entrada bem como um vetor de saída a ele associado (previamente conhecido). Na essência, este aprendizado é a disponibilidade de um conhecimento prévio do ambiente que está sendo representado.

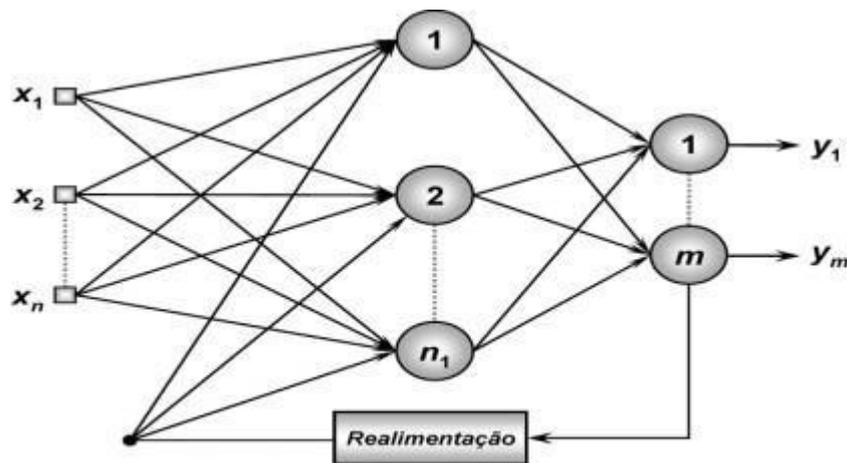
2.3.4 Back-up Propagation

Durante o processo de treinamento supervisionado, a rede é exposta a dados, resultando em um mapeamento que possibilita a determinação de respostas com base

nesses dados. Em seguida, ao comparar a resposta da rede com a resposta esperada (previamente conhecida), os pesos das sinapses são ajustados para minimizar o erro.

Esse processo de treinamento é iterativo e conclui-se quando um critério de parada específico é atingido. O vetor que contém os valores dos pesos sinápticos ao final do treinamento reflete o conhecimento adquirido pela rede, relacionado à sua capacidade de generalização. Isso significa que a rede pode calcular com precisão uma saída para valores de entrada não apresentados durante o treinamento. A seleção de um conjunto representativo de pares conhecidos de valores de entrada e saída desempenha um papel crucial na capacidade de generalização da rede neural após o treinamento.

O algoritmo de *Back propagation* (retropropagação) é um algoritmo de treinamento de redes neurais artificiais, que realiza aproximações locais para o mapeamento entre a entrada e a saída da rede e é empregado para classificar, aproximar funções e prever (verificar) tendências. Em síntese, o algoritmo de retropropagação do erro é baseado no método de gradiente descendente, que calcula as derivadas parciais de uma função de erro, com relação ao vetor peso (w) de certo vetor de entradas (x). Seu objetivo é minimizar a função erro entre a saída real da rede e a saída desejada.



(fonte: SILVA et al, 2010, p.49).

Figura 2.9: RNA com realimentação

O algoritmo de retropropagação do erro é o mais utilizado e de propósito geral, e ainda, 80 a 90% das aplicações desenvolvidas com RNAs empregaram alguma versão deste algoritmo. O treinamento da rede, baseado na generalização da regra delta, é dividido em duas fases principais. Inicialmente, escolhem-se, geralmente de forma aleatória, os pesos sinápticos e apresenta-se um padrão à camada de entrada da rede.

- A primeira fase consiste na propagação adiante (forward) dos estímulos apresentados que fluem por meio da rede, da entrada para a saída, camada por camada até que seja obtida a resposta da rede (saída). A saída obtida é comparada com a saída desejada calculando-se o erro entre eles.
- ii) A segunda fase ocorre em sentido oposto, onde este erro é retropropagado pelas camadas antecessoras até a camada de entrada, modificando apropriadamente os pesos das conexões das unidades das camadas internas para que se produza a saída desejada diante da respectiva entrada.

2.3.5 Validação Cruzada

O conjunto de treinamento é empregado no processo iterativo para calcular os erros e, conseqüentemente, ajustar os pesos sinápticos utilizando o algoritmo de retropropagação do erro sob o paradigma de aprendizado supervisionado. Conforme o treinamento avança, observa-se uma tendência de redução do erro, podendo a rede apresentar superajustamento (*overfitting*) aos valores desse conjunto, resultando na perda da capacidade de generalização. Para contornar esse problema, recorre-se ao mecanismo de validação cruzada (*cross-validation*), iniciando a divisão do conjunto de dados em dois subconjuntos: Treinamento e Teste.

Durante o treinamento, a rede é avaliada periodicamente em ambos os subconjuntos, sendo que apenas o conjunto de treinamento é utilizado na correção dos pesos sinápticos. O conjunto de Teste é empregado para verificar a generalização da rede, ou seja, avaliar a eficácia da RNA e prevenir o superajustamento. O erro para o subconjunto de Teste geralmente diminui inicialmente durante o treinamento e, em seguida, aumenta quando a rede começa a se superajustar, indicando uma perda de generalização. Nesse momento, é crucial interromper o processo de treinamento.

Um terceiro subconjunto de dados, denominado Validação ou Produção, é utilizado para verificar se a rede produz saídas com erros inferiores a uma precisão desejada ao final do treinamento. A relevância desse conjunto reside no fato de que os dados não foram previamente utilizados pela rede durante o treinamento, proporcionando uma medida imparcial da capacidade de generalização, sem viés. Em resumo, o processo de generalização envolve a interpolação de outros pontos não pertencentes ao conjunto de treinamento, mas próximos a ele[8].

A avaliação do desempenho das redes é realizada por meio de métricas de erro aplicadas a cada subconjunto de dados, como os valores do Erro Médio Quadrático (EMQ), até alcançar um nível suficientemente pequeno ou quando a função objetivo se torna estacionária.

2.3.6 Redes neurais Convolucionais

As redes neurais convolucionais (RNC) são um tipo de rede neural que é especialmente adequado para lidar com dados de entrada com estrutura de grade, como imagens, vídeos e sinais de áudio. A principal diferença entre as CNNs e outras redes neurais é o uso de operações de convolução para extrair características relevantes dos dados de entrada. As CNNs são particularmente úteis para tarefas de classificação de imagens, reconhecimento de objetos, segmentação de imagens e geração de imagens. De maneira semelhante aos processos tradicionais de visão computacional, uma RNC é capaz de aplicar filtros em dados visuais, mantendo a relação de vizinhança entre os pixels da imagem ao longo do processamento da rede.

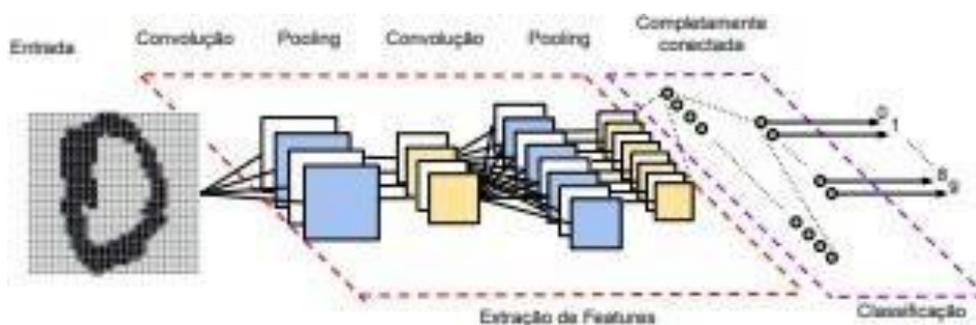


Figura 2.10: Interpretação de uma Rede Neural Convulacional

As RNCs operam aplicando um conjunto de filtros de convolução em uma imagem de entrada. Esses filtros são aprendidos durante o processo de treinamento e são usados para detectar padrões em diferentes partes da imagem, como bordas, texturas e formas. A saída da operação de convolução é uma representação reduzida da imagem, chamada de mapa de características ou mapa de convolução. Em seguida, a rede aplica uma operação de pooling, que reduz ainda mais a dimensão do mapa de características, mantendo as informações mais relevantes. Por fim, a rede aplica uma ou mais camadas totalmente conectadas, que transformam as informações reduzidas do mapa de características em uma saída final, como uma classificação ou uma previsão.

As CNNs são altamente eficientes em termos de computação, uma vez que compartilham os parâmetros dos filtros de convolução em diferentes partes da imagem, reduzindo assim o número de parâmetros necessários para a rede. Isso também torna as CNNs menos suscetíveis ao overfitting, ou seja, a rede é menos propensa a memorizar os dados de treinamento em vez de aprender padrões relevantes.

Enquanto na formulação clássica de perceptrons, cada neurônio é conectado a

todos os neurônios da camada anterior, resultando em uma conexão completamente conectada, nas Redes Neurais Convolucionais (CNNs), apenas um subconjunto de entradas está conectado a cada neurônio. Com a mudança na arquitetura, as CNNs passam a realizar análise de campos receptivos locais. Os neurônios da mesma camada são agrupados em mapas, sendo que um mapa é produzido pelo agrupamento das saídas de neurônios que cobrem uma parte da imagem processada com um filtro em comum.

Para que um conjunto de neurônios de um determinado mapa aplique o mesmo filtro em diferentes posições da imagem, ocorre o compartilhamento de pesos durante o processo de treinamento. Esse compartilhamento reduz significativamente o número de parâmetros a serem aprendidos, resultando em um tempo de treinamento da rede mais eficiente. A fim de simplificar a representação dessas redes, um filtro a ser aplicado na imagem é visualmente representado por apenas um neurônio, embora haja a falsa sensação de que ele executa o processo de percorrimto da imagem de maneira isolada.

2.4 Método de Monte Carlo

2.4.1 Introdução

O método de Monte Carlo (MC) é uma ferramenta de simulação utilizada por meio de códigos computacionais, utilizado devido ao avanço da tecnologia computacional. O método MC é usado para representar teoricamente processos estocásticos, como no caso da área de transporte de radiação. O método simula as trajetórias de partículas individuais e os processos de interação da radiação com a matéria pela geração de números pseudo-aleatórios, a partir da distribuição de probabilidade que governa os processos físicos envolvidos (interação, espalhamento, captura etc.). Os eventos probabilísticos individuais de cada partícula são simulados sequencialmente, desde o surgimento (na fonte) até seu desaparecimento (fuga do volume de controle ou energia limiar final)[6]. O método de MC se baseia em um teorema da Estatística muito utilizado chamado Teorema do Limite Central (TLC). O TLC é muito utilizado em aplicações práticas, devido a sua abrangência e por permitir conhecer informações de uma distribuição desconhecida qualquer através de suas amostras aleatórias, dentro das condições do teorema[6].

O Método de Monte Carlo é uma técnica numérica amplamente utilizada na engenharia nuclear para simular o transporte de partículas através de materiais e geometrias complexas. Esse método é baseado na geração de números aleatórios para simular os processos de interação das partículas com a matéria.

O método de Monte Carlo é usado em diversas aplicações da engenharia nuclear,

incluindo análise de segurança de reatores, projeto de blindagem de radiação, simulação de detectores, entre outras. O MCNPX (Monte Carlo N-Particle eXtended) é um código de simulação Monte Carlo amplamente utilizado na engenharia nuclear, que permite a simulação detalhada do transporte de partículas em materiais e geometrias complexas.

2.4.2 MCNP

O MCNP é um software de simulação Monte Carlo desenvolvido pelo Los Alamos National Laboratory (LANL) nos Estados Unidos. Esse código permite a simulação de partículas como nêutrons, fótons, elétrons, prótons, entre outros, em diferentes materiais e geometrias. O MCNP é amplamente utilizado na engenharia nuclear para simulação de reatores nucleares, cálculo de doses de radiação, simulação de detectores, entre outras aplicações.

Para elétrons, o código considera pósitrons, raios X de captura K e Bremsstrahlung e para fótons, o código considera:

- • Espalhamento coerente e incoerente,
- • Possibilidade de ocorrer emissão de fluorescência após absorção fotoelétrica, absorção em produção de pares com emissão local de radiação de aniquilação.
- • Radiação de freamento.

A capacidade de tratamento de geometrias complexas tridimensionais e a variedade de opções de dados de entrada fazem deste código uma ferramenta poderosa e conveniente, quando aplicada no campo da proteção radiológica, modelagem de instalações nucleares, detectores, blindagem de radiação etc. O código é bem documentado, tem sido extensamente validado, e os resultados obtidos a partir de seu uso são amplamente aceitos, assim como a extensa metodologia de cálculo aplicada.

O intervalo de energia para fótons, elétrons e nêutrons que é possível de ser representado no MCNP para cada tipo de radiação é:

- • Fótons: 1 keV a 100 GeV;
- • Elétrons: 1 keV a 1 GeV;
- • Nêutrons: 10^{-11} a 20 MeV para todos os isótopos e até 150 MeV para alguns isótopos.

De forma simplificada e tomando como exemplo a história de um fóton, o processo segue as etapas seguintes:

- Seleção aleatória da distância (d) percorrida pelos fótons entre interações descritas pela distribuição de probabilidade exponencial, conforme Equação 2.2.

$$d = -\frac{1}{\mu} \ln A \quad (2.2)$$

Onde: μ : coeficiente de atenuação linear total; A: número aleatório.

- Seleção do tipo de interação, por números aleatórios, proporcional às seções de choque dos processos físicos passíveis de ocorrerem. Dependendo da interação, é feita a escolha de uma nova trajetória.
- Esta história terminará quando o fóton ultrapassar os limites das regiões que descrevem a geometria de contagem (escape), ou quando a energia do fóton ou do elétron alcançar um valor mínimo (energia de corte) ou ainda quando a energia do fóton ou do elétron for completamente absorvida.

Para as simulações deste estudo, foi escolhido o código Monte Carlo N-Particle eXtended Versão 2.5.0 (MCNPX), desenvolvido no Laboratório Nacional de Los Alamos, escrito em Fortran 90, é um código de propósito geral que se baseia no método estatístico de Monte Carlo.

O código possui a capacidade de tratamento de geometrias complexas e a variedade de opções de dados de entrada faz desse código, uma ferramenta muito conveniente e poderosa no campo dos detectores e como utilizado, em simulações de ensaios não destrutivos por meio de espectrometria gama[17]. A escolha desse código foi motivada primeiramente por ser, atualmente, um dos códigos computacionais mais utilizados mundialmente na área de transporte de radiação envolvendo nêutrons, fótons, elétrons e partículas pesadas com carga, tais como prótons, deutérios, partículas alfa, fragmentos de fissão nuclear, etc.[17].

Vantagens do MCNPX:

- Todas as distribuições de fonte, energia, tempo, posição e direção, assim como superfícies ou células de onde as radiações são emitidas podem ser definidas em um arquivo de entrada (INP).
- Obtenção de um arquivo de saída contendo um resumo do problema em estudo, auxiliando a compreensão da física do transporte de partículas no código MCNP-X e a localização de erros quando houver
- O código MCNP-X contém todas as capacidades das versões anteriores do MCNP, adicionando-se a capacidade de transportar 34 novos tipos de partículas (prótons, íons leves etc.), expansão da faixa de energia das partículas

simuladas. Novos modelos físicos de simulação, de técnicas de redução de variância e de técnicas de análise de dados foram adicionados, além de atualizações da extensa coleção de bibliotecas de seção de choque, o que o torna superior a todas as versões de MCNP existentes, inclusive no aspecto de tempo de simulação [18].

O código MCNP-X é composto por uma série de comandos e arquivos de dados relacionados com a interação da radiação com a matéria. Neste contexto, o usuário cria um arquivo de entrada de dados (INP), que é processado pelo MCNP-X, contendo todas as informações pertinentes (descrição de geometria, materiais, registros de saída etc.) para este estudo, foram usados 6 arquivos, representando geometrias diferentes, mas seguindo o padrão de:

- **CARTÕES DE CÉLULAS:** Nesta etapa, é feita a construção da geometria do problema em estudo. Contém as informações sobre o tipo de material e densidade de que cada célula é composta. Para esta representação, utilizam-se combinações de formas geométricas pré-definidas, como esferas, planos, elipsóides, dentre outras, que são selecionadas. As regiões são combinadas utilizando-se operadores booleanos, tais como intercessão e união. Para cada célula é necessário atribuir um número que servirá como sua referência, o número do material que é formado, a densidade, lista dos operadores e superfícies indicativas daquela região.
- **CARTÕES DE SUPERFÍCIES:** As formas geométricas básicas que compõem cada célula são definidas indicando o tipo de superfície seguido de coordenadas que caracterizam seu posicionamento no espaço.
- **CARTÕES DE DADOS:** A fonte é definida de acordo com sua geometria (pontual, plana, volumétrica), posicionamento no espaço, direção, tipo e energia da radiação.

2.5 Espectrometria gama:

2.5.1 Introdução

A espectrometria gama é uma técnica de análise não-destrutiva e não-invasiva que permite a identificação e quantificação de radionuclídeos em amostras, utilizando detectores que medem a energia e a intensidade dos raios gama emitidos por esses radionuclídeos. A espectrometria gama é uma técnica analítica sensível e precisa, capaz de detectar concentrações extremamente baixas de radionuclídeos em uma ampla gama de materiais.

Na engenharia nuclear, a espectrometria gama é amplamente utilizada para a caracterização de materiais radioativos, como combustíveis nucleares, rejeitos radioativos e materiais de construção, bem como para a monitoração de reatores nucleares e para a detecção de materiais nucleares em fronteiras e portos. A espectrometria gama também é utilizada na medicina nuclear, para diagnósticos e terapias de doenças como câncer e problemas cardíacos.

A espectrometria gama é uma técnica de análise extremamente versátil, capaz de fornecer informações sobre a composição química, estrutura e distribuição de radionuclídeos em amostras complexas. Além disso, a espectrometria gama é capaz de detectar radionuclídeos com diferentes níveis de energia e pode ser utilizada para distinguir entre radionuclídeos que emitem raios gama de energia semelhante, mas possuem diferentes períodos de meia-vida.

Na engenharia nuclear, a espectrometria gama desempenha um papel fundamental na caracterização de materiais radioativos e na monitoração da radiação em instalações nucleares. A espectrometria gama também é utilizada em aplicações de segurança nuclear, como na detecção de materiais nucleares em fronteiras e portos, e é uma ferramenta importante na medicina nuclear, para diagnósticos e terapias de doenças relacionadas à radiação.

Por fim, é importante destacar que a espectrometria gama requer uma cuidadosa preparação das amostras, bem como o uso de equipamentos e técnicas adequadas para a detecção e análise dos raios gama. É necessário também um conhecimento sólido em física nuclear e em técnicas de análise de dados para a interpretação dos resultados obtidos pela espectrometria gama.

2.5.2 Fundamentos da radiação:

A radiação é um fenômeno físico natural que ocorre em muitos processos na natureza, incluindo a radioatividade natural de elementos, a radiação solar e a radiação cósmica. A radiação também é amplamente utilizada em muitos campos, incluindo a medicina, a indústria e a pesquisa científica.

Para entender a radiação, é importante compreender suas propriedades e características. A radiação pode ser descrita em termos de sua energia, frequência, comprimento de onda e outras propriedades físicas. Essas propriedades determinam como a radiação interage com a matéria e como ela pode ser detectada e medida.

A radiação tem vários efeitos biológicos, que variam de acordo com o tipo e a dose de radiação. A radiação ionizante, por exemplo, pode causar danos ao DNA das células, o que pode levar a doenças como câncer e mutações genéticas. É importante limitar a exposição à radiação para minimizar esses efeitos.

A detecção e a medição da radiação são essenciais para avaliar e controlar a

exposição à radiação. Vários tipos de detectores de radiação estão disponíveis, incluindo contadores Geiger-Müller, câmaras de ionização e detectores de cintilação. Esses detectores convertem a energia da radiação em um sinal elétrico que pode ser medido e registrado.

A radiação tem várias aplicações práticas, incluindo a medicina, a indústria e a pesquisa científica. Em medicina, a radiação é utilizada para diagnóstico e tratamento de doenças, como em exames de imagem médica, radioterapia e terapia com isótopos radioativos. Na indústria, a radiação é utilizada para controle de qualidade, inspeção de soldas, esterilização e outros processos. Na pesquisa científica, a radiação é usada para estudar a estrutura da matéria e para criar novos materiais e tecnologias.

Por fim, é importante proteger as pessoas e o meio ambiente contra a exposição excessiva à radiação. Isso pode ser feito através de medidas de proteção, como o uso de equipamentos de proteção individual e coletiva, limitação do tempo de exposição à radiação, e controle da exposição à radiação em locais de trabalho e na comunidade.

2.5.3 Interação com a matéria:

A interação da radiação com a matéria é um processo complexo que envolve uma variedade de fenômenos físicos. A radiação pode interagir com a matéria de diferentes maneiras, dependendo de suas propriedades físicas, tais como a energia, o tipo de partícula e a massa.

Ao interagir com a matéria, a radiação incidente pode também transformar total ou parcialmente sua energia em outro tipo de radiação. Isso ocorre na geração dos raios X de freamento, na produção de pares e na radiação de aniquilação. :[19]

- Radiação de Freamento ("Bremsstrahlung"): Quando partículas carregadas, principalmente elétrons, interagem com o campo elétrico de núcleos ou com a eletrosfera, elas reduzem a energia cinética, mudam de direção e emitem a diferença de energia sob a forma de ondas eletromagnéticas, denominadas de raios X de freamento.
- Produção de pares: Quando fótons de energia superior a 1,022 MeV passam perto de núcleos de elevado número atômico, ao interagir com o forte campo elétrico nuclear, a radiação desaparece e dá origem a um par elétron-pósitron
- Radiação de aniquilação: Quando um pósitron, após perder sua energia cinética, interage com um elétron, a matéria é toda transformada em energia, sendo emitidos dois fótons, em sentidos opostos. Essa radiação é denominada também de radiação gama, embora não seja de origem nuclear.

As diferentes formas de radiação interagem com a matéria de maneiras diferentes. Por exemplo, a radiação alfa, interage com a matéria por ionização, enquanto a radiação gama, que consiste em fótons de alta energia, pode interagir por espalhamento e absorção.

A interação da radiação com a matéria é fundamental para muitas aplicações práticas, como em medicina, indústria e pesquisa científica. Por exemplo, a radiação ionizante é usada em radioterapia para destruir células cancerígenas, enquanto a radiação não ionizante é usada para ondas de rádio, Radiação infravermelha, Radiofrequência/Micro-ondas, etc.

No entanto, a interação da radiação com a matéria também pode ter efeitos negativos, como danos aos tecidos biológicos e mutações genéticas. Por isso, é importante monitorar e controlar a exposição à radiação em todas as aplicações práticas.

2.5.4 Atenuação do feixe de fótons:

A atenuação do feixe de fótons é um fenômeno que ocorre quando a radiação interage com a matéria e perde energia ao atravessá-la. Esse processo é descrito pela lei de Beer-Bouguer-Lambert, que estabelece que a intensidade do feixe de radiação que atravessa um material é reduzida exponencialmente com a distância percorrida através do material.

$$I = I_0 e^{-\mu x} \quad (2.3)$$

Onde:

- I : é a intensidade da radiação após percorrer uma distância x através do material, medida em unidades arbitrárias
- I_0 : é a intensidade da radiação incidente no material, medida em unidades arbitrárias.
- x : é a distância percorrida pela radiação através do material, medida em cm
- μ : é o coeficiente de atenuação linear, medido em cm^{-1}

A atenuação do feixe de fótons depende de diversos fatores, como o tipo de material atravessado, a energia dos fótons, a espessura do material, entre outros. De maneira geral, quanto maior a espessura do material, maior será a atenuação do feixe de fótons.

Existem diferentes mecanismos de atenuação que podem ocorrer, dependendo da energia dos fótons e das propriedades do material. Por exemplo, fótons de baixa energia podem ser absorvidos por átomos do material, enquanto fótons de alta energia podem sofrer espalhamento Compton ou espalhamento Rayleigh.

A atenuação do feixe de fótons é um conceito importante em diversas aplicações práticas, como na radioterapia, onde é essencial garantir que a dose de radiação entregue ao paciente seja controlada e uniforme. Para isso, são utilizados materiais de diferentes densidades e espessuras para atenuar o feixe de radiação de acordo com a necessidade.

A atenuação do feixe de fótons também é utilizada em aplicações de imagem médica, como a radiografia e a tomografia computadorizada, onde a absorção diferencial de fótons pelos diferentes tecidos do corpo humano permite a visualização de estruturas internas.

2.5.5 Detectores de Radiação

Interação de partículas carregadas com a matéria

A detecção de partículas carregadas, como prótons, alfas e íons pesados, ocorre por meio da interação dessas partículas com o meio do detector. Nos casos em que nêutrons não estão envolvidos na detecção, os processos de interação nuclear são insignificantes devido à sua baixa probabilidade. O principal processo envolvido é de colisões íon-átomo, que resulta na transferência de energia do íon para o meio através de processos de ionização e excitação dos elétrons atômicos.

Devido à significativa diferença de massas entre as partículas carregadas e os elétrons do meio, a transferência de energia do íon para os elétrons ocorre em quantidades pequenas, e um grande número de colisões acontece até que o íon seja completamente desacelerado. Quando um íon altamente energético penetra em um material, ele adquire um alto estado de ionização, independentemente de seu estado inicial antes de atingir o meio. À medida que o íon perde velocidade, a probabilidade de captura de elétrons orbitais aumenta, e o íon é gradualmente neutralizado.

Quando a velocidade do íon se torna suficientemente baixa, os processos de ionização e excitação dos átomos no meio tornam-se menos relevantes, e as perdas de energia devido a colisões elásticas com os átomos do meio começam a predominar. Isso resulta em dispersões em ângulos amplos e desvios significativos da trajetória inicialmente reta da partícula são observados.

Os processos de perda de energia por colisões inelásticas com elétrons (freamento eletrônico) e por colisões elásticas átomo-átomo (freamento nuclear) são, em essência, independentes um do outro. Portanto, a taxa de perda de energia por unidade de comprimento pode ser expressa como a soma das contribuições desses dois processos.

$$-\frac{dE}{dx} = S_e(v) + S_n(v) \quad (2.4)$$

Apesar de os mecanismos de freamento serem amplamente conhecidos e estu-

dados desde o início do século, ainda não existem previsões teóricas quantitativas precisas para o fenômeno conhecido como freamento eletrônico. As previsões para o freamento eletrônico são, portanto, baseadas em modelos semiempíricos, fundamentados em um grande número de medidas experimentais. Uma das parametrizações mais reconhecidas para o freamento eletrônico em uma ampla faixa de velocidades e para qualquer combinação de números atômicos Z_{ion} e Z_{meio} é aquela desenvolvida por Ziegler-Biersack-Littmark[20]. Esses autores também formularam de maneira precisa o freamento nuclear ao obterem o potencial médio (Coulombiano blindado) de interação para diversos pares de íons. Na Figura 2.6, podem ser observadas curvas típicas de freamento eletrônico para vários íons em alumínio, apresentadas como função de E/A (energia/massa atômica) do íon. Uma revisão detalhada dos desafios associados aos mecanismos de freamento pode ser encontrada na referência [20].

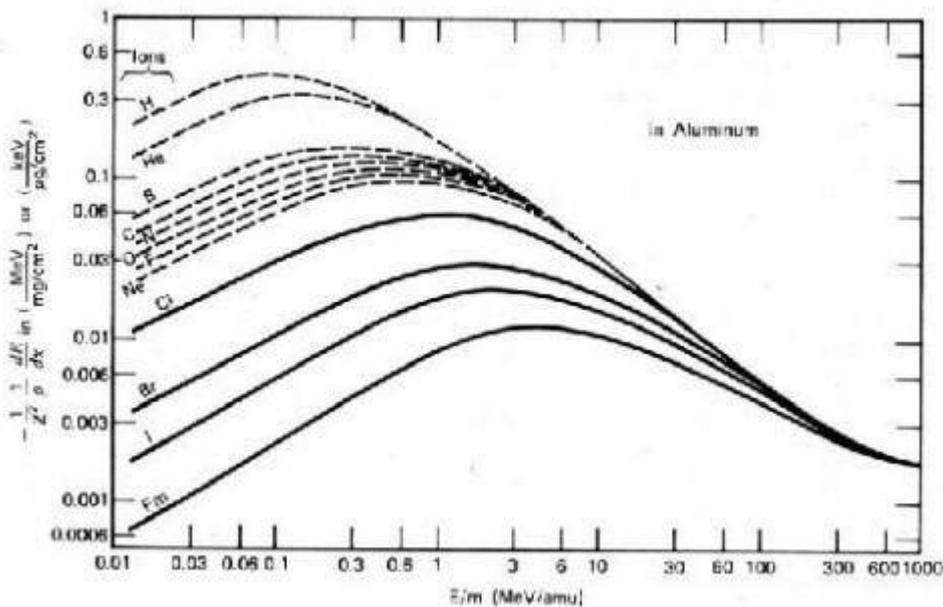


Figura 2.11: Poder de Freamento de Alumínio para vários íons

Interação de fótons com a matéria

Raios gama interagem com a matéria por meio de três mecanismos principais:

- absorção fotoelétrica
- espalhamento Compton
- produção de pares

Todos esses processos resultam na transferência, total ou parcial, da energia do fóton para um elétron. Em contraste com as interações de partículas carregadas,

essas interações são abruptas, e toda a energia é transferida para o elétron no caso da absorção fotoelétrica e da produção de pares. No espalhamento Compton, embora apenas uma fração da energia seja transferida, ocorre uma mudança significativa no momento (direção) e na energia do fóton.

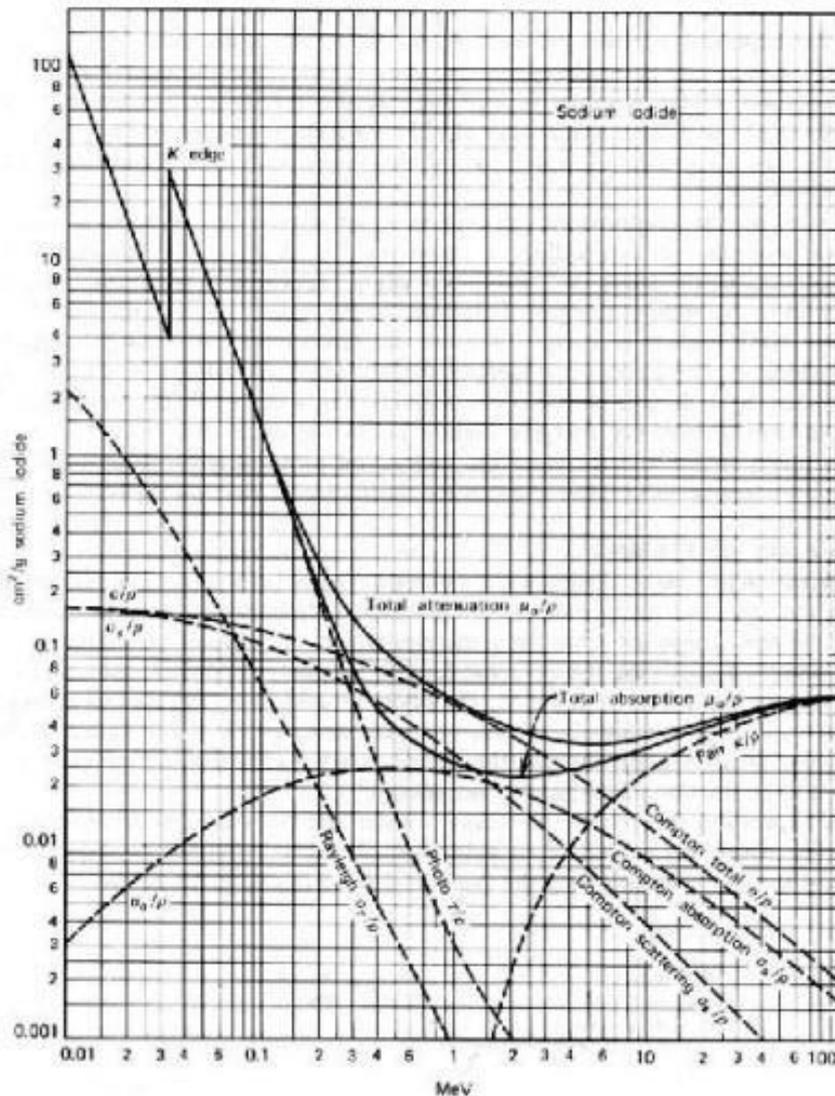


Figura 2.12: Coeficiente de Absorção para um cristal de NaI

A dependência desses processos de interação com o iodeto de sódio (NaI) em relação à energia pode ser observada na Figura 2.7[20]. No NaI, o processo fotoelétrico domina até quase 1 MeV, sendo essa faixa crucial para as aplicações que serão discutidas. Uma vez que, no caso do efeito fotoelétrico, toda a energia do fóton é transferida para o meio, esse mecanismo torna-se fundamental em detectores de energia de fótons. Por outro lado, na interação por espalhamento Compton, apenas parte da energia é transferida para o meio, e o fóton espalhado pode deixar o detector. Esse processo resulta em um fundo indesejável em detectores de

energia. A probabilidade de interação por efeito fotoelétrico em comparação como espalhamento Compton aumenta com o aumento do número atômico do meio de interação. Portanto, há um interesse particular, como veremos mais adiante, em materiais detectores com alto número atômico, como o iodeto de sódio ilustrado na Figura 2.7.

Detectores Semicondutores

Detectores semicondutores, também conhecidos como detectores de estado sólido, surgiram na década de 60 para detecção tanto de partículas carregadas quanto de raios gama. A notável inovação introduzida por esses detectores reside na alta resolução em energia, significativamente superior à dos detectores a gás e cintiladores. Especificamente no caso de detectores de raios gama, onde resoluções típicas alcançam cerca de 0.1%, em comparação com os 6-8% dos cintiladores, a adoção dos detectores de germânio marcou uma nova era na espectroscopia nuclear. Essa tecnologia permitiu a determinação precisa de níveis de energia, resolvendo espectros extremamente complexos.

Em sólidos cristalinos, as ligações periódicas entre os elementos da rede estabelecem bandas de energia para os elétrons de ligação. Nos isolantes e semicondutores, a banda de valência está totalmente preenchida, enquanto a banda de condução é separada pela faixa de energia proibida (gap), onde não existem estados permitidos. Elétrons na banda de condução exibem alta mobilidade e podem ser utilizados na condução elétrica, conferindo a essa banda o nome apropriado. Na temperatura zero, todos os elétrons disponíveis estão localizados na banda de valência, e semicondutores e isolantes não apresentam elétrons para condução elétrica. Em semicondutores, a faixa de energia proibida é relativamente pequena (aproximadamente 1 eV), permitindo uma condução razoável à temperatura ambiente, quando elétrons são termicamente excitados para a banda de condução. Na banda de valência, lacunas, também chamadas buracos, podem se transferir entre as posições do cristal, contribuindo para a condução elétrica. Elétrons na banda de condução são denominados portadores de carga negativos, enquanto buracos na banda de valência são portadores de carga positivos.

Cada elétron promovido para a banda de condução gera uma lacuna. Como será abordado posteriormente, em detectores semicondutores, o par elétron-buraco desempenha um papel análogo ao par elétron-íon em detectores a gás. A probabilidade de termicamente produzir um par elétron-buraco é expressa por:

$$p(T) = C \cdot T^{3/2} \cdot \exp \left(- \frac{E_g}{2kT} \right) \quad (2.5)$$

onde T é a temperatura absoluta, Eg a energia do gap, k a constante de Boltzmann e C uma constante característica do material.

A taxa de deslocamento (drift) dos elétrons e buracos dentro de um semicondutor é diretamente influenciada pelo campo elétrico aplicado, mantendo-se proporcional para valores moderados e saturando conforme o campo elétrico aumenta. É importante observar que a constante de proporcionalidade (μ - mobilidade) dos elétrons é ligeiramente superior à dos buracos, ao contrário do cenário envolvendo elétrons em um gás, onde a mobilidade dos íons é consideravelmente menor que a dos elétrons. Detalhes sobre os dois semicondutores mais comumente empregados em detectores podem ser encontrados na Tabela 2.1

Semicondutores puros (intrínsecos) são praticamente inexistentes na realidade devido à presença inevitável de contaminantes, que modificam o equilíbrio entre portadores negativos e positivos. A introdução desses contaminantes classifica o semicondutor como tipo n (com excesso de portadores negativos) ou tipo p (com excesso de portadores positivos), dependendo da natureza dos contaminantes. É crucial destacar que, apesar do excesso de um tipo de portador, esses semicondutores permanecem eletricamente neutros. Tanto em dispositivos eletrônicos quanto em detectores, a concentração de impurezas é determinada durante o crescimento do cristal, por meio da adição de dopantes

Característica	Si	Ge
Número atômico	14	32
Peso atômico	28.09	72.60
Isótopos estáveis	28-29-30	70-72-73-74-76
Densidade - g/cm ³	2.33	5.32
Átomos/cm ³	4.96×10^{22}	4.41×10^{22}
Constante dielétrica (300K)	12	16
Largura do gap - eV	1.115	0.665
Densidade de portadores intrínsecos	1.5×10^{10}	2.4×10^{13}
Resistividade intrínseca (300K) - $\Omega \cdot \text{cm}$	2.3×10^5	47
Mobilidade eletrônica (300K) - $\text{cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$	1350	3900
Mobilidade dos buracos (300K) - $\text{cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$	480	1900
Mobilidade eletrônica (77K) - $\text{cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$	2.1×10^4	3.6×10^4
Mobilidade dos buracos (77K) - $\text{cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$	1.1×10^4	4.2×10^4
Energia por par elétron-buraco (330K) - eV	3.62	
Energia por par elétron-buraco (77K) - eV	3.76	2.96
Fator de Fano (77K)	0.085-0.16	0.06-0.13

Tabela 2.1: Características do Silício (Si) e Germânio (Ge)

Capítulo 3

Revisão Bibliográfica

Lopes *et al.*[4] comparou os valores simulados e experimentais dos fatores de correção para autoabsorção, essencial para corrigir a eficiência de amostras cuja densidade difere do padrão. Utilizaram do LabSOCS para calcular o fator de autoabsorção para algumas diferentes geometrias, onde obtiveram valores que diferenciam menos de 1,6% dos valores experimentais e obtidos por código MCNPX, demonstrando o quão precisas são as simulações por esses métodos. O MCNPX é um dos códigos mais utilizados para simular o espectro de radiação gama (Dziri et al., 2014). Neste trabalho, o código MCNPX foi utilizado para modelar um detector que será mostrado no capítulo 4.

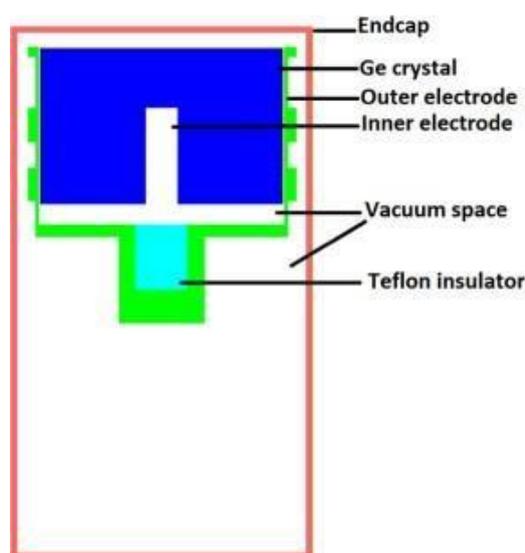


Figura 3.1: Visualização do detector HPGe simulado

Tabela 3.1: Dimensões do detector simulado

Parâmetros	
Tipo	n
Modelo	3020
Tensão	4500V
Diâmetro do cristal	62 mm
Comprimento do cristal	40 mm
Front layer dead (camada frontal inativa)	0.36 mm
Side dead layer (camada lateral inativa)	0.36 mm
Diâmetro da tampa	76 mm
Comprimento da tampa	135 mm
Grossura da tampa	1.5 mm

Nikolov *et al.*[21] empregou dois códigos, o *Angle*, que tem uma abordagem semi-empírica e o LabSOCS, puramente matemático, elaborando um estudo comparativo de ambos para calibração de eficiência de detectores HPGe. Ambos os códigos foram testados em amostras como valores de referência desconhecidos e diferentes geometrias. Concluiu-se que ambos os códigos tiveram resultados satisfatórios e suficientemente parecidos para as diferentes condições, como ordens de precisão de até 10%.

Cheng *et al.* [22], em seu artigo para a **Journal of Environmental Radioactivity**, cita que a reutilização benéfica e recuperação de recursos da água produzida frequentemente exigem tratamento para remover o rádio antes que produtos valiosos sejam extraídos. O teor de rádio dos sólidos residuais do tratamento e dos produtos benéficos deve ser determinado com precisão ao avaliar a eficácia e validade social de tais tratamentos. Embora a espectroscopia gama continue sendo o método recomendado para medições de rádio, essas medições podem ser impactadas pela composição/mineralogia dos sólidos, que influenciam a atenuação da energia de decaimento gama. Para atender às necessidades da indústria, as medições devem ser tanto precisas quanto rápidas, mesmo para tamanhos de amostra pequenos. Concluiu que a densidade da amostra e a distribuição da amostra impactam significativamente na eficiência de detecção do rádio.

Cooper[23], elaborou um relatório técnico sobre os NORMs na indústria australiana, onde ressalta que níveis elevados de radionuclídeos naturalmente presentes podem estar associados a certos materiais naturais, minerais e outros recursos. A exploração desses recursos e a produção de itens de consumo podem resultar em um aumento adicional da radioatividade nos produtos, subprodutos, resíduos ou rejeitos decorrentes do processo industrial. Um resultado potencial é um aumento nas expo-

sições ocupacionais e públicas à radiação. Esta área é de particular importância na Austrália devido às principais atividades de mineração e processamento mineral, e à produção em larga escala e uso de combustíveis fósseis no país. Na indústria da mineração e extração de forma geral, existe um cuidado e atenção internacional para o tratamento e classificação corretos de rejeitos radioativos, reforçando o dito por Cheng[22], há necessidade de medições rápidas e precisas.

Barrera[24] desenvolve uma metodologia para determinar a eficiência total do pico de energia (FEPE) em medições precisas de espectrometria gama em amostras ambientais usando detectores de germânio de alta pureza (HPGe). A metodologia envolve uma calibração inicial em função de E e H, bem como a aplicação de um fator de autoatenuação, dependente da densidade da amostra, para corrigir as diferentes atenuações da amostra genérica em relação ao padrão medido.

Venturi[25] calculou as correções de autoabsorção necessárias para serem aplicadas na espectrometria gama de amostras ambientais, abrangendo densidades na faixa de 0,42 g/mL a 1,59 g/mL. Essas correções foram determinadas quando a curva de eficiência foi experimentalmente estabelecida para uma amostra de água, considerando a mesma geometria de medição que a amostra em questão. Foram empregadas duas geometrias de medição distintas: um frasco Marinelli de 1 litro contendo 850 ml de amostra e um frasco de polietileno de 100 ml. A correção do ângulo sólido foi obtida por meio de integração numérica, utilizando o modelo de Debertin para o frasco Marinelli, enquanto os coeficientes de atenuação linear das amostras foram determinados experimentalmente.

Pinheiro[16], na sua tese de doutorado, analisa e propõe soluções a dois problemas complexos da área nuclear, Problema de Identificação de Acidentes Nucleares (PIAN) e o Problema de Inferência de Temperaturas (PIT). Os sistemas elaborados para solução destes problemas tiveram como núcleo o paradigma de Redes Neurais Profundas (RNPs) – sozinhas ou acopladas a outras técnicas de aprendizado de máquina e estatística.

Capítulo 4

Método Proposto

Seguindo a metodologia explicada anteriormente, foi estruturada uma base de dados para treinar uma rede neural(RNA) capaz de calcular a eficiência da detecção de atividade em béqueres em função de suas dimensões, energia dos radionuclídeos e do número de compartimentos conforme mostrada na Tabela 3.1.

Tabela 4.1: Parâmetros de entrada

Energias	Diâmetro	Altura	Nº de divisões
238,6 KeV - Pb-212	5 cm	5 cm	Sem Divisões (Peça Única)
295,2 KeV - Pb-214	7 cm	7 cm	1 (Duas Peças)
351,9 KeV - Pb-214	9 cm	9 cm	2 (Três Peças)
583,2 KeV - Tl-208	11 cm	11 cm	3 (Quatro Peças)
609,3 KeV - Bi-214	13 cm	13 cm	4 (Cinco Peças)
911,2 KeV - Ac-228	15 cm	15 cm	
969,0 KeV - Ac-228			
1120,3 KeV - Bi-214			
1460,8 KeV - K-40			
1764,5 KeV - Bi-214			

Dessa forma, como o aprendizado da rede é dado da forma supervisionado, a rede será alimentada com valores de entrada para cada combinação de elementos de cada coluna da Tab.4.1, e com os valores de saídas que forem resultado da simulação de cada. Para o desenvolvimento da RNA, é necessário que, dentro dessa base de dados, uma parcela dos dados seja considerada como o subconjunto de treinamento e o restante como subconjunto de teste, conforme explicado no item 2.3.5.

Para o treinamento e implementação da RNA, utilizaremos o programa *NeuroShell* como uma peça central em nossa metodologia.O *NeuroShell* se destaca no campo

da inteligência artificial devido à sua interface intuitiva e à ampla variedade de algoritmos de treinamento que oferece. Sua capacidade de lidar com complexidade e diversidade nos conjuntos de dados é particularmente valiosa para este estudo, onde buscamos extrair padrões intrínsecos e realizar análises preditivas em problemas complexos da engenharia nuclear. A escolha do NeuroShell como nossa principal plataforma de desenvolvimento não apenas facilitará o processo de treinamento das RNAs, mas também proporcionará uma exploração abrangente das diferentes arquiteturas neurais disponíveis. Isso assegurará que nossos modelos sejam adaptativos e precisos, atendendo às demandas específicas dos desafios abordados nesta pesquisa.

Os béqueres descritos na Tab.4.1, que diferem em dimensão (colunas 2 e 3) ou número de divisões (coluna 4), são delimitados por uma porção inferior, uma porção superior, alternativamente contendo uma tampa, e uma porção lateral, configurando um volume que é dividido em uma pluralidade de volumes menores por meio de camadas horizontais. Essas camadas são formadas por uma pluralidade de módulos empilhados que se acoplam entre si, como no exemplo da Figura 4.1.

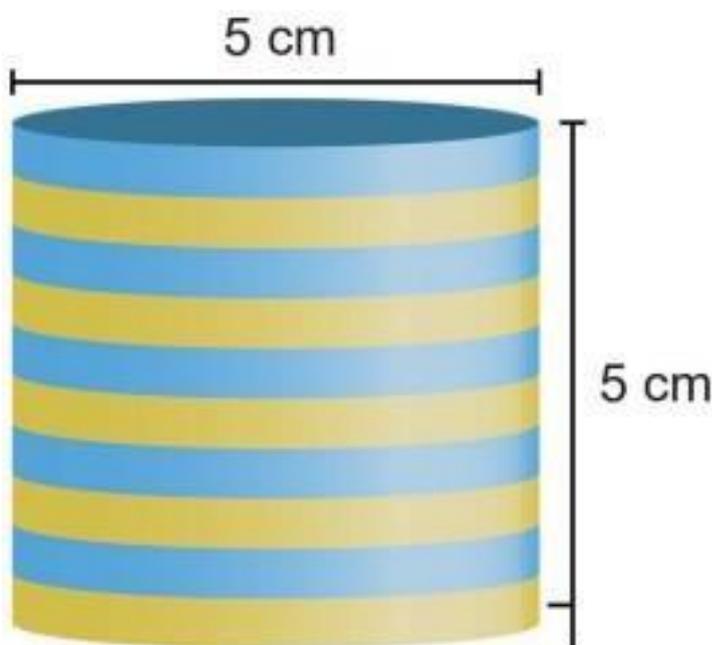


Figura 4.1: Desenho esquemático didático de um béquer de 4 divisões com raio da base de 5cm e altura 5cm.

A figura 4.2 mostra o comportamento de uma amostra homogênea em um corte longitudinal de um béquer comum. A figura 4.3 mostra o comportamento de uma amostra bifásica em um béquer, com a maioria dos radionuclídeos no fundo do porta amostras, ou seja, após a decantação.

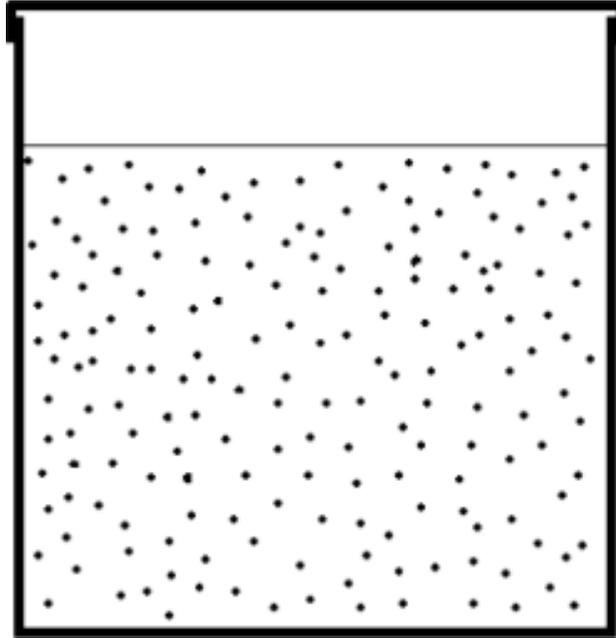


Figura 4.2: Amostra homogênea em corte longitudinal[3]

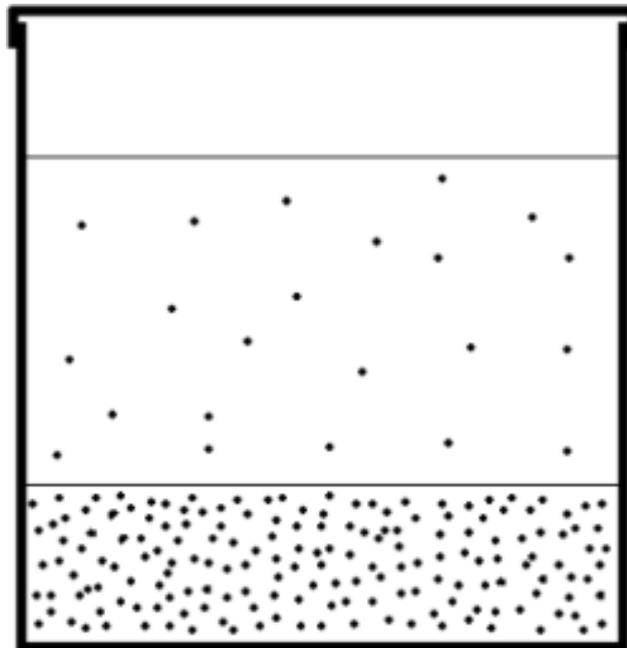


Figura 4.3: Amostra homogênea em corte longitudinal [3]

A figura 4.4 mostra a solução em um béquer compartimentado, como o descrito na figura 4.1.

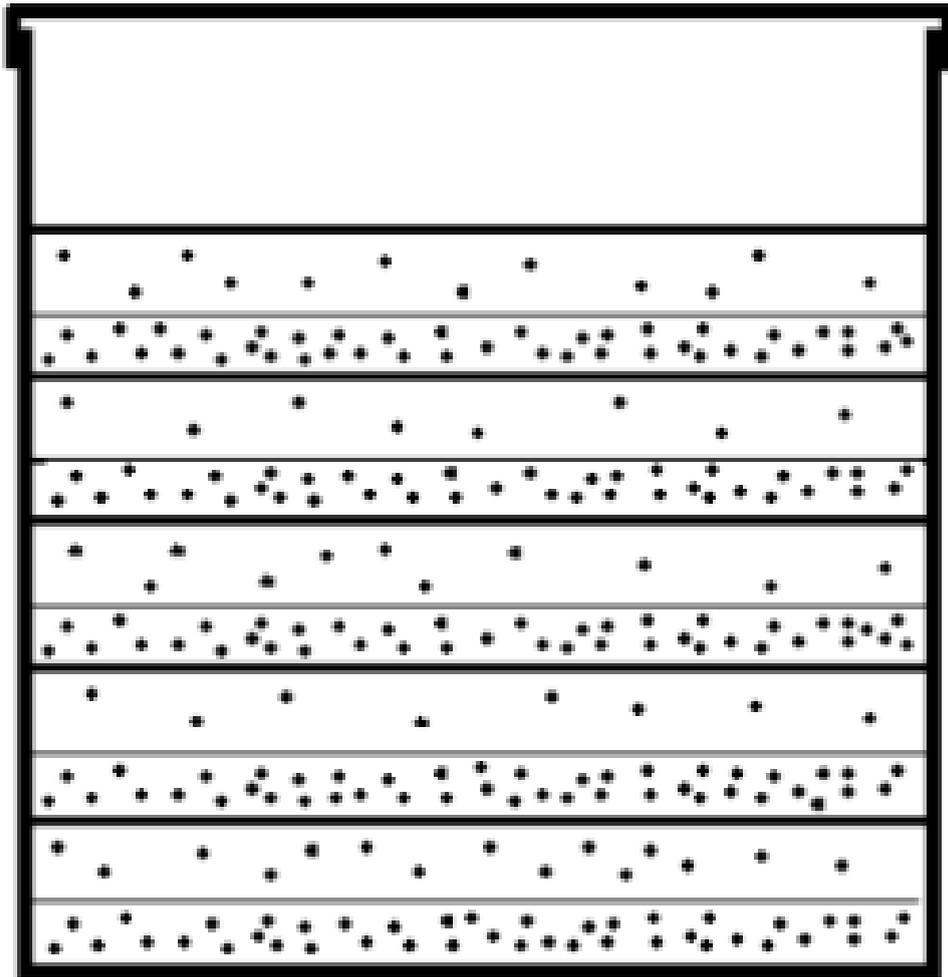


Figura 4.4: Amostra Heterogênea em corte longitudinal, com 5 divisões [3]

A figura 4.5 e 4.6 mostram as vistas em perspectivas superior e inferior, respectivamente, a construção desse béquer compartimentado.

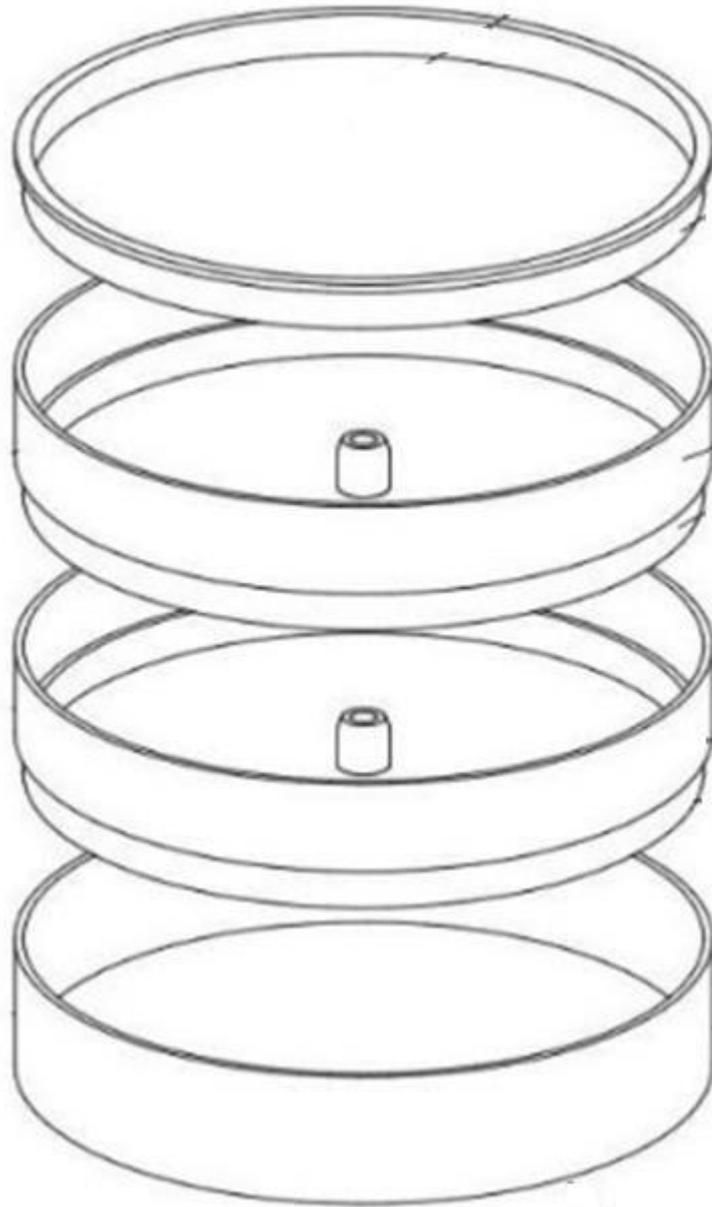


Figura 4.5: Vistas em perspectivas superior[3]

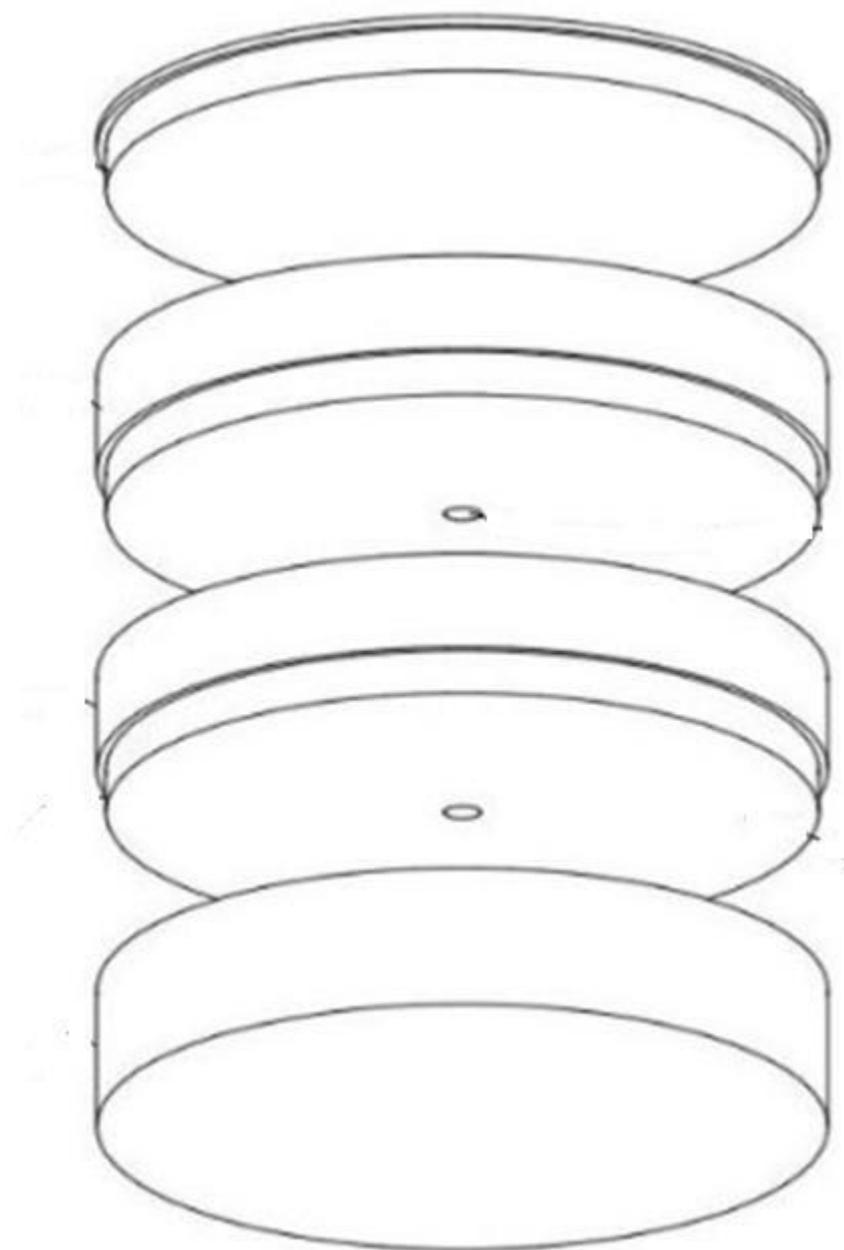


Figura 4.6: Vistas em perspectivas inferior[3]

A figura 4.7 e 4.8 mostram as vistas em perspectivas superior e inferior do béquer montado.

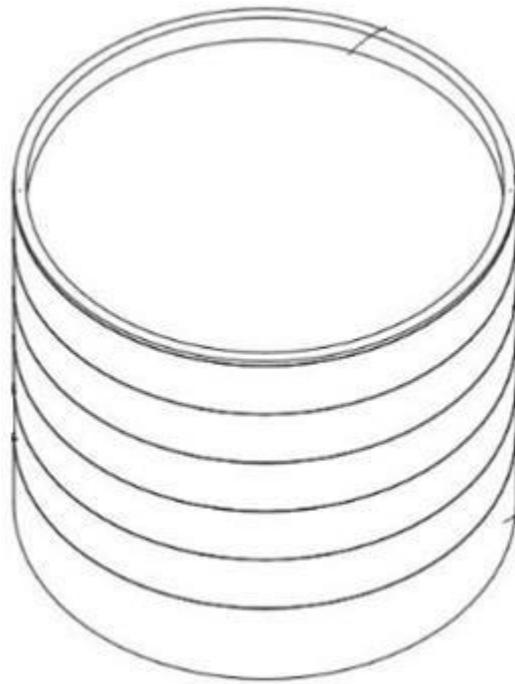


Figura 4.7: Vista em perspectivas superior béquer montado idem[3]

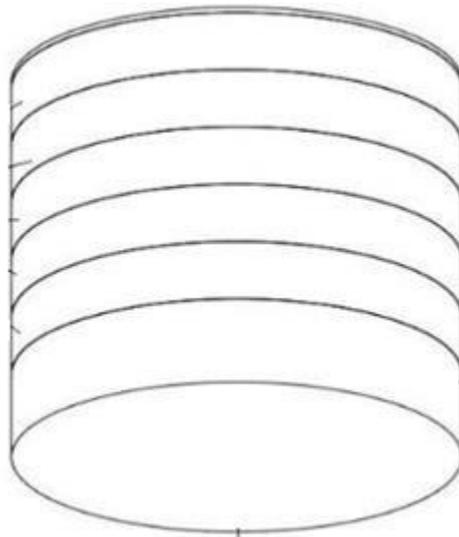


Figura 4.8: Vistas em perspectivas inferior do béquer montado idem[3]

Numa primeira etapa do desenvolvimento dessa rede neural, e para justificar a importância e relevância desse método para análise de amostras heterogêneas, os dados foram obtidos considerando amostras de uma mistura de 50% água e 50% areia, nos quais foram apurados os radionuclídeos listados na primeira coluna da Tab 4.1.

Todas as medições foram feitas mantendo um nível de confiabilidade menor que 5%, ou seja, menos de 5% das simulações, se repetidas, teriam valores diferentes dos simulados. Essas simulações geram um "Fator de ajuste das medições", que seria um valor capaz de interpretar o quanto a decantação afetou a medição, e multiplicando os valores medidos pelo fator supracitado, temos do que seria a medição caso a distribuição fosse homogênea.

Capítulo 5

Resultados e Discussões

5.1 Análise da Eficiência em função dos parâmetros de entrada em soluções homogêneas

É esperado que para energias mais altas quanto mais energético o fotopico do radionuclídeo, menor a eficiência dos detectores. Em recipientes cilíndricos de diversas dimensões, considerando homogênea tanto a amostra quanto a distribuição dos radionuclídeos nela presentes, obtemos os gráficos das Fig.5.1, Fig.5.2, Fig.5.3 e Fig.5.4, as dimensões referem-se respectivamente ao diâmetro e a altura do béquer. Observa-se que, apesar da relação inversamente proporcional esperada, não existe uma linearidade na função em função da energia, da altura ou do diâmetro.

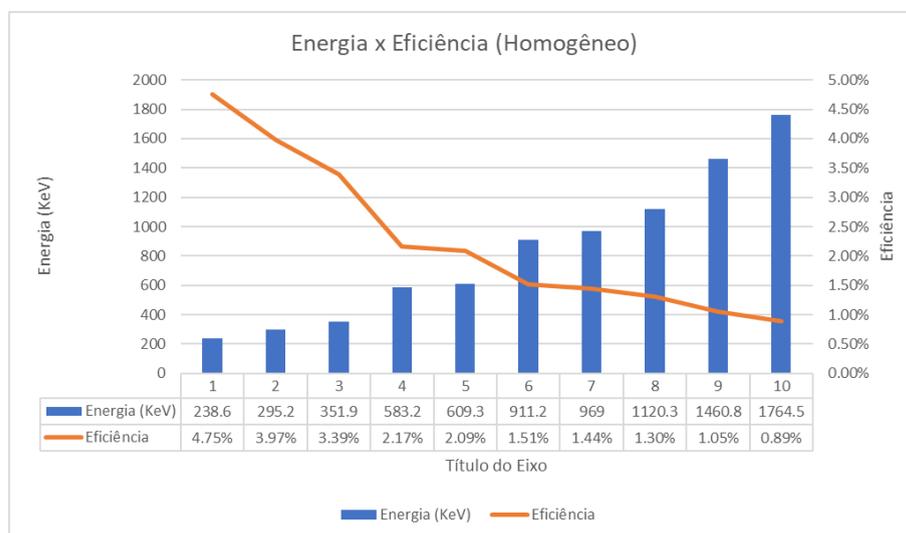


Figura 5.1: Gráfico de Energia por Eficiência em uma amostra homogênea em um béquer de 5 cm por 5 cm

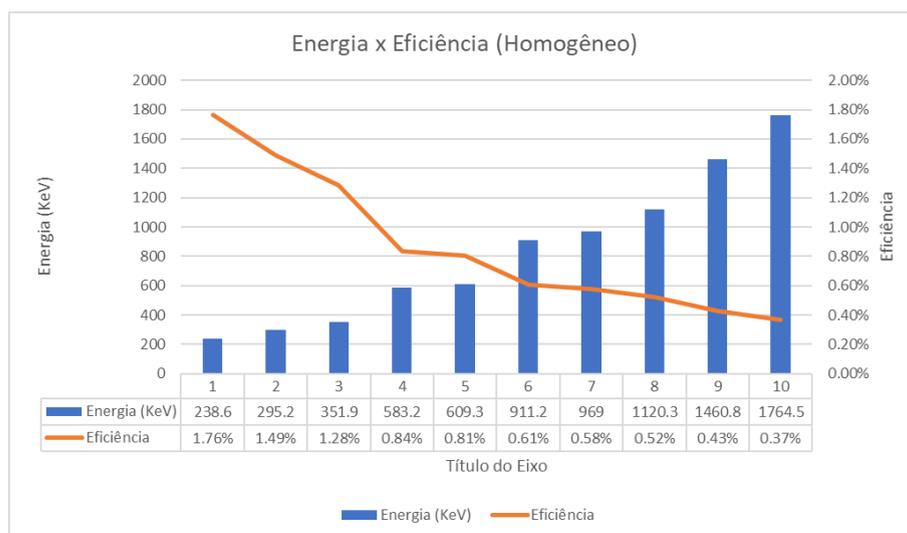


Figura 5.2: Gráfico de Energia por Eficiência em uma amostra homogênea em um bquer de 5 cm por 15 cm

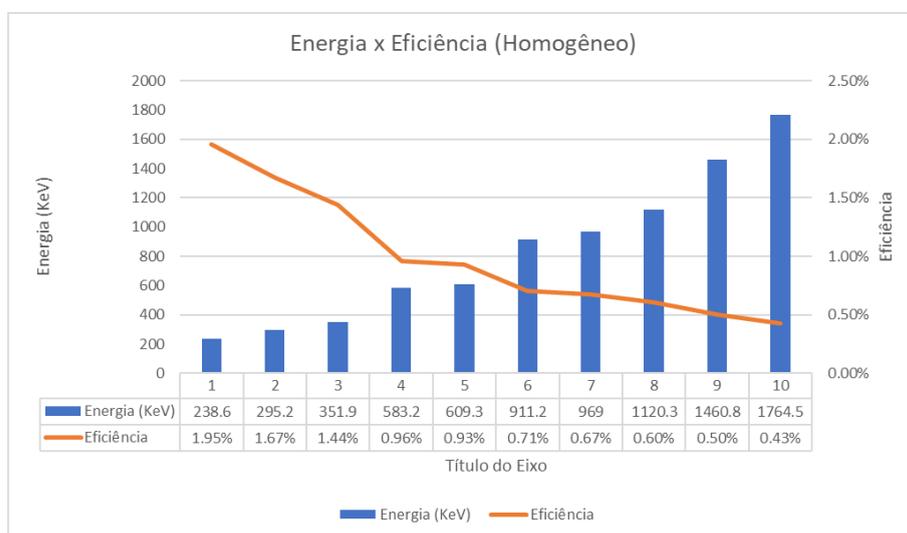


Figura 5.3: Gráfico de Energia por Eficiência em uma amostra homogênea em um bquer de 15 cm por 5 cm

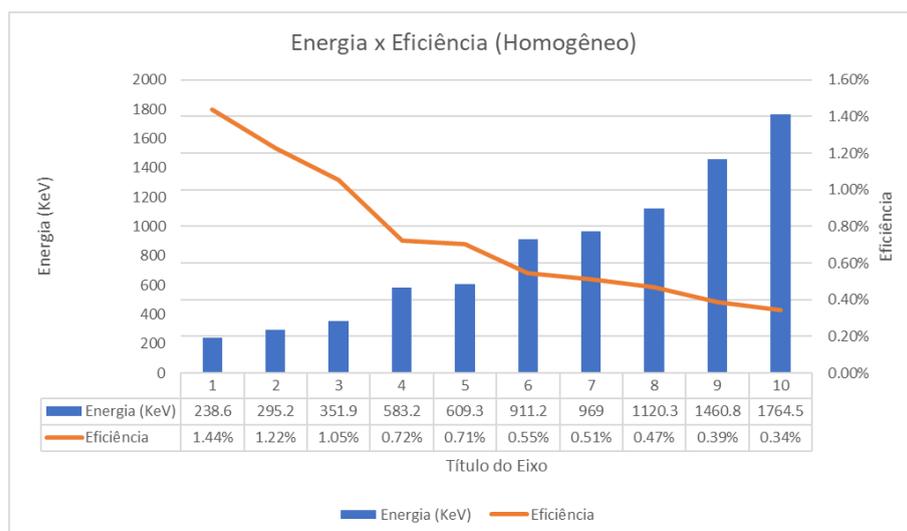


Figura 5.4: Gráfico de Energia por Eficiência em uma amostra homogênea em um béquer de 13 cm por 9 cm

Apesar do comportamento previsível das eficiências da detecção em função dos parâmetros alterados, não existe proporcionalidade nessa relação, ou seja, não conseguimos descrever por meio de uma equação simples o peso de cada variável na relação, e portanto a RNA, como citada sendo um aproximador universal de funções, pode ser empregadas para trazer precisão nessa previsibilidade.

5.2 Análise da Eficiência em função dos parâmetros de entrada em soluções heterogêneas

Na medida que aumentamos o número de compartimentos que o béquer possui, a distribuição dos radionuclídeos da amostra se aproxima de uma distribuição homogênea, com isso aumentamos a precisão da eficiência calculada, tomando como referência a amostra homogênea (ou seja, antes da decantação). As figuras a seguir mostram essas análises para 4 radionuclídeos, em béqueres compartimentados de dimensões fixas (5 cm de diâmetro por 5 cm de altura) e, como esperado, o aumento do número de compartimentos aproxima a eficiência do referencial homogêneo, ainda que a decantação já tenha influenciado a distribuição

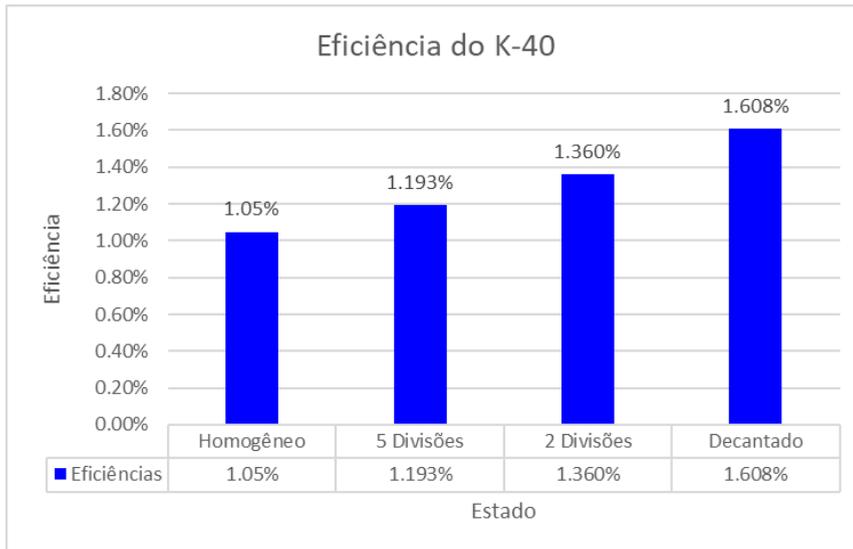


Figura 5.5: Eficiências do K-40 no bquer de 5x5 cm com diferentes números de divisões.

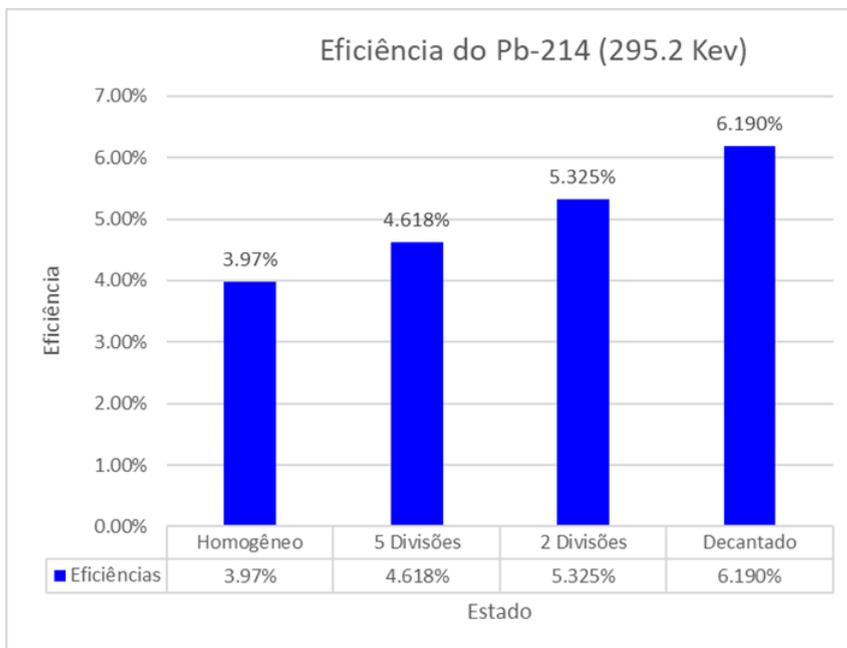


Figura 5.6: Eficiências do Pb-214(295.2KeV) nos diferentes béqueres

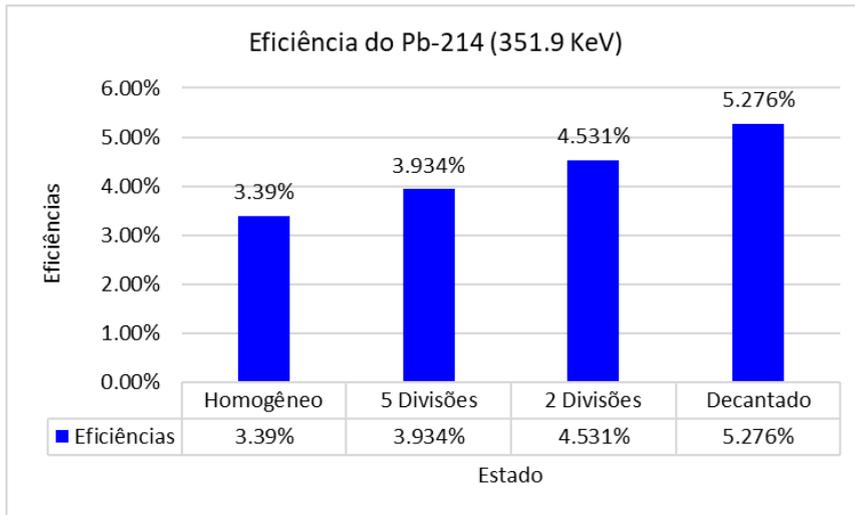


Figura 5.7: Eficiências do Pb-214(351.9KeV) nos diferentes béqueres

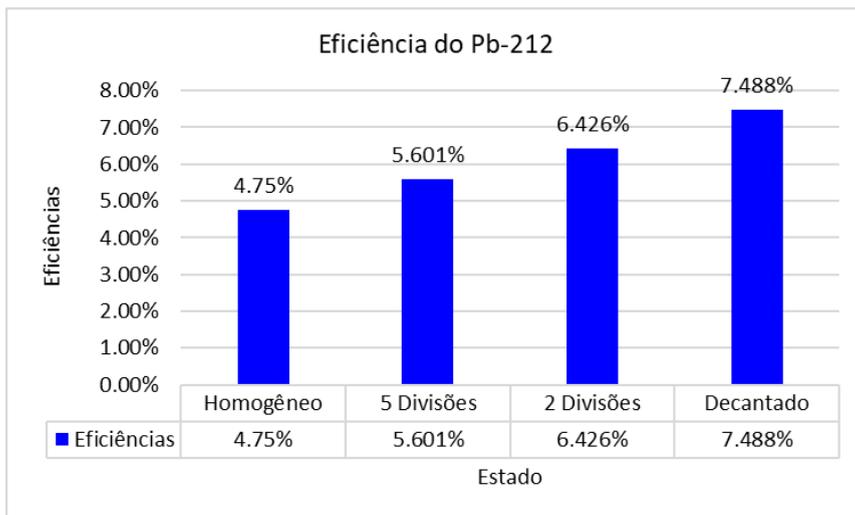


Figura 5.8: Eficiências do Pb-212 nos diferentes béqueres

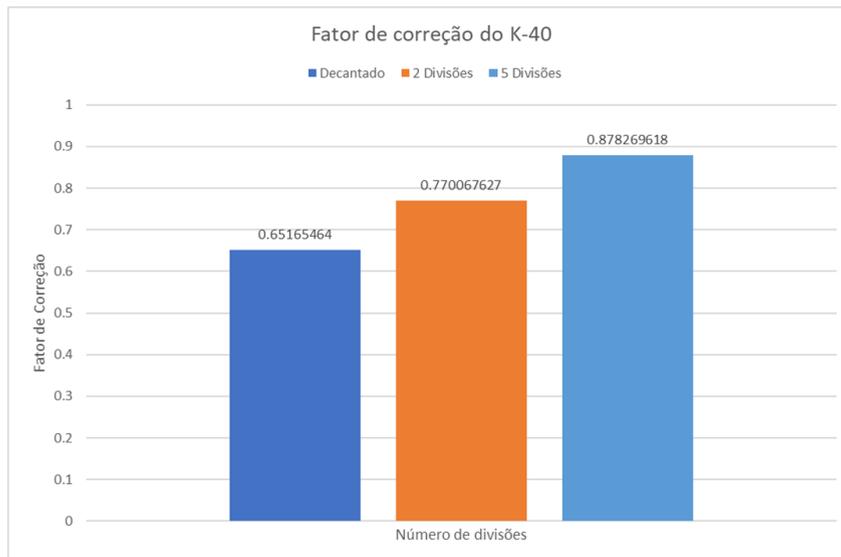


Figura 5.9: Fatores de correção para o K-40 em um béquer compartimentado

O gráfico da figura 5.9 mostra o fator de correção da "falsa melhor eficiência" para o caso do potássio, cujas eficiências em função do número de compartimentos estão demonstrados na figura 5.5. Podemos concluir com ambas as figuras que, uma vez ocorrida a decantação na amostra, a eficiência precisa de um fator de correção de 0,65165464 para que os valores da amostra decantado reflita o valor de uma distribuição normal. Entretanto, usando um béquer compartimentado com 5 divisões de fase, precisando de um fator de correção de 0,878269618, mais próxima de 1 que o valor anterior e, portanto, mostrando a melhora significativa na precisão que a divisão do béquer compartimentado pode trazer.

O fator de correção foi calculado sendo a razão do valor teórico esperado dividido pelo valor encontrado, ou seja, o valor de correção abaixo de 1 mostra que a eficiência da medição está acima do referencial teórico, referida como "falsa melhor eficiência", e valores acima de 1, dependendo da geometria do medidor usado, seriam medições ineficientes, dado a heterogeneidade da amostra.

Capítulo 6

Conclusões e Perspectivas Futuras

A decantação, um fenômeno intrínseco e inescapável em amostras heterogêneas após prolongado armazenamento, foi minuciosamente investigada nesta dissertação quanto ao seu impacto na eficiência de detecção de radionuclídeos. Diante desse contexto, a necessidade imperativa de desenvolver métodos capazes de quantificar o efeito da decantação sobre as medições torna-se evidente. Além disso, a validação da relevância de recipientes compartimentados foi estabelecida como uma estratégia eficaz para aproximar a distribuição da amostra a um estado homogêneo, minimizando erros na determinação da eficiência do detector.

A precisa aferição dessa eficiência é de extrema importância para a indústria de petróleo e gás e para a preservação ambiental, especialmente na determinação adequada do status de rejeito radioativo. A relação não linear entre as dimensões do recipiente, número de fases, energia e eficiência reforça a necessidade de um instrumento, como uma RNA, capaz de calcular discrepâncias na "falsa melhor eficiência". Adicionalmente, uma RNA hábil em calcular a eficiência para diversas amostras pode ser fundamental na calibração do detector, fornecendo resultados esperados para cada amostra.

Assim, os resultados encontrados neste trabalho nos permitem concluir que a implementação da metodologia do uso de redes neurais artificiais para a obtenção de um valor de correção é viável. Uma vez que, com uma base de dados suficientemente robusta, a rede consegue obter resultados de eficiência aceitáveis aos casos que não inicialmente apresentados a ela.

Prosseguindo, sugere-se a expansão da base de dados para incluir novas geometrias, detectores e dimensões, juntamente com a validação empírica das simulações e uma análise comparativa entre valores experimentais e os calculados pela RNA, consolidando assim sua precisão. Essas perspectivas delineiam caminhos para futuras

investigações e refinamentos neste campo de estudo.

Capítulo 7

Anexos

Segue exemplo de um dos cartões, utilizado para as simulações com distribuição homogênea:

CARTÕES DE CÉLULAS

Detector de Germânio

- 2 -5.323 (9 -26 64 -63):(-26 27 -64) IMP:P,E=1
- 3 -2.6989 (53 -54 -3 10):(54 -55 -3 4):(54 -55 6 -5):(54 -55 8 -7): & (51 -54 11 -10):(51 -52 12 -11):(-52 13 -12) IMP:P,E=1
- 4 -2.25 -51 12 -10 IMP:P,E=1
- 0 -3 10 -53 #1 #13 #14 IMP:P,E=1
- 0 -2 14 -56 #1 #2 #3 #4 #13 #14 IMP:P,E=1
- 6 3 -2.6989 (-1 2 -57):(14 -2 56 -57):(15 -14 -57) IMP:P,E=1 inner electrode, outer electrode e window electrode - região inativa
- 13 2 -5.323 (9 -5 -64 50):(5 -27 -64) IMP:P,E=1
- 14 2 -5.323 (9 -26 63 -53):(26 -3 -53) IMP:P,E=1 limite do sistema considerado
- 71 1 -0.000124 -100 #1 #2 #3 #4 #5 #6 #13 #14 #90 #91 IMP:P,E=1
- 72 0 100 IMP:P,E=0 béquer
- 90 5 -1.06 81 -80 imp:p,e=1
- 91 6 -1.35 -81 imp:p,e=1

Referências Bibliográficas

- [1] UMISEDO, N.K. *Dose de radiação ionizante decorrente do uso de fertilizantes agrícolas*. Tese de Doutorado, Programa de Pós Graduação em Saúde Pública, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2007.
- [2] DESCONHECIDO, A. “Ilustração de neurônios conectados mostrando a transmissão de informações”. Ano Desconhecido. Disponível em: https://www.researchgate.net/figure/FIGURA-5-Ilustracao-de-neuronios-conectados-mostrando-a-transmissao-de-inf-fig3_322966599. [acessado em 31 Mar, 2024].
- [3] ROGÉRIO DE ANDRADE FILGUEIRAS, J. M. L. “BÉQUER PARA MEDIDAS DE ATIVIDADE POR MEIO DE ESPECTROMETRIA GAMA DE AMOSTRAS HETEROGÊNEAS E MÉTODO DE PREPARAÇÃO DAS DITAS AMOSTRAS”. 11 2020. Notas adicionais, se aplicável.
- [4] LOPES, J. M., MELQUIADES, F. L., SILVA, A. X., et al. “Comparison of simulated and experimental values of self-absorption correction factors for a fast and credible adjust in efficiency curve of gamma spectroscopy”. 2018.
- [5] STANIĆ, G., BARISIC, D., COHA, I., et al. “LabSOCS for HPGe efficiency calibration”, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, v. 920, pp. 81–87, 2019. ISSN: 0168-9002.
- [6] GUEDES, K. A. N. “Simulação por meio do código MCNPX de tomografia gama e validação com dados experimentais”. 2016.
- [7] BOSHKOVA, T., MINEV, L. “Corrections for self-attenuation in gamma-ray spectrometry of bulk samples”, *Applied radiation and isotopes : including data, instrumentation and methods for use in agriculture, industry and medicine*, v. 54, pp. 777–83, 06 2001. doi: 10.1016/S0969-8043(00) 00319-5.

- [8] HAYKIN, S. *Neural Networks: A Comprehensive Foundation*. Prentice Hall, 1999.
- [9] GARCIA, M. D. O. *Fundamentos de Metrologia Nuclear e Proteção Radiológica*. 2 ed. Rio de Janeiro, Interciência, 2011.
- [10] SCHENKEL, R. “Detection of radioactivity in samples: challenges and solutions”, *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, v. 320, n. 1, pp. 1–9, 2019.
- [11] ASSAD, F. B. N. “DETERMINAÇÃO DA EFICIÊNCIA DE DETECÇÃO COM MCNPX, POR ESPECTOMETRIA GAMA, COM A UTILIZAÇÃO DE RNA”, *Anais do VI SENCIR*, 2023. doi: 10.29327/VI_SENCIR.567487. Disponível em: <www.even3.com.br/Anais/VI_SENCIR/567487-DETERMINACAO-DA-EFICIENCIA-DE-DETECCAO-COM-MCNPX-POR-ESPECTOMETRIA>
- [12] COMISSÃO NACIONAL DE ENERGIA NUCLEAR. “LICENCIAMENTO DE DEPÓSITOS DE REJEITOS RADIOATIVOS DE BAIXO E MÉDIO NÍVEIS DE RADIAÇÃO”. 2014.
- [13] SOARES, W. A., SANTOS, E. C., LIMA, M. S. “Gerenciamento de rejeitos radioativos na indústria de petróleo”, *Anais do Congresso Brasileiro de Gestão Ambiental*, v. 7, n. 3, pp. 1364–1372, 2016.
- [14] SOUZA, D. D. S., MACHADO, D. T. D. S., CARVALHO, H. W. P. D. “Gerenciamento de rejeitos radioativos na indústria do petróleo”, *Revista Virtual de Química*, v. 9, n. 5, pp. 1893–1903, 2017.
- [15] DOS SANTOS, F. K. M. “Redes neurais artificiais e suas aplicabilidades: modelagem do valor da temperatura máxima na cidade de Castanhal”. 2018.
- [16] PINHEIRO, V. H. C. “Redes neurais de aprendizado profundo aplicadas a problemas complexos da engenharia nuclear”. 2020.
- [17] SILVA, V. H. F. F. “Integração de simulações tomográficas MCNPX através de importação da geometria CFD de fluxo gás-sólido em riser a frio”. 2019.
- [18] MENEZES, A. F., LAULATE, H., JUNIOR, J. P. R., et al. “Generation of Dose Volume Histograms Using Voxel Structure and the Monte Carlo Method in Low Dose Rate Brachytherapy”, *International Journal of Medical Physics, Clinical Engineering and Radiation Oncology*, v. 5, n. 4, pp. 27–36, October 2016.

- [19] TAUHATA, L., SALATI, I. P. A., DI PRINZIO, R., et al. *Radioproteção e Dosimetria: Fundamentos*. 9 ed. Rio de Janeiro, IRD/CNEN, novembro 2013.
- [20] ZIEGLER, J., BIRSACK, J., LITTMARK, U. *the Stopping and Ranges of Ions in Solid*. Pergamon, 1985.
- [21] NIKOLOV, J., OUTROS. “Angle vs. LabSOCS for HPGe efficiency calibration”, *Journal of Environmental Radioactivity*, pp. 81–87, 2019.
- [22] CHENG, Y., OUTROS. “Self-attenuation corrections for radium measurements of oil and gas solids by gamma spectroscopy”, *Journal of Environmental Radioactivity*, p. 211, 2020.
- [23] COOPER, M. B. *Naturally Occurring Radioactive Materials (NORM) in Australian Industries - Review of Current Inventories and Future Generation*. Report ERS-006, Radiation Health and Safety Advisory Council, September 2005. Revision of September 2005.
- [24] BARRERA, M., CASAS-RUIZ, M., ALONSO, J. J., et al. “Precise determination of HPGe detector efficiency for gamma spectrometry measurements of environmental samples with variable geometry and density”, *De Gruyter*, v. 1, n. 62, pp. 47–59, 2017. doi: 10.1515/nuka-2017-0007.
- [25] VENTURINI, L., NISTI, M. B. “CORREÇÃO DE AUTO-ABSORÇÃO NA ESPECTROMETRIA GAMA DE AMOSTRAS AMBIENTAIS”, *Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - IPEN-CNEN/SP*, 2022.