

INSTITUTO DE ENGENHARIA NUCLEAR

VITOR HUGO CARVALHO DE SOUZA

**ABORDAGEM HÍBRIDA MONTE CARLO-REDES NEURAS PROFUNDAS PARA
ESTUDO DA FRAÇÃO VOLUMÉTRICA UTILIZANDO NÊUTRONS**

Rio de Janeiro

2025

**ABORDAGEM HÍBRIDA MONTE CARLO–REDES NEURAIAS PROFUNDAS PARA
ESTUDO DA FRAÇÃO VOLUMÉTRICA UTILIZANDO NÊUTRONS**

Vitor Hugo Carvalho de Souza

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia Nucleares do Instituto de Engenharia Nuclear como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Grau de Mestre em Ciências e Engenharia.

Orientadores: Prof. César Marques Salgado, D.Sc.

Roos Sophia de Freitas de Dam, D.Sc.

Rio de Janeiro

2025

**ABORDAGEM HÍBRIDA MONTE CARLO-REDES NEURAIIS PROFUNDAS PARA
ESTUDO DA FRAÇÃO VOLUMÉTRICA UTILIZANDO NÊUTRONS**

Vitor Hugo Carvalho Souza

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA E TECNOLOGIA NUCLEARES DO
INSTITUTO DE ENGENHARIA NUCLEAR COMO PARTE DOS REQUISITOS
NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIA E
TECNOLOGIA NUCLEARES.

Aprovada por:


Prof. César Marques Salgado, D.Sc.


Roos Sophia de Freitas Dam, D.Sc.


Ademir Xavier da Silva, D.Sc.


Prof. Rogério Chaffin Nunes, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL
DEZEMBRO DE 2025

FICHA CATALOGRÁFICA

SOUZA Souza, Vitor Hugo Carvalho de

Abordagem híbrida Monte Carlo–redes neurais profundas para estudo da fração volumétrica utilizando nêutrons/ Vitor Hugo Carvalho de Souza. – Rio de Janeiro: CNEN/IEN, 2025.

xii, 75f. : il. ; 31 cm.

Orientador: César Marques Salgado.

Dissertação (Mestrado em Ciência e Tecnologia Nucleares) – Instituto de Engenharia Nuclear, PPGIEN, 2025.

1. Escoamento Bifásico. 2. Fração Volumétrica. 3. Espalhamento de Nêutrons. 4. Código MCNP6. 5. Rede Neural Profunda (DNN).

AGRADECIMENTOS

Gostaria de expressar minha profunda gratidão a Deus, à minha família e aos meus orientadores, Prof. César Marques Salgado e Dra. Roos Sophia de Freitas Dam, por acreditarem em mim e por todo o apoio, incentivo e orientação ao longo desta jornada. Agradeço também a todas as pessoas que fizeram parte da minha vida e que, de alguma forma, contribuíram para o meu crescimento pessoal e acadêmico, ajudando-me a manter a resiliência em momentos desafiadores. Espero que esta conquista represente o início de muitas realizações e bons frutos para meu futuro.

RESUMO

O estudo de escoamento bifásico é de grande relevância em diversos setores industriais, especialmente naqueles que envolvem transporte de fluidos e transferência de calor, como as indústrias petrolífera, química e nuclear. Esses escoamentos, compostos por duas fases imiscíveis, apresentam comportamentos complexos e dinâmicos, cuja caracterização depende de parâmetros fundamentais, como a fração volumétrica de cada fase. Métodos tradicionais de medição, em sua maioria invasivos, enfrentam limitações quando aplicados a sistemas industriais devido à abrasividade e corrosividade dos fluidos, o que motiva o uso de técnicas não invasivas baseadas em radiação nuclear. Neste contexto, o presente trabalho investiga a aplicação da análise por espalhamento de nêutrons como método não invasivo para a determinação da fração volumétrica em regimes bifásicos anulares. As simulações foram realizadas com o código MCNP6, fundamentado no método de Monte Carlo, utilizando uma fonte de $^{241}\text{Am-Be}$, cujos nêutrons interagem com os fluidos, produzindo nêutrons espalhados de caráter secundário. Foram modelados três sistemas distintos: óleo-gás (metano), óleo-água salgada e gás-água, para avaliar a interação dos nêutrons com os fluidos e a resposta espectrométrica de cada configuração. A partir dos dados obtidos, foi desenvolvida uma Rede Neural Profunda (do inglês *Deep Neural Network* – DNN) treinada com as informações dos nêutrons espalhados, com o objetivo de prever as frações volumétricas correspondentes a cada regime bifásico. O treinamento e a validação da rede utilizaram um banco de dados gerado via MCNP6, explorando diferentes fluidos e suas frações volumétricas. Após a otimização dos hiperparâmetros, os resultados apresentaram alta capacidade de generalização e alta precisão na estimativa das frações volumétricas, com valores máximos do Erro Percentual Absoluto Médio (MAPE) inferiores a 2% para todos os casos analisados. Os resultados evidenciam o potencial da integração entre a análise por espalhamento de nêutrons e DNN para o monitoramento não invasivo de regime de escoamento bifásico. Ressalta-se, contudo, que esse desempenho reflete um ambiente idealizado, no qual efeitos inerentes a sistemas industriais reais – como flutuações hidrodinâmicas, heterogeneidades geométricas, ruído instrumental, limitações de detecção e variações operacionais – não estão plenamente representados.

Palavras-chave: Escoamento Bifásico; Fração Volumétrica; Espalhamento de Nêutrons; Código MCNP6; Rede Neural Profunda (DNN).

ABSTRACT

The study of two-phase flow is of great relevance in several industrial sectors, particularly those involving fluid transport and heat transfer, such as the petroleum, chemical, and nuclear industries. These flows, composed of two immiscible phases, exhibit complex and dynamic behaviors, whose characterization depends on fundamental parameters, such as the volumetric fraction of each phase. Traditional measurement methods, mostly invasive, face significant limitations when applied to industrial systems due to fluid abrasiveness and corrosiveness, which motivates the use of non-invasive techniques based on nuclear radiation. In this context, the present work investigates the application of neutron scattering analysis as a non-invasive method for determining the volumetric fraction in annular two-phase flow regimes. The simulations were carried out using the MCNP6 code, based on the Monte Carlo method, employing a ^{241}Am -Be neutron source, whose neutrons interact with the fluids, producing secondary scattered neutrons. Three distinct systems were modeled – oil–gas (methane), oil–saline water, and gas–water – in order to evaluate neutron–fluid interactions and the spectrometric response of each configuration. Based on the obtained data, a Deep Neural Network (DNN) was developed and trained using information from the scattered neutrons to predict the volumetric fractions corresponding to each two-phase regime. The training and validation processes relied on a dataset generated via MCNP6 simulations, covering different fluids and their respective volumetric fractions. After hyperparameter optimization, the models exhibited high generalization capability and high accuracy in volumetric fraction estimation, with maximum Mean Absolute Percentage Error (MAPE) values below 2% for all analyzed cases. The results demonstrate the potential of integrating neutron scattering analysis with deep neural networks for non-invasive monitoring of two-phase flow regimes. It is emphasized, however, that this performance reflects an idealized simulation environment, in which effects inherent to real industrial systems – such as hydrodynamic fluctuations, geometric heterogeneities, instrumental noise, detection limitations, and operational variations – are not fully represented.

Keywords: Two-Phase Flow; Volumetric Fraction; Neutron Scattering; MCNP6; Deep Neural Network (DNN).

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Tipos de escoamentos horizontais (Salgado et al., 2025)	9
Figura 2: Tipos de Escoamentos Verticais (Salgado et al., 2025).....	9
Figura 3: Representação do processo de Ativação Neutrônica PGNAA (Glascock, 2004)	20
Figura 4: Espectro de energia da fonte ²⁴¹ Am-Be (ISO 8529-1:2001, 2001).....	23
Figura 5: Perceptron simples (Dam, 2024)	29
Figura 6: Esquema de uma rede neural com 3 entradas, 1 camadas ocultas e 2 saídas (Dam, 2024) .	31
Figura 7: Geometria do tubo vertical bifásico (Fonte: O Autor).....	36
Figura 8: Representação das regiões interna (r) - FVF ₁ e externa (R) - FVF ₂ (Fonte: O Autor).....	39
Figura 9: Representação esquemática do projeto da DNN (Fonte: O Autor).....	40
Figura 10: Histograma das classes de energia da contribuição nêutronica no ferro.....	43
Figura 11: Histograma das classes de energia dos nêutrons do Modelo 1: 1-99%.	44
Figura 12: Histograma das classes de energia dos nêutrons do Modelo 1: 50-50%.	44
Figura 13: Histograma das classes de energia dos nêutrons do Modelo 1: 100% de ar seco.....	44
Figura 14: Histograma das classes de energia dos nêutrons do Modelo 2: 1-99%.	47
Figura 15: Histograma das classes de energia dos nêutrons do Modelo 2: 50-50%.	47
Figura 16: Histograma das classes de energia dos nêutrons do Modelo 2: 100% de metano.	47
Figura 17: Histograma das classes de energia dos nêutrons do Modelo 3: 1-99%.	49
Figura 18: Histograma das classes de energia dos nêutrons do Modelo 3: 50-50%.	49
Figura 19: Histograma das classes de energia dos nêutrons do Modelo 3: 100% de óleo mexicano..	49
Figura 20: Fluxo de Nêutrons por Frações Volumétricas para o ar seco – Modelo 1	51
Figura 21: Fluxo de Nêutrons por Frações Volumétricas para o gás metano – Modelo 2	51
Figura 22: Fluxo de Nêutrons por Frações Volumétricas para o óleo mexicano – Modelo 3.....	52
Figura 23: Progressão do treinamento do Modelo 1: ar seco (à esquerda); água (à direita).	54
Figura 24: Regressão linear para o Modelo 1: a) água (à esquerda); b) ar seco (à direita).	56
Figura 25: Progressão do treinamento do Modelo 2: gás metano (à esquerda); óleo texano (à direita).	56
Figura 26: Regressão linear para o Modelo 2: a) gás metano (à esquerda); b) óleo texano (à direita).	58
Figura 27: Progressão do treinamento do Modelo 3: óleo mexicano (à esquerda); água salgada (à direita).....	59
Figura 28: Regressão linear para o Modelo 3: a) óleo mexicano (à esquerda); b) água salgada (à direita).	61
Figura 29: Funções de Ativação (Fonte: O autor).....	73
Figura 30: Derivadas das Funções de Ativação (Fonte: O autor).	74

LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Categoria de energia de nêutrons.	22
Tabela 2: Diretrizes para a interpretação do erro relativo R em simulações Monte Carlo.....	27
Tabela 3: Fluidos utilizados nos modelos.	37
Tabela 4: Modelos do regime de anular com diferentes fluidos.	38
Tabela 5: Intervalo de busca e funções de ativação analisadas durante a otimização.....	41
Tabela 6: Hiperparâmetros da DNN.....	53
Tabela 7: Classificação das faixas de erros relativos do Modelo 1.....	54
Tabela 8: Métricas de desempenho – Modelo 1.....	55
Tabela 9: Classificação das faixas de erros relativos do Modelo 2.....	57
Tabela 10: Métricas de desempenho – Modelo 2.....	57
Tabela 11: Classificação das faixas de erros relativos do Modelo 3.....	60
Tabela 12: Métricas de desempenho – Modelo 3.....	60

LISTA DE SIGLAS E ABREVIACOES

ANN:	<i>Artificial Neural Network</i>
BWR:	<i>Boiling Water Reactor</i>
CATHARE:	<i>Code Avance de ThermoHydraulique pour l'Analyse des Reacteurs à Eau</i>
DNN:	<i>Deep Neural Network (Rede Neural Profunda)</i>
ELU:	<i>Exponential Linear Unit</i>
ENIAC:	<i>Electronic Numerical Integrator and Computer</i>
GNA:	Algoritmo de Numeros aleatorios
IEN:	Instituto de Engenharia Nuclear
LANL:	<i>Los Alamos National Laboratory</i>
LOCA:	Loss-of-coolant accidents
MAE:	<i>Mean Absolute Percentage Error</i>
MAPE:	<i>Medium Absolut Percentual Error</i>
MCNP:	<i>Monte Carlo N-Particle: Codigo computacional para transporte de neutron e foton</i>
MLP:	<i>Multilayer Perceptrons</i>
MSE:	<i>Mean Squared Error</i>
NPS:	<i>Numero de historias (Number per stories)</i>
PGNAA:	<i>Prompt gamma neutron activation analysis</i>
PWR:	<i>Pressurized Water Reactor</i>
RELAP5:	<i>Reactor Excursion and Leak Analysis Program</i>
ReLU:	<i>Rectified Linear Unit</i>
RMSE:	<i>Root Mean Squared Error</i>
RNA:	Rede Neural Artificial
RSICC:	<i>Radiation Safety Information Computational Center</i>
SLP:	<i>Single-Layer Perceptron</i>
SNN:	<i>Shallow Neural Network</i>
Swish:	<i>Sigmoid-weighted Linear Unit</i>
TRAC:	<i>Transient Reactor Analysis Code</i>
VISED:	<i>Visual Editor</i>

SUMÁRIO

FICHA CATALOGRÁFICA	4
AGRADECIMENTOS	5
RESUMO	6
ABSTRACT	7
LISTA DE FIGURAS	8
LISTA DE TABELAS	9
LISTA DE SIGLAS E ABREVIACÕES	10
SUMÁRIO	11
1 INTRODUÇÃO	1
1.1 Revisão Bibliográfica	4
1.2 Objetivos	6
1.3 Relevância	7
2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	8
2.1 Escoamento Bifásico: Fundamentos e Aplicações	8
2.1.1 Indústria Petrolífera	10
2.1.2 Indústria de Trocadores de calor	11
2.2 O Nêutron e suas interações com o núcleo e a seção de choque	12
2.2.1 Interações Nêutron–Núcleo	14
2.2.2 Ativação Neutrônica	17
2.2.3 Fonte Amerício-Berílio	21
2.3 Monte Carlo	24
2.3.1 Contextualização Histórica.....	24
2.3.2 O código MCNP6	25
2.4 Redes Neurais Artificiais (RNAs)	27
2.4.1 Contextualização Histórica.....	27
2.4.2 Tipos de RNA.....	30
2.4.3 Fundamentos de uma rede neural profunda.....	32
2.4.4 Métricas estatísticas	34
3 METODOLOGIA	36
3.1 Desenvolvimento do modelo matemático	36
3.2 Desenvolvimento do banco de dados de frações volumétricas	38

3.3	Predição de fração volumétrica: Desenvolvimento da Rede Neural Profunda	40
4	RESULTADOS	42
4.1	Análise de sensibilidade	43
4.1.1	Modelo 1 – Água e Ar seco	44
4.1.2	Modelo 2 – Óleo Texano e Gás Metano.....	46
4.1.3	Modelo 3 – Óleo Mexicano e Água Salgada.....	48
4.1.4	Curva de Calibração e Fração Volumétrica.....	50
4.2	DNN: Predição da Fração Volumétrica.....	53
4.2.1	Modelo 1.....	53
4.2.2	Modelo 2.....	56
4.2.3	Modelo 3.....	59
5	CONCLUSÕES.....	62
5.1	Análise Física – Sensibilidade das técnicas	62
5.2	Análise Computacional – Fração Volumétrica	63
5.3	Trabalhos Futuros	64
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	65
	ANEXO 1 – FUNÇÕES DE ATIVAÇÃO	72

CAPÍTULO I

1 INTRODUÇÃO

O escoamento bifásico, caracterizado pelo fluxo simultâneo de diferentes fases (gás, sólido ou líquido), é amplamente reconhecido como um dos fenômenos mais representativos do comportamento dinâmico de fluidos em canais, como tubulações, dutos e poços. Esses escoamentos consistem em sistemas formados por dois fluidos que, embora insolúveis entre si, percorrem conjuntamente esses meios confinados. Dependendo da configuração espacial e temporal das fases, formam-se distintos regimes de fluxo, destacando-se os regimes anular, estratificado e de bolhas (Taitel e Dukler, 1976). Os escoamentos bifásicos estão presentes em diversos setores industriais e desempenham papel essencial em processos de transporte de massa e de transferência de calor, com destaque para os reatores químicos, a indústria petrolífera e os sistemas de conversão de energia. A caracterização desses escoamentos é desafiadora devido à complexidade das interações entre as fases, que podem ser líquido-gás, líquido-líquido ou líquido-sólido. Entre os parâmetros mais relevantes para essa caracterização está a fração volumétrica, cuja determinação é fundamental para o cálculo preciso da vazão e para a descrição do comportamento dinâmico do sistema. Outros parâmetros importantes incluem as propriedades físico-químicas das fases envolvidas, como densidade, viscosidade e velocidade (Hewitt e Hall-Taylor, 1970; Ishii e Hibiki, 2011).

Com o avanço das demandas da engenharia experimental, surgiram em laboratório métodos diretos de caracterização, como a separação gravitacional e o uso câmeras de alta velocidade para visualização de imagens (Hoffman e Britt, 1979). O estudo dos regimes de fluxo bifásico e da fração de volume passou a ganhar relevância científica e industrial, impulsionado pela necessidade de compreender e otimizar processos de transporte e de troca térmica. Esse avanço foi fortemente estimulado pelos progressos na indústria de petróleo e gás e na área de termodinâmica, resultando no desenvolvimento dos primeiros métodos experimentais para medição de frações volumétricas em tubulações industriais utilizando sensores convencionais e em sistemas de resfriamento de reatores nucleares (Lockhart e Martinelli, 1949; Taitel e Duckler, 1976).

Para medições e monitoramento, em substituição ao uso de sensores convencionais de contato direto, têm-se adotado técnicas não invasivas, como sensores de capacitância, tomografia por impedância elétrica ou tomografia por capacitância (Mosorov *et al.*, 2020; Roshani *et al.*, 2021). Nessas técnicas, os sensores são dispostos ao redor da seção do tubo, e

os múltiplos eletrodos posicionados em anéis permitem gerar imagens do escoamento. Por não interferirem no fluxo e suportarem altas temperaturas e radiações, essas técnicas possibilitam a modelagem precisa da fração volumétrica e dos padrões de fluxo em tempo real. Contudo, apresentam limitações como baixa resolução espacial, restrição quanto ao material (não metálico), sensibilidade geométrica, dificuldade em distinguir fluidos com permissividade semelhantes e necessidade de calibração frequente. O progresso da microeletrônica, da instrumentação digital e das técnicas ópticas (Hanus *et al.*, 2022; Massignam *et al.*, 2007; Murakawa *et al.*, 2005; Wotjan *et al.*, 2005) impulsionou o uso de câmeras de alta velocidade, sondas ópticas de fibras e sistemas de tomografia em tempo real (Mourão, 2015). Essas tecnologias passaram a ser amplamente aplicadas em plataformas offshore, refinarias, usinas termelétricas, estações de tratamento de esgoto e plantas químicas de alta complexidade. A escolha da técnica mais adequada passou a depender do tipo de escoamento, da dinâmica do regime operacional e da viabilidade de interromper ou não o processo. Na indústria petrolífera, métodos baseados em ultrassom tornaram-se ferramentas eficazes para detectar variações de fração volumétrica de gás, enquanto técnicas ópticas foram desenvolvidas para mapear padrões de fluxo e identificar a distribuição espacial das fases.

O avanço tecnológico consolidou o uso de técnicas não invasivas baseadas em radiação, como a tomografia por raios X (Haghi *et al.*, 2019), o uso aprimorado de fontes de radiação gama (Affonso *et al.*, 2020; Hanus *et al.*, 2014; Salgado *et al.*, 2023b; Salgado *et al.*, 2021) e as técnicas de espalhamento de nêutrons (Osman e Abdel, 2021), permitindo medições mais precisas e detalhadas das propriedades de fluxo. Essas técnicas possibilitam medir parâmetros de diferentes fases sem a necessidade de separação, além de extrair informações sobre velocidade (Hanus *et al.*, 2014) e fração volumétrica (Jeshvaghani *et al.*, 2023; Bishop e James, 1993; Dam *et al.*, 2023, Dam *et al.*, 2024; Salgado *et al.*, 2021, Salgado *et al.*, 2023a; Salgado *et al.*, 2024).

Com o aprimoramento das técnicas nucleares, seu uso foi estendido para diferentes ramos da indústria, inclusive para a caracterização de escoamentos bifásicos. Entre essas, destaca-se a Análise por Ativação Neutrônica (AAN), que começou a ser utilizada para estudar a composição de fluidos e prever o comportamento de fluxos bifásicos sob diferentes regimes (estratificado e anular) e frações volumétrica. Na AAN, uma fonte de nêutrons bombardeia os núcleos dos elementos presentes em um material, provocando a captura de nêutrons e a subsequente emissão imediata de fótons gama característicos (Kruger, 1971; Shea *et al.*, 1990). A análise espectrométrica desses fótons permite identificar e quantificar os elementos presentes, fornecendo informações detalhadas sobre a composição do comportamento do material (De

Soethe *et al.*, 1972). Além disso, os nêutrons espalhados também podem ser analisados para inferir características do regime de fluxo. Por fim, abordagens híbridas que combinam métodos ópticos, acústicos e nucleares, têm expandido a precisão e a aplicabilidade das análises desses sistemas complexos.

Com a crescente complexidade dos escoamentos bifásicos, caracterizados por intensas variações temporais e espaciais, os modelos tradicionais mostraram-se limitados na estimativa precisa de parâmetros como fração volumétrica e transferência de calor. Nesse cenário, técnicas teóricas baseadas em simulações computacionais vêm sendo utilizadas, capazes de modelar sistemas estáticos (*snapshots*) com foco na previsão das frações volumétricas (Bishop e James, 1993; Dam, 2024; Dam et al., 2024; Salgado, 2010; Salgado et al., 2023a). O avanço da capacidade de processamento, impulsionado por processadores de alto desempenho e unidades gráficas (GPUs), permitiu integrar a modelagem física com métodos de inteligência artificial. Entre esses métodos, destaca-se a simulação de Monte Carlo, amplamente utilizada para descrever o transporte de nêutrons e sua interação com materiais/fluidos. Paralelamente, as Redes Neurais Artificiais (RNA), inspiradas no funcionamento das sinapses e neurônios do cérebro humano, têm sido aplicadas ao processamento de espectros gama e dados de nêutrons, aprimorando a medição da fração volumétrica em tempo real. Dentre os diversos tipos de redes, as Redes Neurais Profundas (do inglês *Deep Neural Networks* – DNNs) destacam-se por possuírem múltiplas camadas ocultas entre as entradas e as saídas, permitindo o aprendizado de relações complexas por meio de ajustes sucessivos dos pesos sinápticos. As redes são capazes de reconhecer padrões a partir de conjuntos finitos de dados de treinamento e validação e generalizar o conhecimento adquirido para novas situações dentro do mesmo domínio (Chollet, 2021; Haykin, 1994).

A adoção de uma abordagem híbrida, combinando simulações baseadas no método de Monte Carlo com modelos de aprendizado profundo, configura-se como uma resposta direta às limitações impostas dos métodos experimentais convencionais. Apesar dos avanços experimentais observados nas últimas décadas, a investigação de escoamentos bifásicos sob condições representativas de sistemas industriais reais permanece desafiadora, em razão do alto custo, da complexidade operacional e das restrições físicas associadas a ambientes severos. Nesse contexto, as simulações computacionais Monte Carlo apresentam-se como uma alternativa fundamental, permitindo a geração de grandes volumes de dados com elevado grau de controle físico e fidelidade estatística. Contudo, a relação entre os espectros de nêutrons e a fração volumétrica é fortemente não linear, o que inviabiliza o uso de modelos analíticos diretos. Assim, as DNNs mostram-se particularmente adequadas para modelar essas relações

complexas, atuando como modelos de aproximação capazes de inferir a fração volumétrica a partir de dados espectrais de nêutrons de forma eficiente e robusta.

Nesse sentido, foi desenvolvida uma arquitetura de DNN para a predição de frações volumétricas a partir da classificação energética de nêutrons espalhados, resultantes da interação de uma fonte ^{241}Am -Be com sistemas tubo-fluido simulados no código MCNP6 (Goorley *et al.*, 2016). Para tal, construiu-se um banco de dados abrangendo diferentes pares de fluidos, incluindo óleo-gás (metano), óleo-água salgada e gás-água, com o objetivo de avaliar o desempenho do método na determinação da fração volumétrica em regime de fluxo anular.

1.1 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

BEGGS e BRILL (1973) realizaram uma investigação experimental do escoamento bifásico gás-líquido em tubulações inclinadas, com foco nas taxas de retenção de líquido (*liquid holdup*) e nas quedas de pressão em função do ângulo de inclinação. Os resultados demonstraram que a inclinação exerce impacto significativo tanto na retenção de líquido quanto no gradiente de pressão, observando-se uma retenção máxima em torno de $+50^\circ$ e mínima próxima a -50° em relação à horizontal. Além disso, constatou-se a dependência desses parâmetros com a fração de líquido e do número de *Froude* das fases. O estudo fornece correlações empíricas amplamente utilizadas para a previsão de comportamento de escoamentos bifásicos em tubulações inclinadas.

TAITEL e DUKLER (1976) apresentaram um modelo mecanicista para prever as transições entre regimes de escoamento bifásico gás-líquido em tubos horizontais e inclinados. As transições consideradas incluem regimes como estratificado suave, estratificado ondulado, intermitente (*slug/plug*), bolha dispersa e anular com líquido disperso. O modelo baseia-se em mecanismos físicos, e não em ajustes empíricos, considerando variáveis como vazões de gás e líquido, propriedades dos fluidos, diâmetro e inclinação do tubo. Por meio de correlações adimensionais, é possível gerar mapas de regimes que incorporam os efeitos geométricos e fluidodinâmicos, apresentando bom acordo com dados experimentais consolidados.

AFFONSO *et al.* (2020) investigaram o uso de redes neurais artificiais para o reconhecimento de padrões de distribuição de pulsos gama em fluxos multifásicos, visando identificar regimes de escoamento e estimar frações volumétricas. O sistema experimental

utilizou geometria de feixe estreito, uma fonte gama e um detector de NaI(Tl). Os modelos dos regimes anular e estratificado foram desenvolvidos com o código MCNPX, gerando os dados para treinamento e validação da rede. A modelagem por Dinâmica dos Fluidos Computacional (*Computational Fluid Dynamics – CFD*) utilizando o software Ansys-CFX, simulou diferentes frações volumétricas, convertidas em *voxels* e integradas ao MCNPX. Os resultados mostraram excelente concordância entre simulação e experimento, com erro relativo inferior a 1,1% na predição das frações de volume.

OSMAN e ABDEL-MONEN (2021) avaliaram técnicas baseadas em medição do feixe de transmissão de radiação para determinar a fração de vazio (*void fraction*) em fluxos bifásicos em dutos. O método utiliza radiação (nêutrons ou raios gama) para interagir com a mistura gás-líquido no interior do tubo, e, a partir da atenuação diferencial e dos perfis espectrais, determina-se a fração volumétrica correspondente ao gás. O estudo compara os resultados com métodos convencionais e discute limitações associados à heterogeneidade do fluxo, efeitos de espalhamento e calibração dos detectores.

JESHVAGHANI *et al.* (2023) propuseram uma metodologia experimental que combina extração de características estatísticas de sinais obtidos por técnicas radiométricas com uma rede neural artificial, para prever frações volumétricas de gás em fluxos bifásicos, independentemente do regime de fluxo. Foram considerados múltiplos regimes (como *plug*, *slug*, bolha, e transição *plug*-bolha) em duto horizontal, utilizando uma fonte gama ^{241}Am (59,5 keV) e um detector de NaI(Tl). As características extraídas (frequência e tempo) alimentaram a rede neural artificial, que apresentou boa precisão e capacidade de generalização frente a diferentes condições de escoamento.

SALGADO *et al.* (2023a) investigaram, por simulação, um sistema bifásico água-gás nos regimes anular e estratificado. A técnica de Análise por Ativação de Nêutrons com emissão de Gama Imediata (*Prompt Gamma Neutron Activation Analysis - PGNA*) foi combinada com uma rede Perceptron de Multicamadas (MLP) para prever a fração volumétrica e identificar o regime de fluxo. A geometria do experimento foi modelada no MCNP6, utilizando fonte $^{241}\text{Am-Be}$ e detector esférico. O modelo foi capaz de prever a fração com erro percentual absoluto médio (MAPE) inferior a 1,58 % e classificou corretamente os regimes com 100 % de precisão.

SALGADO *et al.* (2023b) apresentaram um sistema de medição baseado em densitometria gama de dupla modalidade (transmissão e espalhamento), combinado com uma rede neural profunda (*deep neural network*) composta por sete camadas ocultas, com objetivo de monitorar o transporte sequencial de fluidos em polidutos e estimar a zona de mistura (*transmix*). A geometria de detecção utilizou uma fonte ^{137}Cs (661,657 keV) e dois detectores de NaI(Tl). As simulações de Monte Carlo, realizadas no código MCNP6, forneceram os sinais de entrada para o treinamento e teste da rede neural profunda, que predisse o nível de pureza dos fluidos com erro quadrático médio (MSE) inferior a 1,4 e erro percentual absoluto médio (MAPE) inferior a 5,73 %, demonstrando potencial de aplicação industrial.

SALGADO *et al.* (2024) desenvolveram equações analíticas para calcular a fração de vazio (*void fraction*) em tubos com fluxo bifásico água-gás, utilizando densitometria gama. A configuração tradicional de medição (fonte ^{137}Cs e detector NaI(Tl)) foi simulada com o código MCNP6. Para validação, modelos bifásicos foram gerados em tubos de seções cilíndricas e quadradas, variando diâmetros e fontes de radiação (^{241}Am , ^{137}Cs , ^{60}Co). As equações propostas apresentaram excelente concordância, com erro relativo médio máximo de 0,21% em tubos cilíndricos nos regimes estratificado e anular.

DAM *et al.* (2024) aplicaram uma Rede Neural Artificial associada à técnica de Análise por Ativação de Nêutrons com emissão de Gama Imediata (PGNAA) para identificar fluidos em regime de fluxo anular. Simulações de Monte Carlo no código MCNP6, com uma fonte $^{241}\text{Am-Be}$, geraram espectros gama correspondentes a diferentes frações volumétricas de água salgada, óleo e gás. A rede apresentou alta capacidade de generalização, predizendo as frações com mais de 92% dos resultados apresentando erro inferior a 5%.

1.2 OBJETIVOS

Objetivo Geral

Investigar a viabilidade e a sensibilidade da técnica de espalhamento de nêutrons com fonte de $^{241}\text{Am-Be}$ para estimar a fração volumétrica e regimes bifásicos anular, por meio de simulação com o código MCNP6 integradas a modelos de rede neurais profundas.

Objetivos específicos

1) Modelagem e simulação da geometria de medição (fonte-detector)

- 1.1. Desenvolver a geometria de medição no código MCNP6 (posição da fonte, posição e tipo de detectores).
- 1.2. Avaliar sensibilidade da técnica frente a variações de composição e geometria.
- 1.3. Implementar três modelos representativos de escoamento anular (sistemas bifásicos):
i) Água – gás, ii) Gás metano – óleo (tipo texano) e iii) Óleo (tipo mexicano) – água salgada.
- 1.4. Gerar um conjunto de arquivos de saída do código MCNP6 variando frações volumétricas.

2) Projeto, treinamento e otimização da Rede Neural Profunda (DNN)

- 2.1. Projetar a arquitetura DNN inicial (número de camadas ocultas, neurônios por camada, funções de ativação, *batch normalization*, número de épocas).
- 2.2. Otimizar hiperparâmetros com biblioteca *Optuna* (taxa de aprendizado, número de camadas e neurônios).

1.3 RELEVÂNCIA

Este trabalho é relevante por integrar métodos nucleares avançados, como a técnica por espalhamento de nêutrons, a técnicas de inteligência artificial baseadas em redes neurais profundas, com o objetivo de investigar sistemas bifásicos industriais. A proposta demonstra a capacidade de realizar análises complexas e preditivas em diferentes combinações de fluidos (água-gás, óleo-gás metano e óleo-água), possibilitando o desenvolvimento de soluções inovadoras para o monitoramento e controle de processos multifásicos. A aplicação desta técnica oferece uma abordagem não invasiva, em tempo real e de alta precisão, com potencial para otimizar processos industriais, reduzir custos operacionais e aumentar a segurança em setores estratégicos como petróleo e gás, energia, química e saneamento. Dessa forma, este estudo contribui tanto para o avanço científico na área de técnicas nucleares aplicadas quanto para o desenvolvimento de ferramentas inteligentes.

CAPÍTULO II

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Neste capítulo são apresentados os conceitos teóricos necessários para a compreensão da metodologia proposta neste trabalho. São abordados os seguintes tópicos: fundamentos e aplicações do escoamento bifásico, física dos nêutrons, modelagem matemática utilizando o código MCNP6 e redes neurais profundas.

2.1 ESCOAMENTO BIFÁSICO: FUNDAMENTOS E APLICAÇÕES

Os escoamentos bifásicos envolvem o escoamento simultâneo de duas fases distintas em uma mesma região. Entre as combinações mais comuns destacam-se os escoamentos líquido-gás e líquido-líquido, amplamente estudados em geometrias horizontais (Eaton *et al.*, 1967; Flanigan, 1958; Govier, 1962; Hughmark, 1962; Oliemans, 1976) e verticais (Beggs e Brill, 1973; Hagedorn e Brown, 1965). O comportamento bifásico depende de diversos fatores, como propriedades das fases (densidade e viscosidade) (Souza, 2010), condições operacionais (vazão, temperatura, pressão e velocidade) (Beggs e Brill, 1982; Beggs e Brill, 1973) e geometria da tubulação (dimensões, inclinação e formato). Os principais regimes de escoamento líquido-gás observados em tubulações horizontais são descritos na Figura 1 (Taitel e Duckler, 1976).

No escoamento anular líquido-gás, a fase gasosa escoar pelo centro da tubulação, enquanto o líquido forma um filme aderido às paredes internas, podendo arrastar gotículas em suspensão. Esse tipo de regime é amplamente observado em processos de transferência de calor e transporte de fluidos, como trocadores de calor, reatores e linhas de produção de petróleo. Já no escoamento anular líquido-líquido, composto pelas fases água e óleo, a fase contínua (geralmente o óleo) ocupa o centro do tubo, enquanto a água, mais densa, forma uma película ao longo das paredes. Esse padrão é típico de sistemas de separação e transporte de emulsões em dutos de produção e refino de petróleo. Dessa forma, este trabalho concentra-se na caracterização e modelagem do regime anular, considerando tanto escoamentos líquido-gás quanto líquido-líquido, com o objetivo de avaliar o comportamento das frações volumétricas e o impacto das propriedades físicas das fases nas respostas obtidas por meio das simulações Monte Carlo (MCNP6) e da rede neural profunda (DNN).

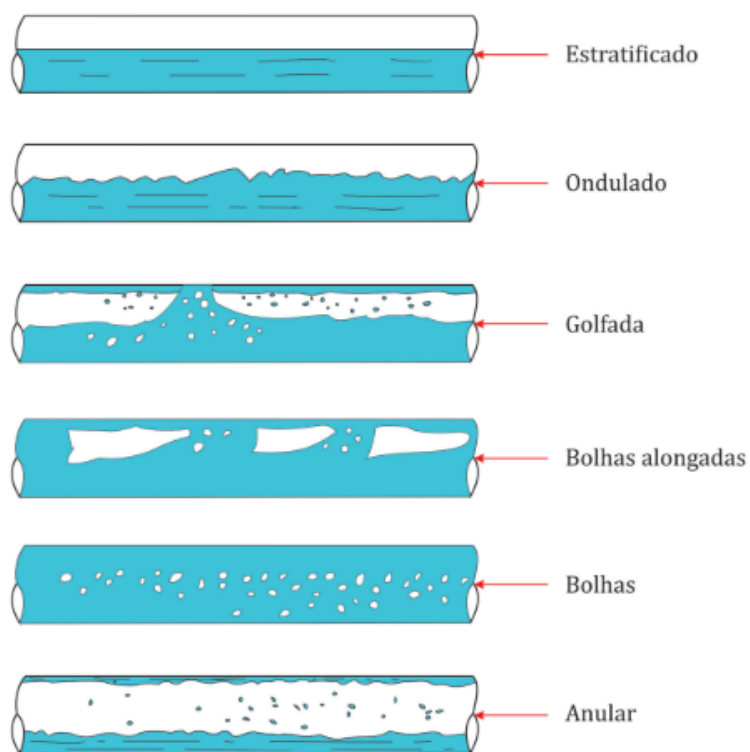


Figura 1: Tipos de escoamentos horizontais (Salgado *et al.*, 2025)

Em tubulações verticais, os padrões típicos são bolhas, golfada, caótico (*churn*) e anular (Govier e Aziz, 1972). A Figura 2 ilustra os principais padrões verticais.

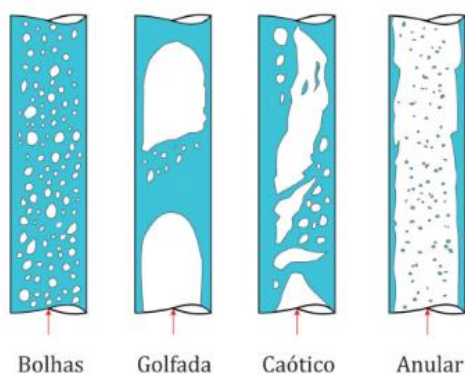


Figura 2: Tipos de Escoamentos Verticais (Salgado *et al.*, 2025)

Os escoamentos bifásicos também podem ser classificados quanto ao comportamento temporal:

- **Estático:** as fases permanecem em repouso, com separação clara por diferença de densidade;

- **Estacionário:** o fluxo é permanente e as variáveis macroscópicas (pressão, temperatura e fração volumétrica) mantêm-se constantes;
- **Dinâmico (transiente):** os parâmetros variam no tempo, exigindo medições com alta resolução temporal.

Entre os diferentes tipos de escoamento, o regime estacionário é o mais comum em aplicações industriais, por permitir medições contínuas e maior estabilidade operacional. Desde meados do século XX, estudos experimentais, como os de Golan e Stenning (1969), têm contribuído significativamente para a caracterização e compreensão desses padrões.

O escoamento bifásico ocorre em diversas áreas da engenharia e da ciência, sendo essencial em:

- Usinas termoeletricas e nucleares (transferência de calor);
- Refinarias e indústrias de petróleo e gás (transporte e separação de hidrocarbonetos);

As técnicas de medição associadas ao estudo desses escoamentos podem ser classificadas como:

- **Invasivas:** inserem sondas ou sensores diretamente no fluido, como as sondas de fio quente e de impedância;
- **Não invasivas:** realizam medições externas, sem perturbar o escoamento, utilizando princípios de ultrassom, capacitância, tomografia de raios X e radiação.

2.1.1 INDÚSTRIA PETROLÍFERA

Na área industrial petrolífera, o escoamento bifásico em dutos e tubulações é fundamental para estimar a separação de fases líquido-líquido e gás-líquido, garantindo um processamento eficiente dos hidrocarbonetos (Andreolli, 2016). Os sistemas industriais lidam frequentemente com separação trifásica do fluido (gás-óleo-água) em tanques *onshore* ou *offshore*, projetados para dividir as fases com base nas diferenças físicas entre os componentes, permitindo a ocorrência de diversas combinações de fases bifásicas e monofásicas (Beggs e Brill, 1973). O domínio do escoamento bifásico é essencial para o projeto de dutos, separadores e sistemas de produção.

Após essa etapa, os hidrocarbonetos parcialmente separados seguem para refinarias e unidades de processamento químico, onde processos mais avançados de separação e purificação

são realizados. Nessas instalações, os escoamentos bifásicos continuam presentes em colunas de destilação, reatores e separadores, especialmente quando há emulsões estáveis ou interfaces líquido-líquido, como na separação óleo-água residual. A separação eficiente dessas fases é crucial para a qualidade do produto final, recuperação de petróleo residual e o descarte adequado da água, exigindo controle rigoroso de variáveis como temperatura, pressão e adição de agentes desemulsificantes (Andreolli, 2016). Embora muitos dos fenômenos transientes na indústria de óleo e gás sejam relativamente lentos, o conhecimento do comportamento dinâmico das vazões e pressões em dutos multifásicos é vital para a operação segura e eficiente. Desde a década de 1980, pesquisas sobre escoamento bifásico em dutos levaram ao desenvolvimento de diversas ferramentas comerciais de simulação (Masella *et al.*, 1998).

Ao longo do ciclo de produção de hidrocarbonetos, a indústria enfrenta desafios técnicos que dependem do conhecimento detalhado dos fenômenos físicos e químicos, incluindo integridade estrutural e cimentação (Tahir, 2018), frações volumétrica (Affonso *et al.*, 2020) e incrustação (Carvalho *et al.*, 2024; Salgado *et al.*, 2020). Regimes bifásicos mais comuns são os sistemas água-óleo ou óleo-gás natural (metano). Outras combinações incluem sólido-líquido (ex.: areia-lama), líquido-gás com impurezas e líquido-líquido com solventes, dependendo da aplicação. As operações podem ser divididas em *upstream* (produção) e *downstream* (refino).

Portanto, na indústria petrolífera, a medição precisa das frações volumétricas em escoamentos bifásicos é fundamental para o controle de processos, otimização da produção e garantia da eficiência operacional ao longo das etapas de separação e transporte de hidrocarbonetos.

2.1.2 INDÚSTRIA DE TROCADORES DE CALOR

Na área industrial nuclear, o escoamento bifásico é amplamente utilizado em reatores de usinas nucleares, com o objetivo de otimizar a troca de calor e a conversão de líquido em vapor. O sistema de fases pode ser composto por condensado ou líquido refrigerante, sendo a presença simultânea da fase contínua gasosa (ar seco) e da fase líquida aderida à parede (filme de água) fundamental para maximizar a eficiência térmica do processo (Salgado *et al.*, 2023a). Nas usinas nucleares, especificamente nos reatores de água pressurizada (*Pressurized Water Reactor* – PWR), as reações nucleares produzem calor que aquece a água presente no circuito primário. Já nos reatores de água fervente (*Boiling Water Reactor* – BWR), a água líquida se converte em vapor diretamente no núcleo do reator, gerando um escoamento bifásico essencial

para a produção de energia elétrica. Esse ciclo, conhecido como Ciclo de *Rankine*, é a base da operação termodinâmica tanto em usinas nucleares quanto em termelétricas, pois estabelece um regime bifásico vapor-líquido responsável pelo transporte e pela conversão de energia térmica em mecânica (Lamarsh e Baratta, 2001).

Os estudos iniciais sobre escoamento bifásico transiente foram impulsionados principalmente pela indústria nuclear, com o objetivo de prever o comportamento do fluido durante acidentes de perda de refrigerante LOCA (*Loss-of-Coolant Accidents*). Devido à complexidade envolvida, marcada pela presença simultânea de água e vapor, pela presença de transientes rápidos e intensa transferência de calor, foram desenvolvidos modelos avançados de dois fluidos, baseados em equações diferenciais parciais aplicadas a diferentes configurações de escoamento. Esses modelos deram origem a códigos computacionais amplamente utilizados, como TRAC (*Transient Reactor Analysis Code*), código de análise transiente de reatores; RELAP5 (*Reactor Excursion and Leak Analysis Program*), programa de análise de excursão do reator e vazamentos; e CATHARE (*Code Avancé de ThermoHydraulique pour l'Analyse des Réacteurs à Eau*), código avançado de termo-hidráulica para análise de reatores a água (Masella *et al.*, 1998).

Nesse contexto, o conhecimento detalhado das frações volumétricas das fases em trocadores de calor nucleares é essencial para a análise do regime de ebulição, da transferência de calor e da estabilidade térmica do sistema. A determinação precisa dessas frações permite otimizar a eficiência do ciclo termodinâmico e aumentar a segurança operacional dos reatores.

2.20 NÊUTRON E SUAS INTERAÇÕES COM O NÚCLEO E A SEÇÃO DE CHOQUE

O nêutron é uma partícula subatômica descoberta por James Chadwick, aluno de Ernest Rutherford, em (1932). Essa partícula caracteriza-se pela neutralidade elétrica, decorrente de possuir carga elétrica líquida nula, o que implica que trajetória não seja governada por interações eletrostáticas. Conseqüentemente, os nêutrons não sofrem repulsão Coulombiana ao se aproximarem do núcleo atômico, podendo penetrar mais facilmente na região nuclear e interagir diretamente com seus constituintes.

Devido a essa neutralidade elétrica, os nêutrons podem se aproximar dos núcleos atômicos e interagir com eles ao longo de uma ampla faixa de energias, principalmente por meio da força nuclear forte, cuja atuação ocorre em escalas da ordem de 10^{-15} metros (femtômetros). Essas interações podem promover diferentes tipos de reações nucleares. A

probabilidade de ocorrência de uma determinada interação depende tanto do núcleo-alvo quanto da energia do nêutron incidente, sendo extremamente sensível ao número de massa do núcleo e à energia do nêutron, podendo variar significativamente mesmo com pequenas alterações em um desses parâmetros. Os nêutrons incidentes são classificados em diferentes categorias em termos de energia (IAEA, 2023).

- Ultrafrio: $< 0,3 \mu\text{eV}$
- Muito Frio: $0,3 \mu\text{eV} \leq E \leq 0,1 \text{ meV}$
- Frio: $< 5 \text{ meV}$
- Térmicos: $< 0,5 \text{ eV}$
- Quente: $0,1 \text{ eV} \leq E \leq 1 \text{ eV}$
- Epitérmicos: $0,5 \text{ eV} \leq E \leq 10 \text{ keV}$
- Rápidos: $> 10 \text{ keV}$

Um mesmo núcleo-alvo pode sofrer diferentes tipos de reações nucleares, inclusive simultaneamente, sendo que uma dessas reações geralmente se sobressai em relação às demais. A probabilidade de ocorrência de cada reação é expressa por meio de seções de choque correspondente. O conceito de seção de choque permite quantificar a probabilidade de interação entre o nêutron e o núcleo e, portanto, é um parâmetro fundamental para a compreensão dos processos de absorção, espalhamento e fissão nuclear (Tahir, 2018).

A seção de choque nuclear para nêutrons de uma dada energia pode ser definida como o número médio de colisões por núcleo-alvo por nêutron incidente. Em termos práticos, ela representa uma área efetiva que expressa probabilidade de uma reação ocorrer. Essa grandeza é geralmente expressa em barns ($1 \text{ barn} = 10^{-24} \text{ cm}^2$).

Como a seção de choque é um conceito essencial para o entendimento das probabilidades associadas a cada tipo de reação e, portanto, para a determinação de qual delas será dominante em determinadas condições experimentais, torna-se necessário o estudo detalhado das principais interações entre nêutrons e núcleos. Essas interações podem incluir processos de espalhamento elástico e inelástico, captura radiativa, fissão e emissão de partículas, cada um com seções de choque específicas que variam conforme a energia do nêutron incidente e a natureza do núcleo-alvo.

2.2.1 INTERAÇÕES NÊUTRON–NÚCLEO

Quando um nêutron penetra o núcleo atômico, ele pode ser capturado formando um núcleo composto que pode ser temporariamente instável. Este estado excitado tende a se estabilizar por meio de diferentes tipos de reações nucleares, dependendo das condições internas do núcleo, tais como a razão nêutron/próton, a energia de excitação e a estrutura de camadas nucleares. De maneira geral, as interações entre nêutrons e núcleos podem ser divididas em duas categorias principais: espalhamento e absorção. Nas reações de espalhamento, ocorre uma troca de energia entre as partículas em colisão, mas o nêutron permanece livre após a interação. Por outro lado, nos processos de absorção, o nêutron é incorporado ao núcleo, resultando na formação de novos núcleos, e na criação de novas partículas. Dentro do espalhamento, há dois tipos de interações distintas: o espalhamento elástico e o espalhamento inelástico (Glascok, 2004).

a) Espalhamento de nêutrons

O espalhamento elástico de nêutrons é um tipo de reação nuclear n-núcleo caracterizada por apenas transferir energia cinética, sem a excitação do núcleo. Neste tipo de interação, não ocorre perda de energia cinética total do sistema nêutron-núcleo, uma vez que o núcleo permanece no estado fundamental, com mudança na direção do movimento do nêutron e transferência parcial de sua energia ao núcleo-alvo. Do ponto de vista ondulatório, esse processo é caracterizado pela conservação das relações de fase entre as amplitudes de onda espalhadas, refletindo uma resposta coletiva e coerente do núcleo ao potencial nuclear incidente, uma vez que o núcleo permanece no estado fundamental, sem excitação de graus de liberdade internos.

O espalhamento inelástico, por sua vez, é um tipo de reação nuclear n-núcleo caracterizada por ocorrer quando o nêutron transfere parte de sua energia para excitar o núcleo-alvo. Nesse tipo de interação, o nêutron transfere energia cinética ao núcleo-alvo, excitando o núcleo.

No espalhamento inelástico o núcleo sofre uma mudança em sua configuração interna, devido à transferência de energia e momento do nêutron incidente. Essa interação, o nêutron é temporariamente absorvido, formando um núcleo composto. Essa interação promove o núcleo do estado fundamental para um estado excitado, que pode apresentar vida curta (apresentando um estado excitado estável decaindo por gama rapidamente), metaestável (produzindo um

isômero que pode durar milissegundos, horas, anos) ou instabilidade nuclear (com energia acima do limiar e podendo emitir outras partículas ou radiações). Nesse processo, o nêutron não é capturado permanentemente, mas interage fortemente com o núcleo, formando um estado intermediário acoplado, do qual emerge com menor energia cinética, enquanto parte da energia inicial é convertida em energia de excitação nuclear e posteriormente liberada sob a forma de radiação gama ou outros canais de decaimento.

A perda parcial de energia cinética do nêutron caracteriza o espalhamento inelástico e está associada, do ponto de vista ondulatório, à quebra da coerência das amplitudes de onda espalhadas, refletindo a excitação de graus de liberdade internos do núcleo.

Esses estados excitados podem atuar como precursores de reações de absorção e transmutação nuclear, abrindo canais para ativação neutrônica. Em particular, estados instáveis ou metaestáveis podem decair por emissão γ , β , n , p ou α , ou ainda favorecer reações de captura radiativa, como (n,γ) , cuja seção de choque é elevada para nêutrons térmicos.

b) Reações de absorção

Nas reações de absorção (ou captura), os processos mais relevantes são a captura radiativa e a fissão nuclear. As reações nêutron-gama (n,γ) , nêutron-beta (n,β) e nêutron-alfa (n,α) representam mecanismos de decaimento ou transmutação do núcleo composto, buscando um estado mais estável.

- Reação (n,γ) : ocorre a captura de um nêutron sem emissão de partículas carregadas, sendo a energia excedente liberada sob a forma de radiação gama.
- Reação (n,β) : ocorre quando o núcleo resultante apresenta desequilíbrio na razão nêutron/próton, levando à emissão de partículas beta, convertendo um nêutron em próton (ou vice-versa).
- Reação (n,α) : ocorre quando o núcleo busca maior estabilidade ao ejetar uma partícula alfa (o núcleo de ^4He , composto por dois prótons e dois nêutrons).

Reações de captura radiativa, como (n,γ) apresentam, em geral, seções de choque muito elevadas para nêutrons térmicos.

c) Fissão nuclear

A fissão nuclear (n, f) ocorre principalmente em núcleos pesados. Nesse processo, a absorção do nêutron incidente leva o núcleo composto a um estado excitado e instável, resultando em sua divisão em dois núcleos menores, denominados produtos de fissão, acompanhada da liberação de uma grande quantidade de energia. Os produtos de fissão apresentam, em geral, uma distribuição de massas assimétrica, com dois grupos principais em torno de ~ 95 u e ~ 135 u, e normalmente são radioativos, decaindo posteriormente por emissão beta e gama (Tauhata *et al.*, 2014).

d) Emissão de partículas

As reações de emissão de partículas (n, x) ocorrem quando o nêutron incidente possui energia acima do limiar necessário para romper a força de ligação nuclear, permitindo a ejeção de um ou mais núcleons. Essas reações são raras em processos com nêutrons térmicos, mas tornam-se mais prováveis à medida que aumenta a energia do nêutron, especialmente na faixa de nêutrons rápidos. O núcleo composto pode decair de diferentes formas, como:

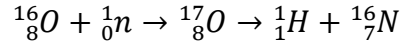
- Emissão de um próton – reação (n, p);
- Emissão de uma partícula alfa – (n, α);
- Emissão de dois ou três nêutrons - ($n, 2n$) e ($n, 3n$), respectivamente.

As reações que envolvem emissão de partículas carregadas, como (n, α) e (n, p), costumam requerer energias mais altas para superar a barreira Coulombiana, sendo mais prováveis com nêutrons rápidos. O modo de decaimento depende da energia do nêutron incidente e das propriedades do núcleo-alvo. Em geral, a seção de choque para essas reações é pequena (Tauhata *et al.*, 2014)

e) Reações (n, p)

Uma das reações de maior importância para a física da radioproteção em reatores de água é a reação de captura neutrônica (n, p), que ocorre no oxigênio $^{16}\text{O}(n, p)^{16}\text{N}$. Essa reação pouco provável para nêutrons térmicos só se torna relevante quando existe uma fração do

espectro neutrônico acima de 10 MeV, tornando-se significativa em campos de nêutrons rápidos, levando à formação de hidrogênio e do isótopo ^{16}N , de meia vida de 7,13 segundos, emissor beta e de duas radiações gama de alta energia $E\gamma_1 = 6,13 \text{ MeV}$ (68%) e $E\gamma_2 = 7,11 \text{ MeV}$ (4,9%)(Tauhata *et al.*, 2014). Esta reação é representada pela Equação 1.



Equação 1

As reações do tipo (n, γ) ocorrem para quase todos os elementos químicos, enquanto as reações (n, α) e (n, p) são características de poucos elementos, geralmente de baixa massa atômica. Já as reações de fissão (n, f) ocorrem via fissão induzida por nêutrons térmicos em núcleos físséis, como ^{235}U e ^{239}Pu , enquanto núcleos apenas fissionáveis, como ^{238}U e ^{232}Th , requerem nêutrons rápidos para que a fissão ocorra.

2.2.2 ATIVAÇÃO NEUTRÔNICA

Quando um feixe de nêutrons com intensidade de fluxo ϕ incide sobre uma amostra com N_0 átomos de um determinado elemento, cuja seção de choque para a reação é σ , o número de reações nucleares (ou taxa de formação de radionuclídeos) é dado pela Equação 2:

$$R = \phi N_0 \sigma \therefore R = \Sigma \phi$$

Equação 2

A seção de choque macroscópica Σ expressa a probabilidade total de interação por unidade de comprimento percorrido pelo nêutron no meio.

Em que:

R : taxa de reações por segundo;

ϕ : fluxo de nêutrons incidentes ($\text{nêutrons} \cdot \text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$);

N_0 : número de núcleos-alvo disponíveis na amostra;

Σ : seção de choque macroscópica (cm^{-1});

σ : seção de choque microscópica da reação (barns), sendo $1 \text{ barn} = 10^{-24} \text{ cm}^2$.

Para a ocorrência desses tipos de interação, considera-se uma camada do material-alvo de espessura L e área A , suficientemente fina para que se possa negligenciar múltiplas interações de um mesmo nêutron com mais de um núcleo-alvo. A densidade volumétrica de nêutrons é n (nêutrons/cm³) e a densidade volumétrica de núcleos-alvo é N [(núcleos/ cm³)]. Os nêutrons se deslocam com uma velocidade média v , de modo que o fluxo de nêutrons seja obtido pela Equação 3.

$$\phi = nv$$

Equação 3

O fluxo ϕ é o número de nêutrons que atravessa uma unidade de área por unidade de tempo. A seção de choque total (σ_{Total}), que representa a probabilidade efetiva de ocorrência de qualquer tipo de interação entre o nêutron incidente e o núcleo-alvo, é expressa como a soma das seções de choque parciais associadas a cada processo de interação, por meio da Equação 4 (Tahir, 2018).

$$\sigma_{Total} = \sigma_{Esp} + \sigma_{Cap} + \sigma_{Fissão}$$

Equação 4

Em que:

σ_{Esp} : seção de choque para espalhamento (elástico e inelástico);

σ_{Cap} : seção de choque para captura (reação n, γ);

$\sigma_{Fissão}$: seção de choque para fissão nuclear (aplicável a núcleos físséis e fissionáveis).

A incidência de nêutrons sobre uma amostra formada por um elemento químico simples ou por uma substância composta pode induzir a ativação nuclear, na maioria dos casos, por meio de reações de captura. Nesses processos, o nêutron é absorvido pelo núcleo atômico, originando um novo isótopo, geralmente instável e portanto radioativo (Glascocock, 2004). Este fenômeno é denominado de reação de ativação com nêutrons, e o radionuclídeo formado emite suas radiações gama características durante seu processo de decaimento, o que permite sua identificação. Esta propriedade constitui a base da análise por ativação com nêutrons, um método não destrutivo de caracterização de materiais. Por meio da identificação das energias e intensidades relativas das radiações gama emitidas, é possível determinar quais elementos químicos compõem a amostra e em que proporções estão presentes.

Nessa técnica, uma fonte de nêutrons é utilizada para excitar os núcleos dos átomos que compõem o material investigado. Os núcleos excitados decaem para seus estados fundamentais, emitindo radiações gama características de cada isótopo. A análise espectrométrica dessas emissões permite não apenas identificar os elementos constituintes do material, mas também estimar suas concentrações relativas, fornecendo informações quantitativas e qualitativas sobre a composição do material (Tauhata *et al.*, 2014).

A Análise por Ativação com Nêutrons (AAN, do inglês *Neutron Activation Analysis* – NAA) apresenta diversas modalidades, cuja aplicação depende das características da fonte de nêutrons, do material-alvo, do detector de radiação e dos objetivos experimentais (Tauhata *et al.*, 2014). As principais variações são descritas a seguir:

- **NAA**: termo genérico que designa a técnica como um todo. Quando utilizado isoladamente, refere-se geralmente à análise baseada na detecção de radiações gama atrasadas (prompt), emitidas após o decaimento do radionuclídeo formado.
- **INAA** (*Instrumental Neutron Activation Analysis* – Análise Instrumental por Ativação com Nêutrons): nesta modalidade, a atividade radioativa é medida diretamente nas amostras irradiadas, sem necessidade de separação química. É amplamente utilizada por sua rapidez e simplicidade experimental.
- **RNAA** (*Radiochemical Neutron Activation Analysis* – Análise Radioquímica por Ativação com Nêutrons): envolve a separação química da amostra após a irradiação, com o objetivo de eliminar interferências ou concentrar radionuclídeos de interesse antes da medição. Essa técnica apresenta maior seletividade analítica.
- **PGNAA** (*Prompt Gamma Neutron Activation Analysis* – Análise por Ativação com Nêutrons com Raios Gama Prontos): nesta modalidade, a detecção das radiações gama prompt ocorre durante a irradiação da amostra, ou seja, quase simultaneamente à interação nêutron-núcleo. É especialmente útil para a análise de elementos com meia-vida curta ou cuja ativação produz radionuclídeos de difícil detecção posterior (Hevesy e Levi, 1936). De maneira geral, é uma técnica analítica que detecta gama pronto após a interação n-núcleo, podendo acontecer devido a captura radiativa (n, γ) ou devido ao espalhamento inelástico (n, n')

- **FNAA** (*Fast Neutron Activation Analysis* – Análise por Ativação com Nêutrons Rápidos): utiliza uma fonte de nêutrons rápidos para o processo de irradiação, sendo apropriada para elementos cujas seções de choque são mais elevadas nessa faixa de energia.
- **PFNA** (*Pulsed Fast Neutron Activation Analysis* – Análise por Ativação com Nêutrons Rápidos Pulsantes): semelhante à FNAA, porém utiliza feixes pulsados de nêutrons rápidos, permitindo melhor controle temporal das medições e maior resolução na diferenciação dos eventos de interação.
- **PFTNA** (*Pulsed Fast/Thermal Neutron Activation Analysis* – Análise por Ativação com Nêutrons Rápidos/Térmicos Pulsantes): uma variação da técnica de PGNAA que utiliza feixes pulsados de nêutrons rápidos e térmicos gerados artificialmente. Essa configuração melhora a discriminação entre os diferentes tipos de interações nêutron-núcleo, proporcionando medições mais precisas e eficientes.

Na Figura 3 é ilustrado, de forma esquemática, os principais tipos de interações entre um nêutron incidente e um núcleo-alvo, destacando os processos de captura e espalhamento inelástico que podem ocorrer durante a formação do núcleo composto.

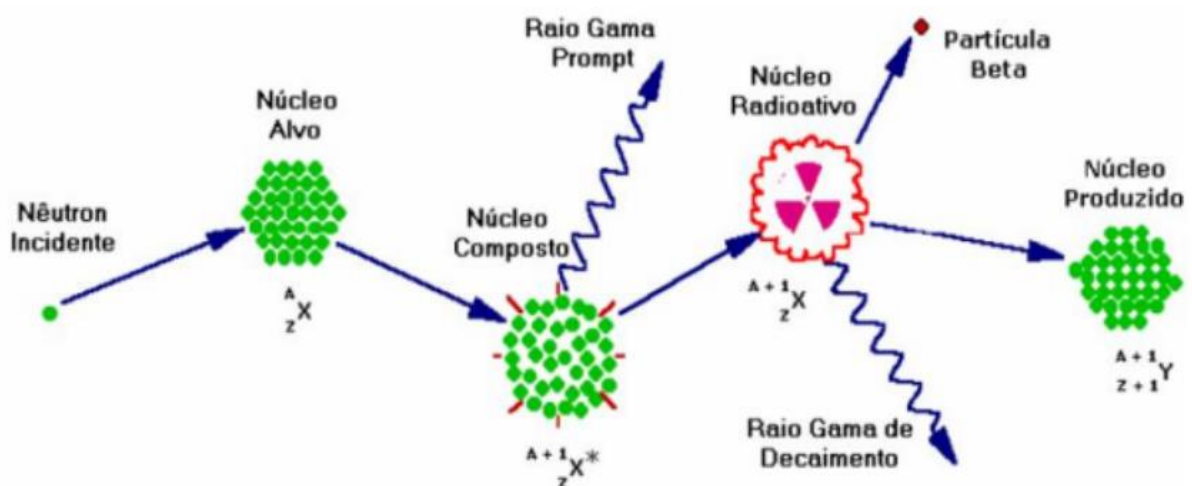


Figura 3: Representação do processo de Ativação Neutrônica PGNAA (GlascocK, 2004)

Independentemente da modalidade utilizada, o presente estudo baseou-se nos nêutrons espalhados, particularmente aqueles resultantes de processos de espalhamento elástico e

inelástico (n, n') + γ_{pronto} , como principal mecanismo de interação. Essa escolha se deve ao fato de que o espalhamento fornece informações relevantes sobre a distribuição e composição dos elementos no material-alvo, sem que ocorra a captura do nêutron e, portanto, sem a formação de radionuclídeos adicionais.

2.2.3 FONTE AMERÍCIO-BERÍLIO

Uma fonte de radiação é qualquer sistema físico capaz de emitir radiação ionizante ou não ionizante, devido a processos nucleares, atômicos ou eletromagnéticos. Sua origem pode ser natural ou artificial, e a emissão pode ocorrer de forma contínua ou pulsada, abrangendo tanto partículas (nêutrons, partículas alfas, elétrons etc.) quanto fótons (raios X, gama etc.). A radiação emitida é caracterizada pela energia (E), tipo (partícula ou fóton) e espectro (discreto ou contínuo). Dentre as fontes naturais destacam-se as cósmicas, terrestres (ambientais), internas (do corpo humano) e atmosféricas. Já as fontes artificiais incluem as radioisotópicas, de fissão nuclear, aceleradores de partículas, geradores de raios X e fontes de nêutrons. Energeticamente, uma fonte é descrita pela taxa de emissão de energia por unidade de tempo, definida como sua atividade (A), expressa pela Equação 5.

$$A = \lambda N$$

Equação 5

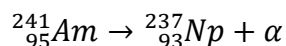
Em que:

A: atividade (Bq);

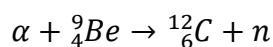
λ : constante de decaimento do radionuclídeo;

N: número de núcleos radioativos presentes.

A fonte de radiação Amerício-Berílio ($^{241}\text{Am-Be}$) é uma de fonte de nêutrons que opera a partir de reações nucleares induzidas pela emissão de partículas alfa (α ou núcleo de ^4He) do Amerício-241, que interagem com o Berílio-9, produzindo nêutrons rápidos e radiação gama. Apesar de a radiação alfa apresentar baixa penetração, os nêutrons gerados possuem alta energia e penetração, representando risco biológico significativo (Zamboni e Genizini, 2007). As reações fundamentais associadas ao funcionamento dessa fonte são descritas pelas Equações 6 e 7.



Equação 6



Equação 7

Após a interação, ocorre a emissão de nêutrons rápidos e fótons gama provenientes do decaimento do amerício e dos núcleos ativados da amostra. Esses núcleos ativados podem ainda emitir radiação beta subsequente à captura de nêutrons, o que é explorado em análises espectrométricas.

A fonte ${}^{241}\text{Am-Be}$ é amplamente utilizada como fonte de nêutrons rápidos em aplicações industriais, científicas e de segurança nuclear. Nas inspeções industriais, é empregada em detectores de nêutrons e radiografia industrial, além de aplicações em medições de porosidade e análises geológicas no setor de petróleo. Em laboratórios, é usada no desenvolvimento de experimentos com nêutrons rápidos, em estudos de seções de choque, e na detecção de nêutrons térmicos após moderação. Na área de segurança nuclear, é utilizada em instrumentos de monitoração e calibração.

Os nêutrons emitidos por uma fonte ${}^{241}\text{Am-Be}$ possuem energias típicas de 1 MeV a 12 MeV, com uma energia média de aproximadamente 4,5 MeV. Esses nêutrons são classificados como rápidos, apresentando altas velocidades e energias comparáveis às de reações de fissão nuclear e de espectro contínuo (ISO 8529-1, 2001; Thomas *et al.*, 2018).

Na Tabela 1 é apresentado as categorias de nêutrons, considerando a energia cinética e velocidade associada.

Tabela 1: Categoria de energia de nêutrons.

Categoria de Nêutrons	Energia (eV)	Velocidade (m/s)	Origem observada
Rápidos	$0,5 \times 10^6 - 12 \times 10^6$	$10^6 - 10^7$	Diretos da fonte Am-Be
Epitérmicos	$1 - 100 \times 10^3$	$10^4 - 10^6$	Parcialmente Moderados
Térmicos	$\sim 0,025$	~ 2200	Totalmente Moderados (300 K)

Os nêutrons térmicos estão em equilíbrio térmico com o meio e seguem a distribuição de Maxwell em função da temperatura (T), com energia cinética típica de 0,025 eV à

temperatura ambiente de 300 K, embora a faixa de energia térmica seja menor que 5 eV como apresentado em (IAEA, 2023). Nessa faixa de energia, predominam espalhamentos elásticos, com baixa transferência de energia, não havendo alteração estrutural do núcleo (Attix, 2004; Knoll, 2010).

Quando a energia do nêutron é suficientemente alta, o espalhamento inelástico ocorre preferencialmente, gerando núcleos excitados que decaem rapidamente por emissão de radiação gama imediata (*prompt-gamma*). Esses processos são característicos de fontes como o $^{241}\text{Am-Be}$, que atingem energias superiores a 10 MeV, permitindo a ocorrência de reações do tipo $(n, 2n)$ (Ito et al., 2023; Kluge e Weise, 1982).

Neste trabalho, as simulações utilizaram a biblioteca de seções de choque de nêutrons de energia contínua do Arquivo de Dados Nucleares Avaliados B-VI (ENDF/B-VI). O espectro de energia da fonte de $^{241}\text{Am-Be}$ foi obtido com base na norma ISO 8529-1 (ISO 8529-1:2001, 2001; Ito et al., 2023; Thomas et al., 2018). A Figura 4 apresenta o espectro típico de energia da fonte $^{241}\text{Am-Be}$.

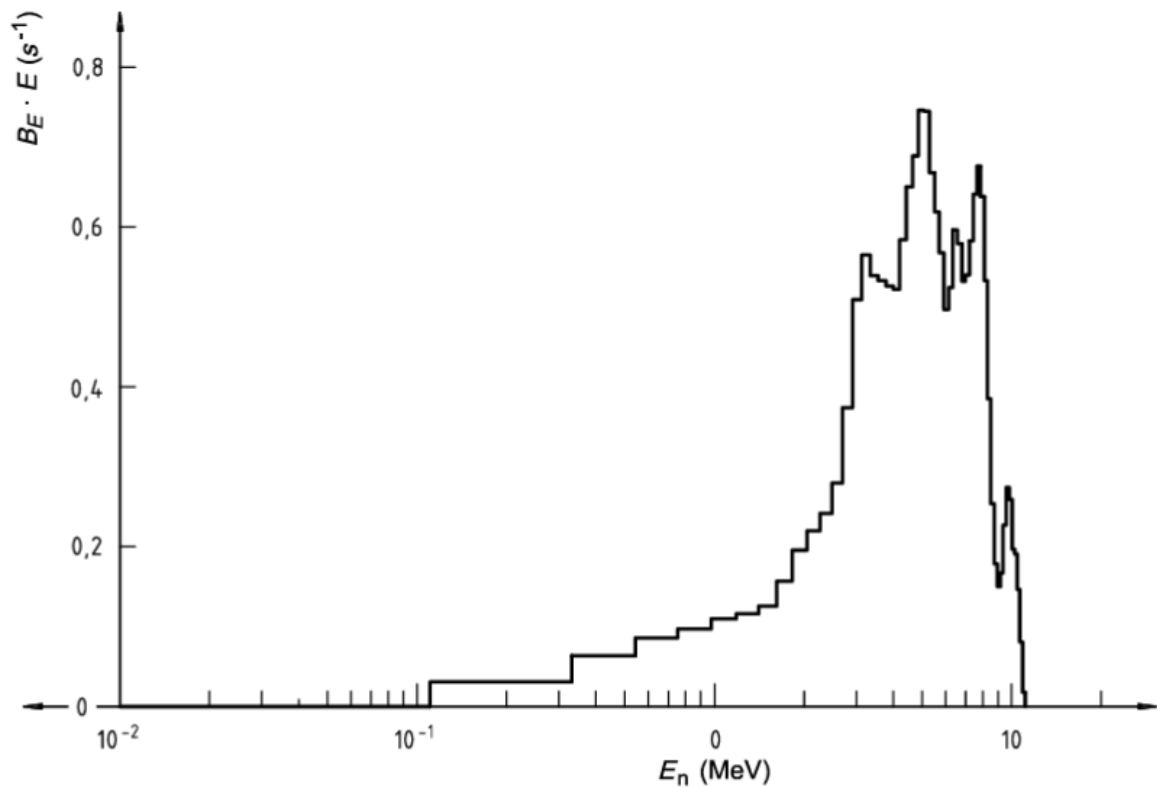


Figura 4: Espectro de energia da fonte $^{241}\text{Am-Be}$ (ISO 8529-1:2001, 2001)

2.3 MONTE CARLO

2.3.1 CONTEXTUALIZAÇÃO HISTÓRICA

A simulação Monte Carlo tem raízes históricas antigas, possivelmente remontando ao trabalho do Conde de Buffon, em 1772, quando utilizou amostragem aleatória para resolver problemas matemáticos. Já no início do século XX, o físico Enrico Fermi, um dos expoentes da física nuclear, empregava técnicas rudimentares de sorteio estatístico antes mesmo da formalização do método, aplicando cálculos aleatórios para resolver problemas de física nuclear quando os métodos analíticos eram inviáveis (Goorley *et al.*, 2016).

Durante a Segunda Guerra Mundial, Fermi integrou-se à equipe de cientistas do Laboratório Nacional de Los Alamos (do inglês *Los Alamos National Laboratory* – LANL), encarregada de desenvolver a primeira bomba atômica. Nesse contexto, Stanislaw Ulam observou o potencial dos computadores eletromecânicos utilizados em estudos de implosão, nos quais se aplicavam técnicas de amostragem estatística até então consideradas impraticáveis devido à sua complexidade manual. Com o avanço dos computadores, esses métodos tornaram-se viáveis. Ulam, em colaboração com John von Neumann e Nicholas Metropolis, percebeu que tais métodos eram análogos aos jogos de azar, nos quais a aleatoriedade pode ser descrita estatisticamente por distribuições de probabilidades. Essa associação inspirou Metropolis a nomear o método como “Monte Carlo”, em referência à cidade europeia famosa por seus cassinos, onde a aleatoriedade é um elemento central dos jogos de sorte. Após a Segunda Guerra Mundial, a técnica foi sistematizada no LANL e passou a ser amplamente aplicada a diversos ramos da ciência, incluindo a física nuclear (Goorley *et al.*, 2016).

Paralelamente, uma equipe liderada por John Mauchly desenvolvia o primeiro computador eletrônico, o ENIAC (*Electronic Numerical Integrator and Computer*), na Universidade da Pensilvânia. Mauchly observou que, assim como contadores Geiger registravam eventos de radiação, esses dispositivos poderiam realizar operações aritméticas para resolver problemas matemáticos. Em 1945, John von Neumann, Stan Frankel e Nicholas Metropolis visitaram a universidade para avaliar o potencial ENIAC em cálculos relacionados a armas termonucleares, com colaboração com Edward Teller, em Los Alamos (Goorley *et al.*, 2016).

Após o término da guerra e o início do projeto de desenvolvimento de armas termonucleares, o método de Monte Carlo foi formalmente utilizado em 1947 para resolver

problemas de difusão e multiplicação de nêutrons em dispositivos de fissão – fato registrado como a primeira aplicação do método. Nesse mesmo ano, Fermi desenvolveu o FERMIAC (Monte Carlo *trolley*), um dispositivo mecânico projetado para rastrear, de forma estatística, o transporte de nêutrons através de materiais fissionáveis (Goorley *et al.* 2016).

Em 1948, Ulam relatou à Comissão de Energia Atômica dos EUA que o método Monte Carlo já estava sendo aplicado com sucesso não apenas a problemas de fissão e fusão nuclear, mas também a chuvas de raios cósmicos e equações diferenciais parciais. No final da década de 1940 e início da de 1950, diversos artigos científicos consolidaram o método como uma ferramenta robusta para resolver problemas de transporte de radiação e interação partícula-matéria (Goorley *et al.*, 2016).

Entre as implementações computacionais modernas do método, destacam-se os seguintes códigos:

- MCNP (*Monte Carlo N-Particle*) – amplamente utilizado em transporte de nêutrons e fótons (Briesmeister, 1997),
- GEANT4 – desenvolvido para simulações em física de partículas e aplicações médicas (Agostinelli *et al.*, 2003),
- EGSnrc – especializado em transporte de elétrons e fótons voltado à dosimetria médica (Kawrankow, 2017).

Cada código apresenta particularidades de implementação e biblioteca nucleares específicas, adequadas a diferentes domínios da física aplicada.

2.3.2 O CÓDIGO MCNP6

O MCNP (*Monte Carlo N-Particle*) é um código de simulação baseado em amostragem estatística para se estudar o transporte de partículas de radiação através da matéria. Originalmente desenvolvido pelo Monte Carlo Group – da Divisão de Física Aplicada (Divisão X) do Laboratório Nacional de Los Alamos, o MCNP passou por diversas versões, sendo a mais recente o MCNP6. O código é distribuído de forma controlada pelo *Radiation Safety Information Computational Center (RSICC)*, em Oak Ridge nos EUA, e pelo *OECD/NEA Data Bank*, em Paris na França (Goorley *et al.*, 2016).

O código MCNP utiliza Geradores de Números pseudo-Aleatórios (GNA) para simular eventos de interação de partículas com base nas distribuições de probabilidade que regem os

processos físicos. Sua estrutura lógica é implementada por meio de cartões de entrada (*input cards*), que descrevem as condições do problema físico, incluindo a geometria, os materiais, as fontes e os detectores.

Os principais cartões são:

- Cartão de Célula (*Cell cards*): definem as células (regiões no espaço) com suas respectivas densidades;
- Cartão de Superfície (*Surface cards*): descrevem as superfícies geométricas (planos, esferas, cilindros etc.) e seus posicionamentos no espaço tridimensional;
- Cartão de Dados (*Data cards*): especificam parâmetros de simulação, como: o tipo de partícula, fonte de radiação, materiais, *tallies* (detectores virtuais), e condições de corte (*cut-off*).

Exemplos de comandos importantes incluem:

- MODE N P E – define o tipo de partícula: N (nêutrons), P (fótons) e E (elétrons);
- IMP – controla a importância de cada partícula em diferentes regiões;
- SDEF – define as características da fonte de radiação;
- F (ou F_n , E_n) – especifica o tipo de *tally* (fluxo, energia depositada, contagem etc.);
- NPS – define o número de histórias (partículas simuladas).

No MCNP, os resultados dos *tallies* são normalizados por partícula fonte simulada e apresentados juntamente com o erro relativo estimado R , definido como o desvio padrão da média dividido pelo valor médio do tally, correspondendo a uma incerteza estatística de 1σ . Esse erro é calculado a partir da média e do segundo momento do tally, considerando as correlações entre contribuições de uma mesma história de Monte Carlo.

Para *tallies* bem-comportados, o erro relativo é inversamente proporcional à raiz quadrada do número de histórias simuladas, de modo que a redução de R exige um aumento quadrático do número de histórias. O valor de R permite a construção de intervalos de confiança, sendo esperado que o valor verdadeiro esteja contido nos intervalos $x(1 \pm R)$ e $x(1 \pm 2R)$ com probabilidades aproximadas de 68% e 95%, respectivamente. Ressalta-se, contudo, que esses intervalos refletem apenas a precisão estatística da simulação, não garantindo a exatidão física dos resultados. A qualidade estatística dos resultados obtidos por

simulação Monte Carlo pode ser avaliada por meio do erro relativo R , cujos intervalos de interpretação são apresentados na Tabela 2.

Tabela 2: Diretrizes para a interpretação do erro relativo R em simulações Monte Carlo

Intervalo de (R)	Qualidade do tally
$0,5 \leq (R) \leq 1,0$	Não significativo
$0,2 \leq (R) < 0,5$	Ordem de grandeza (fator de poucos)
$0,1 \leq (R) < 0,2$	Questionável
$(R) < 0,10$	Geralmente confiável
$(R) < 0,05$	Geralmente confiável para detectores pontuais

O código MCNP6 é amplamente validado e reconhecido por sua precisão em modelar geometrias tridimensionais complexas, sendo aplicado em proteção radiológica, dosimetria, projeto de reatores, blindagens, sistemas de detecção e física médica (Goorley *et al.* 2016). Os intervalos de energia que o código pode representar são:

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

2.4 REDES NEURAIS ARTIFICIAIS (RNAs)

2.4.1 CONTEXTUALIZAÇÃO HISTÓRICA

O conceito de rede neural artificial (RNA) se deu, inicialmente, a partir da analogia com o cérebro humano, um sistema altamente complexo composto por neurônios biológicos, dendritos, axônio e sinapses. Nessa estrutura, os dendritos recebem sinais eletroquímicos; o corpo celular integra esses sinais; e, quando a soma ultrapassa um determinado limiar, um impulso elétrico é transmitido através do axônio até as sinapses, comunicando-se com outros neurônios. Essas redes biológicas apresentam processamento paralelo e não linear, o que lhes confere a capacidade de auto-organização e aprendizado (Haykin, 1994). É esse paralelismo que permite ao cérebro humano armazenar, representar e acessar o conhecimento adquirido

(Beale e Jackson, 1990). A principal característica das RNAs é a capacidade de aprendizado supervisionado por meio de exemplos. A RNA pode identificar padrões e comportamentos a partir de um conjunto de treinamento, generalizando o conhecimento adquirido para novas situações não incluídas nesse conjunto. Cada neurônio artificial atua como uma unidade simples de processamento, responsável por mapear dados de entrada e saída por meio de funções matemáticas lineares ou não-lineares. Os modelos iniciais foram projetados de modo que cada neurônio recebesse n valores de entrada (x_1, x_2, \dots, x_n) e os associa-se a uma saída y_t .

O primeiro modelo de neurônio foi proposto por McCulloch e Pitts (1943), representando um neurônio de natureza linear. Posteriormente, Hebb (1949) formulou a hipótese de que o aprendizado ocorre pelo fortalecimento das conexões sinápticas entre neurônios, processo conhecido como de Hebb, fundamental para desenvolvimento posterior da inteligência artificial. Com base nesses princípios, Rosenblatt (1958) propôs o modelo *Perceptron*, em que o fortalecimento das conexões é representado por pesos sinápticos (w_i), que ponderam as entradas para calcular uma saída, como apresentado na Equação 8.

$$y_t = g \left(w_0 + \sum_{i=1}^n x_i w_i \right)$$

Equação 8

Em que:

y_t : saída da rede neural;

g : função de ativação não linear;

t : termo de bias;

$\sum_{i=1}^n x_i w_i$: combinação linear entradas ponderadas

A Figura 5 apresenta a estrutura de um *Perceptron* simples, considerado a unidade básica das RNAs (Dam, 2024).

Esse modelo é composto por um conjunto de entradas x_1, x_2, \dots, x_m , cada uma ponderada por um peso sináptico $w_{t1}, w_{t2}, \dots, w_{tm}$. A soma ponderada dessas entradas é acrescida de um termo de bias (viés) (θ_t) e processada por uma função de ativação $\varphi(\cdot)$, responsável por gerar a saída y_t . Essa arquitetura permite que o *perceptron* realize tarefas de classificação linear e reconhecimento de padrões simples.

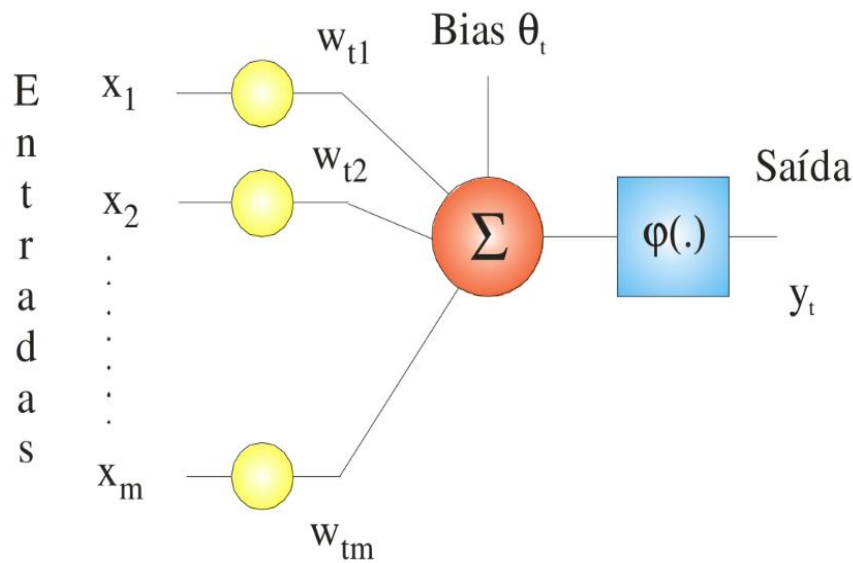


Figura 5: Perceptron simples (Dam, 2024)

A publicação da obra *Perceptrons*, Minsky e Papert evidenciou as limitações dos *perceptrons* de camada única, especialmente quanto à representação de funções não lineares, contribuindo para o início do período conhecido como “inverno da inteligência artificial”, período de estagnação nas pesquisas da área (Minsky e Papert, 1988).

O renascimento das RNAs ocorreu com o desenvolvimento do algoritmo de retropropagação do erro (*backpropagation*), introduzido por Rumelhart *et al* (1986). e anteriormente descrito por Werbos (1974). Esse algoritmo ajusta iterativamente os pesos sinápticos de uma rede multicamadas de modo a minimizar o erro entre a saída real e a desejada (*target*).

Assim, as redes *Perceptron* multicamadas (do inglês *Multilayer Perceptrons* – MLPs) tornaram capazes de representar funções complexas e resolver problemas de regressão e classificação. O algoritmo de retropropagação de erros baseia-se na regra da cadeia para calcular gradientes dos pesos com base na função de perda (*loss function*), sendo amplamente aplicável independentemente do tipo da tarefa.

Até a década de 2000, as RNAs eram limitadas por restrições computacionais, especialmente pela capacidade das unidades de processamento gráfico (do inglês *Graphics Processing Unit* – GPU). Com o aumento da profundidade das redes e o uso de algoritmos de retropropagação clássicos, surgiu o problema do desaparecimento de gradiente (*vanishing gradient*), que levou à saturação de neurônios e dificultou o aprendizado em redes neurais profundas (do inglês *Deep learning Neural Network* – DNN) (Glorot e Bengio, 2010). A

solução para esse problema veio com a proposição de novas funções de ativação retificadas, como:

- ReLU (Rectified Linear Unit (ReLU) (Glorot e Bengio, 2010),
- ELU (Exponential Linear Unit) (Clevert *et al.*, 2016),
- SELU (Scaled Exponential Linear Unit (Klambauer *et al.*, 2017),
- Swish (Ramachandran *et al.*, 2017).

Essas funções, combinadas com o avanço das GPUs e TPUs (do inglês *Tensor Processing Unit*) e o surgimento várias bibliotecas de aprendizado profundo como TensorFlow, Keras e PyTorch impulsionaram o desenvolvimento do aprendizado profundo (*Deep Learning*) (Chollet, 2021).

Atualmente, as Redes Neurais Profundas (DNNs) constituem o núcleo de diversas aplicações científicas e tecnológicas, permitindo o tratamento de grandes volumes de dados e a modelagem de fenômenos complexos, como os estudados neste trabalho, envolvendo simulações Monte Carlo e análise de transporte de radiação.

2.4.2 TIPOS DE RNA

As RNAs podem ser classificadas de acordo com a arquitetura, considerando parâmetros como número de camadas ocultas, funções de ativação, inicialização de pesos, divisão de dados, hiperparâmetros e métricas de avaliação. Quanto ao número de camadas, podem ser categorizadas em: simples (*Single-Layer Perceptron – SLP*), rasas (*Shallow Neural Network – SNN*) e profundas (DNN).

SLP: Foi o primeiro modelo formal, proposto na década de 1950 por Rosenblatt. É a forma mais básica de RNA, composta por uma camada de entrada e uma camada de saída, sem camadas escondidas intermediárias. Cada neurônio recebe entradas, aplica pesos e passa o resultado por uma função de ativação. É adequada apenas para problemas linearmente separáveis (Rosenblatt, 1958).

SNN: Possui uma única camada oculta entre a entrada e saída, permitindo a modelar relações não-lineares e apresentando maior capacidade que uma rede simples. É indicada para problemas não linearmente separáveis, mantendo, porém, profundidade limitada.

DNN: É um conceito mais geral, incluindo múltiplas camadas ocultas entre entrada e saída. Abrange MLPs profundas e arquiteturas mais complexas, como *Convolutional Neural Networks* (CNNs) e *Recurrent Neural Networks* (RNNs). É mais associada ao uso moderno e prático da inteligência artificial e pode incluir camadas parcialmente conectadas (Dam, 2024).

As funções de ativação são elementos essenciais das RNAs, introduzindo não linearidade no processamento dos neurônios e permitindo que a rede modele relações complexas entre entradas e saídas. Entre essas, as funções de ativação retificadas, como a ReLU (*Rectified Linear Unit*) e suas variantes, destacam-se por sua eficiência computacional e pela capacidade de mitigar o problema do gradiente saturado em redes profundas. Mais detalhes sobre as funções de ativação retificadas podem ser encontrados no Anexo 1.

A arquitetura é denominada *feedforward* quando o fluxo de dados ocorre unidirecionalmente: entrada → camadas ocultas → saída, sem ciclos, com aprendizado realizado pelo algoritmo de retropropagação para ajuste de pesos.

A Figura 6 ilustra a estrutura de uma rede neural *feedforward*, composta por camadas de entrada, oculta e saída. As variáveis de entrada são ponderadas por pesos e processadas por neurônios com funções de ativação, que introduzem não linearidade. Os neurônios de saída produzem as respostas do modelo, ajustadas pelo processo de retropropagação de erros para minimizar o erro.

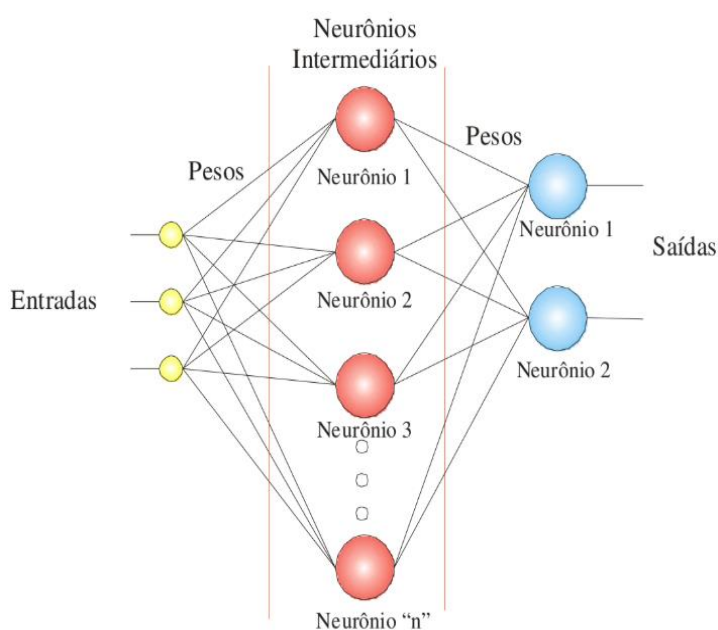


Figura 6: Esquema de uma rede neural com 3 entradas, 1 camadas ocultas e 2 saídas (Dam, 2024)

As RNAs podem ser treinadas por diferentes estratégias, sendo as mais comuns supervisionado e não supervisionado. No treinamento supervisionado, a rede é alimentada com um conjunto de dados de entrada acompanhado das saídas desejadas, permitindo que o modelo aprenda a mapear corretamente entradas para saídas por meio da minimização de um erro pré-definido, como acontece em tarefas de classificação e regressão. Já no treinamento não supervisionado, a rede recebe apenas dados de entrada, sem informações sobre os resultados esperados, sendo capaz de identificar padrões, agrupamentos ou estruturas subjacentes nos dados, como na análise de *clusters* ou na redução de dimensionalidade. Ambos os tipos de treinamento são fundamentais para diferentes aplicações de RNAs, dependendo da disponibilidade de dados rotulados e do objetivo do estudo.

2.4.3 FUNDAMENTOS DE UMA REDE NEURAL PROFUNDA

O aprendizado profundo é um ramo do aprendizado de máquina destinado a aprender representações de dados por meio de DNNs, destacando o aprendizado em sucessivas camadas de padrões, conhecido como aprendizagem hierárquica (Chollet, 2021). A premissa dessa abordagem é que conceitos complexos podem ser aprendidos a partir de conceitos mais simples (Goodfellow *et al.*, 2016). O funcionamento de uma DNN pode ser dividido em duas fases principais:

Fase de treinamento: Também conhecida de fase de aprendizado, é quando a rede reconhece padrões e ajusta seus pesos por meio de um processo iterativo, utilizando algoritmos de treinamento. Cada conexão entre neurônios possui um peso escalar que define a importância relativa dos sinais de entrada ou saída, permitindo que a rede aprenda a tomar decisões corretas com base em exemplos previamente fornecidos.

Fase de operação: Também conhecida como fase *offline*, é a etapa em que a rede já treinada é utilizada para tomar decisões em novas situações do “mundo real”. Nessa fase, o objetivo é aplicar o conhecimento adquirido durante o treinamento para generalizar a novos dados, sem a necessidade de utilizar novamente o conjunto de treinamento.

Para implementar o aprendizado hierárquico, as DNNs são compostas por múltiplas¹ camadas de unidades de processamento parametrizadas, chamadas neurônios, capazes de realizar transformações não lineares. A estrutura de uma DNN consiste em três partes principais: a camada de entrada, camadas intermediárias e a camada de saída. Na camada de entrada recebe os sinais, que são transformados sucessivamente pelas camadas intermediárias através de pesos sinápticos e funções de ativação. Por meio dessas transformações, a rede aprende a representar relações complexas. A camada de saída produz os resultados finais, ajustados pelo algoritmo de retropropagação de erros para minimizar o erro e melhorar a capacidade de generalização (LeCun, 2015).

O algoritmo de otimização mais utilizado em redes profundas é o Adam² (*Adaptive Moment Estimation*), que combina gradiente descendente estocástico com estimativas adaptativas de momentos de primeira e segunda ordem, ajustando individualmente a taxa de aprendizado de cada parâmetro (Kingma e Ba, 2015). Durante o treinamento, o algoritmo calcula o gradiente da função de erro em relação aos pesos e os atualiza para minimizar a função de perda (*loss function*). O ajuste adequado dos pesos reduz o erro e aumenta a capacidade de generalização do modelo, tornando-o confiável para prever dados de entrada desconhecidos.

Para evitar o sobreajuste (*overfitting*), é comum aplicar validação cruzada, dividindo o conjunto de dados em treinamento, validação e teste. O conjunto de validação monitora a eficiência da rede durante o treinamento e indica quando interromper o aprendizado caso o erro comece a aumentar. O conjunto de teste é utilizado posteriormente para avaliar o desempenho final da rede em dados não vistos anteriormente.

A complexidade do problema determina o número de camadas intermediárias e de neurônios por camada. A escolha do conjunto ideal de hiperparâmetros é uma tarefa complexa e demanda técnicas de otimização, como a biblioteca Optuna (Akiba *et al.*, 2019) que implementa métodos Bayesianos (Snoek *et al.*, 2012) e *Tree-Structured Parzen Estimator* (TPE) (Bergstra e Bengio, 2011) para explorar de forma eficiente os espaços de hiperparâmetros, integrando-se a bibliotecas populares como TensorFlow (Abadi *et al.*, 2016) e scikit-learn (Pedregosa *et al.*, 2011).

¹ Redes são geralmente consideradas profundas quando possuem mais de duas camadas intermediárias e utilizam funções de ativação não-lineares diferenciáveis, permitindo representar relações complexas com maior eficiência (Lecun *et al.*, 2015).

² É um otimizador que ajusta dinamicamente a taxa de aprendizado de cada parâmetro, combinando o conceito de momentum (média móvel dos gradientes) com a média móvel dos gradientes ao quadrado. Isso resulta em convergência mais rápida e estável, sendo amplamente utilizado em redes neurais profundas.

2.4.4 MÉTRICAS ESTATÍSTICAS

Neste trabalho, as métricas estatísticas têm como objetivo quantificar o desempenho do treinamento e da generalização de uma DNN, medindo o grau de discrepância entre os valores reais e os valores preditos. Elas fornecem uma estimativa quantitativa da capacidade preditiva do modelo e auxiliam na escolha do conjunto de hiperparâmetros mais eficiente. As métricas mais utilizadas em problemas de regressão incluem MSE, RMSE, MAE e MAPE, descritas a seguir:

MSE – Mean Squared Error (Erro Quadrático Médio)

O MSE penaliza erros grandes de forma quadrática, tornando-se particularmente útil quando se deseja que discrepâncias de grande magnitude tenham maior influência na atualização dos parâmetros. Essa métrica é diferenciável e, portanto, adequada para métodos de otimização baseados em gradiente. Sua formulação é apresentada na Equação 9.

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_{real} - x_{pred})^2$$

Equação 9

RMSE – Root Mean Squared Error (Raiz do Erro Quadrático Médio)

O RMSE corresponde à raiz quadrada do MSE, mantendo assim a unidade dos dados reais, o que facilita sua interpretação prática. É uma métrica sensível a erros de maior magnitude, sendo recomendada quando se deseja dar maior peso a desvios extremos. Sua formulação é expressa pela Equação 10.

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_{real} - x_{pred})^2}$$

Equação 10

MAE – Mean Absolute Error (Erro Médio Absoluto)

O MAE calcula a magnitude média dos erros em termos absolutos, penalizando as discrepâncias de forma linear. É mais robusto a *outliers* do que o MSE, embora menos sensível a grandes erros. Essa métrica é amplamente utilizada quando se deseja uma medida simples e interpretável da precisão média do modelo. Sua formulação é dada pela Equação 11.

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |x_{real} - x_{pred}|$$

Equação 11

MAPE – Mean Absolute Percentage Error (Erro Percentual Absoluto Médio)

O MAPE expressa o erro médio em termos percentuais, permitindo avaliar a precisão relativa das previsões em relação aos valores reais. É útil quando se deseja comparar desempenho entre conjuntos de dados de diferentes escalas. Contudo, apresenta limitações quando os valores reais se aproximam de zero, o que pode causar distorções percentuais. Sua formulação é apresentada na Equação 12.

$$MAPE(\%) = \frac{100}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{x_{real} - x_{pred}}{x_{pred}} \right|$$

Equação 12

CAPÍTULO III

3 METODOLOGIA

Este capítulo apresenta a metodologia adotada para estimar as frações volumétricas em um sistema bifásico sob regime de fluxo anular, por meio de simulação matemática utilizando o código de transporte de radiação MCNP6 (Monte Carlo N-Particle, versão 6) (Goorley, 2016; Moffitt, 2016). O método baseia-se na análise de espalhamento por nêutrons, associada à classificação dos nêutrons em térmicos, epitérmicos e rápidos cujos valores de secção de choque estão disponíveis na biblioteca *Evaluated Nuclear Data File* (ENDF/B-VI) (Ito *et al.*, 2023; Thomas *et al.*, 2018). Para a análise, foi desenvolvida uma geometria de medição na qual os nêutrons, em suas diferentes classificações, foram utilizados como entrada para as redes neurais profundas com o objetivo de prever as frações volumétricas.

3.1 DESENVOLVIMENTO DO MODELO MATEMÁTICO

A primeira etapa consistiu na elaboração do desenvolvimento de um modelo geométrico de medição. Adotou-se uma fonte plana de $^{241}\text{Am-Be}$ (4 cm^2) emissora de nêutrons, posicionada na origem do sistema de coordenadas, e um tubo de ferro com diâmetro externo de 13 cm e altura de 60 cm, preenchido com uma mistura bifásica. A configuração completa (fonte, tubo e detector) está ilustrada na Figura 7.

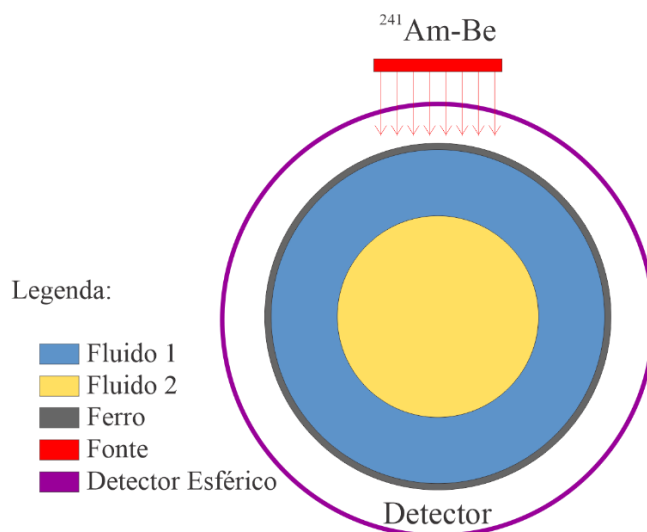


Figura 7: Geometria do tubo vertical bifásico (Fonte: O Autor).

Os fluidos utilizados nos modelos estão listados na Tabela 3 (McConn *et al.*, 2011).

Tabela 3: Fluidos utilizados nos modelos.

Modelo	Elementos	Fluido	Fórmula	Densidade (g/cm ³)
1	H, O	Água	H ₂ O	0,998207
2	H, C, S	Óleo Combustível Mexicano	-	0,975
3	H, C, N, S	Óleo Combustível Texano	-	0,875
4	Fe	Ferro	-	7,874
5	C, N, O, Ar	ar seco	-	0,001205
6	H, C	Gás Metano	CH ₄	0,000667

Um feixe polienergético de nêutrons incide ortogonalmente ao eixo do tubo. O fluxo dos nêutrons espalhados, produzido pela interação dos nêutrons com o tubo e com os fluidos, é registrado por um detector idealizado de geometria esférica com cobertura 4π , permitindo a detecção de nêutrons em todas as direções e energias. Essa configuração foi adotada com o objetivo de maximizar a eficiência estatística e minimizar o custo computacional, embora represente uma simplificação em relação a sistemas experimentais reais. Após a geração do modelo, o *software* ligado ao MCNP6 conhecido como Visual Editor (VISED) (Visual Editor, 2025) foi utilizado para análise visual e verificação de eventuais erros geométricos.

A resposta foi quantificada utilizando o cartão *tally* F1 do MCNP6, que contabilizar a passagem de nêutrons por uma superfície, sendo particularmente adequado à geometria esférica de detecção 4π adotada neste trabalho. Essa abordagem permite a obtenção direta dos espectros energéticos dos nêutrons espalhados, os quais foram posteriormente classificados em três faixas de energia representativas do espectro neutrônico (IAEA, 2023).

- Térmicos ($0 \text{ eV} \leq E \leq 1 \text{ eV}$),
- Epitérmicos ($1 \text{ eV} \leq E \leq 100 \text{ keV}$)
- Rápidos ($100 \text{ keV} \leq E \leq 12 \text{ MeV}$).

Cada simulação foi executada com número de histórias de 1×10^8 , valor determinado empiricamente com base no valor do erro relativo associado, e os resultados são normalizados pelo total de histórias. É importante mencionar que as simulações ficaram na faixa de erro relativo adequado de acordo com as especificações do manual do código (Goorley *et al.*, 2016).

Três modelos de regime anular foram elaborados, variando-se os fluidos, conforme Tabela 4.

Tabela 4: Modelos do regime de anular com diferentes fluidos.

Modelo	Combinação
1	Água (filme) + ar seco (centro)
2	Óleo combustível texano (filme) + gás metano (centro)
3	Água salgada (filme) + óleo combustível mexicano (centro)

O regime de fluxo anular bifásico é caracterizado por uma fase líquida em forma de filme aderido à parede do tubo e uma fase gasosa ou líquida fluindo no centro. As denominações filme e centro indicam apenas a posição das fases dentro da tubulação.

Modelo 1: Representa um modelo simplificado com aplicações em sistemas de transferência de calor. Valores grandes de fração de vazio, neste caso, só se aplica para avaliar a resposta da rede neural profunda.

Modelo 2: Relaciona-se ao transporte de petróleo e seus derivados.

Modelo 3: Aplicável à separação óleo-água e controle de emulsões.

Com vistas a aplicações práticas, é necessário avaliar a sensibilidade do sistema de detecção, de modo a garantir sua capacidade de identificar variações nessa ordem de grandeza. Assim, foram consideradas três frações volumétricas em cada modelo desenvolvido, a fim de observar o comportamento dos nêutrons no sistema. Além disso, avaliou-se a influência do ferro da tubulação pelo espalhamento de nêutrons induzida pela fonte de $^{241}\text{Am-Be}$.

3.2 DESENVOLVIMENTO DO BANCO DE DADOS DE FRAÇÕES VOLUMÉTRICAS

A segunda etapa envolveu a determinação matemática das frações volumétricas associadas às duas fases do fluido na tubulação cilíndrica. A região externa, de raio R , corresponde ao filme (FVF_1), enquanto a região interna, de raio r , representa a fase central (FVF_2), conforme ilustrado na Figura 8.

A fração volumétrica de cada fase foi obtida pela razão entre o volume correspondente e o volume total da seção transversal da tubulação, considerando a geometria anular descrita.

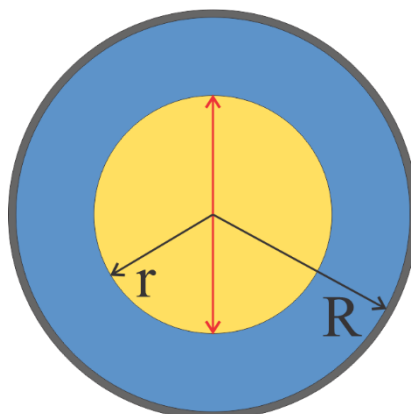


Figura 8: Representação das regiões interna (r) – FVF₂ e externa (R) – FVF₁ (Fonte: O Autor).

Dessa forma, as frações volumétricas podem ser expressas a partir das relações geométricas entre os raios interno e externo. As frações FVF₁ e FVF₂ são calculadas através da razão entre a área do anel em análise pela área total, como mostradas nas Equações 13 e 14.

$$FVF_1 = 1 - \frac{r^2}{R^2}$$

Equação 13

$$FVF_2 = \frac{r^2}{R^2}$$

Equação 14

Em que:

r – Raio da região central (núcleo);

R – Raio externo do tubo;

h – Altura do tubo.

O banco de dados foi gerado a partir de variações de 1% em cada fase gerando um conjunto de 100 simulações para cada modelo, representando diferentes frações volumétricas. Ressalta-se que, neste caso, a distribuição apresentada tem caráter exclusivamente voltado ao treinamento da rede neural.

3.3 PREDIÇÃO DE FRAÇÃO VOLUMÉTRICA: DESENVOLVIMENTO DA REDE NEURAL PROFUNDA

A terceira etapa compreendeu o desenvolvimento de uma rede neural profunda (DNN) utilizada para prever as frações volumétricas a partir dos resultados simulados no MCNP6. Foram gerados 100 conjuntos de dados variando as frações volumétricas em 1%, e os nêutrons secundários registrados pelo cartão *tally* F1 serviram como dados de entrada (*inputs*) para a rede.

As simulações estocásticas realizadas com o código MCNP6 utilizam a separação das intensidades estimadas por faixas energética, obtida por meio da definição explícita de *bins* de energia nos cartões En, permitindo a discriminação entre nêutrons térmicos, epitérmicos e rápidos. As intensidades de fluxo correspondentes a cada banda energética foram utilizadas como vetores de entrada para o treinamento na DNN, com o objetivo de capturar como variações nas frações volumétricas – refletidas em mudanças nos processos de moderação, espalhamento e atenuação – impactam a redistribuição energética dos nêutrons. Dessa forma, a DNN é capaz de aprender a relação não linear entre o espectro de nêutrons espalhados e as frações volumétricas do sistema.

Um modelo de DNN foi implementado em Python (Van Rossum e Drake, 2009), em que a camada de entrada recebeu as três faixas de energia de nêutrons, enquanto a camada de saída representou as duas frações volumétricas dos fluidos. A DNN foi configurada como um problema de regressão, utilizando o Erro Quadrático médio (MSE) como função de erro (*loss function*). Um diagrama representativo da configuração da DNN é ilustrado na Figura 9.

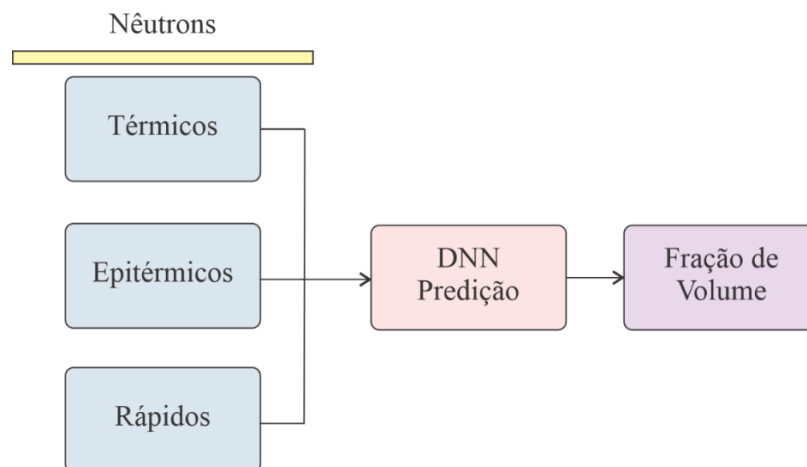


Figura 9: Representação esquemática do projeto da DNN (Fonte: O Autor).

A otimização dos hiperparâmetros (número de camadas intermediárias, neurônios e funções de ativação) foi realizada por meio da biblioteca *Optuna*, garantindo a melhor configuração para os modelos propostos. As principais características da arquitetura da DNN são apresentadas na Tabela 5.

Tabela 5: Intervalo de busca e funções de ativação analisadas durante a otimização.

Hiperparâmetro	Intervalo de busca
Número de camadas intermediárias	3 – 10
Número de neurônios por camada	100 – 1000
Funções de ativação	ReLU, ELU, SELU, Swish

Os dados foram divididos em 70% para treinamento (TRT), 20% para validação (VAL) e 10% para Teste (TST), utilizando o otimizador Adam (Kingma e Ba, 2015), variando até 5000 épocas (*epochs*). As curvas de treinamento e validação foram analisadas graficamente, com o eixo y em escala semi-logarítmica, permitindo avaliar a convergência do modelo. O desempenho das redes foi avaliado por métricas estatísticas: Erro Relativo (ER), Erro Absoluto Médio (MAE), Erro Quadrático Médio (MSE), Raiz do Erro Quadrático Médio (RMSE), Erro Percentual Absoluto Médio (MAPE) e Coeficiente de Regressão (R^2).

CAPÍTULO IV

4 RESULTADOS

Os espectros neutrônicos foram obtidos a partir de uma fonte $^{241}\text{Am-Be}$ incidindo sobre um sistema composto por um tubo cilíndrico de ferro (27 cm x 60 cm x 0,5 cm) preenchido com diferentes combinações de fluidos. As simulações foram realizadas no código MCNP6, utilizando o cartão *tally* F1, e os nêutrons espalhados pelo sistema foram registrados por um detector esférico. Foram consideradas três classes de nêutrons, segundo uma aproximação perante a classificação da IAEA-TECDOC-2025 (IAEA, 2023):

- Térmicos ($0 \text{ eV} \leq E \leq 1 \text{ eV}$)
- Epitérmicos ($1 \text{ eV} \leq E \leq 100 \text{ keV}$)
- Rápidos ($100 \text{ keV} \leq E \leq 12 \text{ MeV}$)

As faixas ultrafria, muito fria e fria foram agrupadas em uma única região térmica, de forma a evidenciar a transição dos nêutrons moderados, cujas energias se concentram em torno de 0,025 eV (temperatura ambiente). Nota-se que a faixa térmica foi estimada a começar a partir de 1 eV enquanto a faixa rápida foi estimada a começar a partir de 100 keV, diferentes da classificada teórica adotada.

Três combinações de fluidos, baseados no regime de fluxo anular, foram analisados:

Modelo 1: água – ar seco;

Modelo 2: óleo combustível texano – gás metano (gás natural);

Modelo 3: água salgada – óleo combustível mexicano.

Cada simulação foi executada com número de histórias (NPS) de 1×10^8 , escolhido empiricamente de modo a garantir baixo erro estatístico na saída do código. Os resultados são normalizados pelo NPS. O erro relativo máximo nas três faixas de energia foi de 4%, o que demonstra a confiabilidade estatística das simulações.

4.1 ANÁLISE DE SENSIBILIDADE

Para a interpretação das classes de nêutrons obtidas a partir da análise por espalhamento de nêutrons, os resultados foram organizados em histogramas, possibilitando a observação do comportamento dos nêutrons nos diferentes modelos analisados. Com o objeto de isolar a contribuição do ferro que constitui a tubulação no espalhamento de nêutrons provenientes da fonte de $^{241}\text{Am-Be}$, foi realizada uma simulação adicional considerando o tubo vazio, isto é, sem fluidos em seu interior.

Na Figura 10 é apresentada o histograma da distribuição das classes de energia dos nêutrons resultantes da interação do feixe incidente com o tubo de ferro, evidenciando a influência dos processos de espalhamento e moderação no material estrutural sobre a redistribuição energética dos nêutrons detectados.

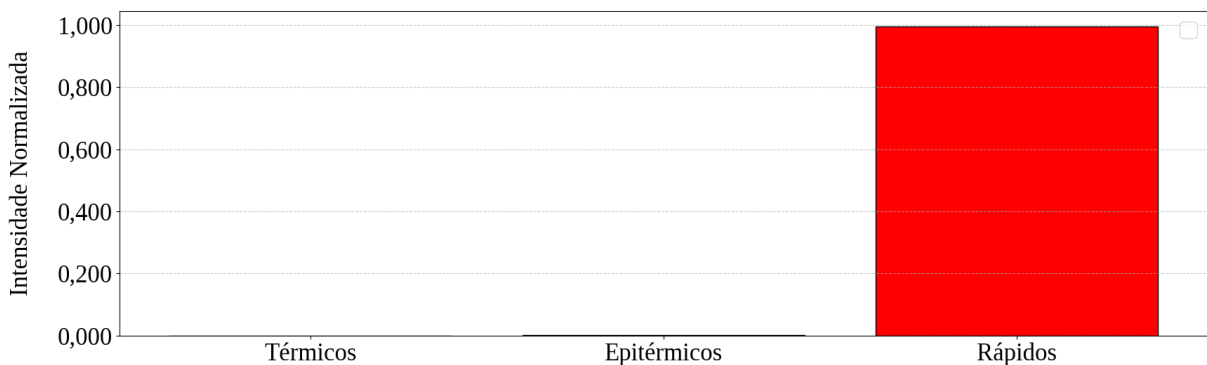


Figura 10: Histograma das classes de energia da contribuição nêutronica no ferro.

Observa-se, em todos os modelos analisados, que a contribuição do ferro para a moderação do espectro neutrônica é desprezível, resultando na predominância de nêutrons na faixa rápida. Esse comportamento é fisicamente esperado, uma vez que o ferro não atua como um moderador eficiente devido à sua elevada massa atômica, o que limita a transferência de energia cinética por colisão. O material atua predominantemente como espalhador inelástico e apresenta absorção seletiva associada a regiões de ressonância, sem promover uma redistribuição significativa do espectro para as faixas térmica ou epitérmica. Como consequência, a fração relativa de nêutrons rápidos é amplamente preservada após a interação com a tubulação de ferro.

4.1.1 MODELO 1 – ÁGUA E AR SECO

O Modelo 1 é constituído por duas fases em um regime anular, em uma geometria – Tubulação Cilíndrica. Três frações de volume foram investigadas:

- **Fração 1:** 1% de ar seco (anel interno) e 99% de água (filme externo) (Figura 11);
- **Fração 2:** 50% de ar seco (anel interno) e 50% de água (filme externo) (Figura 12);
- **Fração 3:** 100% de ar seco (anel interno) e 0% de água (filme externo) (Figura 13).

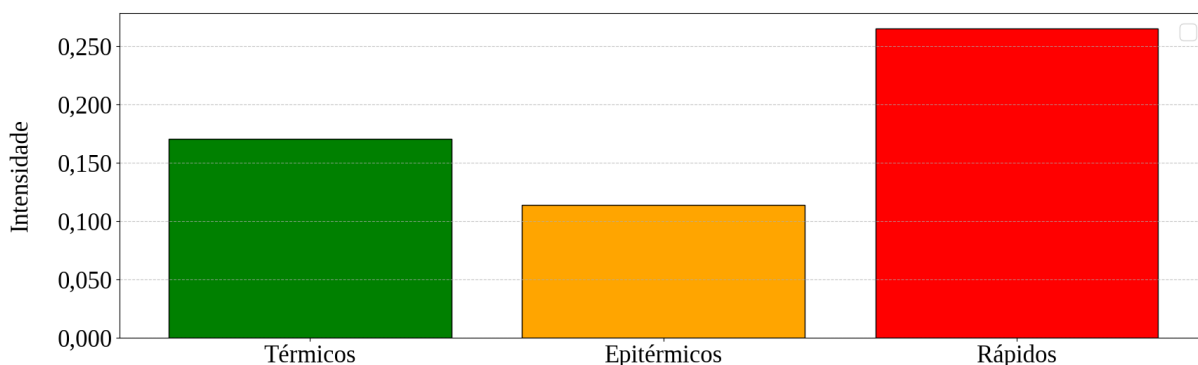


Figura 11: Histograma das classes de energia dos nêutrons do Modelo 1: 1-99%.

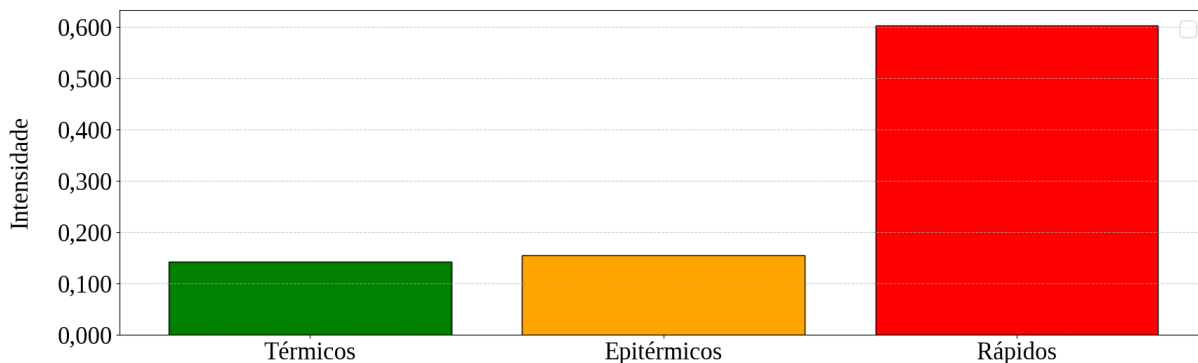


Figura 12: Histograma das classes de energia dos nêutrons do Modelo 1: 50-50%.

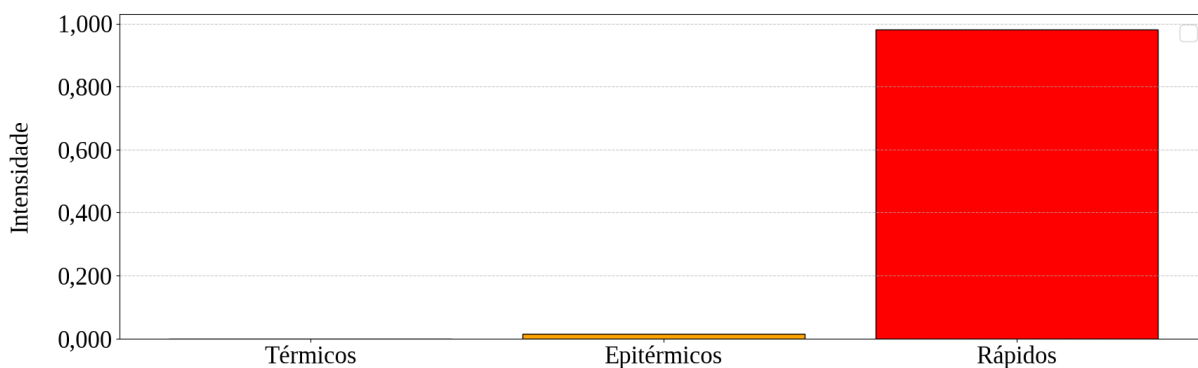


Figura 13: Histograma das classes de energia dos nêutrons do Modelo 1: 100% de ar seco.

Nos três histogramas observou-se uma clara tendência de endurecimento espectral à medida que a fração de ar seco aumenta, ou seja, ocorre um aumento da população de nêutrons rápidos em detrimento dos nêutrons térmicos e epitérmicos.

Na primeira fração escolhida do modelo 1 representado na Figura 11 (1% – 99%), o histograma apresenta uma distribuição de nêutrons na qual os nêutrons térmicos correspondem a cerca de 17%, epitérmicos 11% e rápidos 26%. Neste cenário, o filme de água domina o volume da tubulação. A água é um excelente moderador de nêutrons devido à alta concentração de núcleos de hidrogênio (^1H). Os nêutrons rápidos, com energias na faixa de MeV, colidem elasticamente com esses núcleos, que possuem massa semelhante à do nêutron. A cada colisão, o nêutron perde uma fração significativa de energia, desacelerando-se até atingir o equilíbrio térmico com o meio, a chamada de faixa de energia térmica. Esse comportamento explica a presença expressiva da fração térmica no espectro, indicando que o meio consegue efetivamente atenuar e desacelerar os nêutrons rápidos.

Na segunda fração escolhida do modelo 1 representado na Figura 12 (50%–50%), a distribuição espectral muda de forma perceptível, com diminuição das populações de nêutrons térmicos e aumento dos rápidos. As proporções obtidas foram aproximadamente 14% para os térmicos, 15% para os epitérmicos e 60% para os rápidos. A substituição de metade do volume de água por ar seco reduz drasticamente a quantidade de hidrogênio disponível para moderação. Como o ar seco praticamente não possui capacidade moderadora, a eficiência global de desaceleração dos nêutrons diminui. Apesar de a redução da fração térmica não ser diretamente proporcional à diminuição do volume de água, ainda há hidrogênio suficiente para alguma moderação residual. Contudo, o espectro se endurece consideravelmente, com os nêutrons rápidos tornando-se dominantes. O ferro do sistema mantém seu papel de absorver nêutrons epitérmicos e promover espalhamento elástico e inelástico, o que também contribui para o aumento da fração rápida.

Na terceira fração escolhida do modelo 1 representado na Figura 13 (100% de ar seco), a ausência completa de água elimina totalmente a capacidade de moderação. Neste caso, o espectro é quase inteiramente composto por nêutrons rápidos (~99%), com frações térmica e epitérmica praticamente nulas. A inexistência de um moderador eficiente como a água impede a desaceleração dos nêutrons rápidos emitidos pela fonte. O ar seco não promove colisões suficientes para reduzir suas energias, de modo que o espectro resultante reflete diretamente o espectro de emissão da fonte $^{241}\text{Am-Be}$, com os nêutrons atravessando a tubulação e interagindo minimamente com o meio.

4.1.2 MODELO 2 – ÓLEO TEXANO E GÁS METANO

O Modelo 2 é constituído por duas fases em um regime anular, em uma geometria – Tubulação Cilíndrica. Três frações de volume foram investigadas:

- **Fração 1:** 1% de metano (anel interno) e 99% de óleo combustível texano (filme externo) (Figura 14);
- **Fração 2:** 50% de metano (anel interno) e 50% de óleo combustível texano (filme externo) (Figura 15);
- **Fração 3:** 100% de metano (anel interno) e 0% de óleo combustível texano (filme externo) (Figura 16).

Nos três histogramas do Modelo 2, composto por gás metano no anel interno e óleo texano no filme externo, observa-se uma clara tendência de endurecimento do espectro de nêutrons à medida que a fração de metano aumenta, indicando uma predominância crescente de nêutrons rápidos em detrimento dos nêutrons térmicos e epitérmicos.

Na primeira fração escolhida do modelo 2 representado na Figura 14 (1% – 99%), a distribuição de nêutrons apresenta uma presença significativa de nêutrons térmicos e epitérmicos, com proporções aproximadas de 17% térmicos, 11% epitérmicos e 26% rápidos. Nesse caso, o filme de óleo domina a fase externa da tubulação. As interações de nêutrons com os hidrocarbonetos (C_nH_n) do óleo são marcadas pela presença de uma quantidade considerável de hidrogênio (1H), que atuam como moderadores eficientes, uma vez que possuem massa próxima à do nêutron. Em cada colisão elástica, o nêutron pode transferir uma fração significativa de sua energia, reduzindo sua velocidade. Apesar de o óleo possuir menor densidade de hidrogênio que a água, ele ainda é capaz de moderar parcialmente o fluxo, resultando em uma fração considerável de nêutrons térmicos.

Na segunda fração escolhida do modelo 2 representado na Figura 15 (50% – 50%), o anel interno de gás ocupa 50% do volume, reduzindo a proporção de óleo. Embora o gás metano também contenha hidrogênio, sua baixa densidade como gás implica uma menor concentração de núcleos de hidrogênio por unidade de volume, o que diminui a probabilidade de colisões moderadoras. Neste caso, a distribuição de nêutrons apresenta cerca de 14% térmicos, 15% epitérmicos e 60% rápidos, evidenciando uma redução da eficiência de moderação do sistema. O espectro torna-se, portanto, mais “duro” e dominado por nêutrons rápidos.

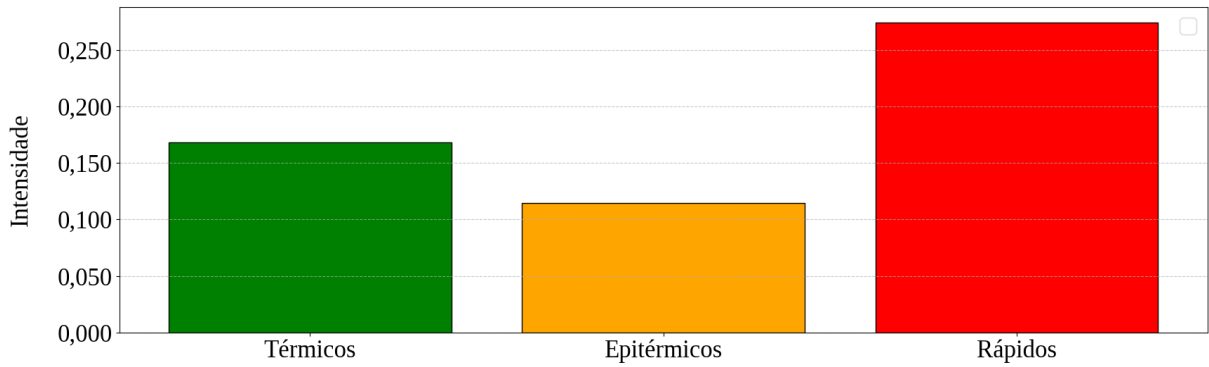


Figura 14: Histograma das classes de energia dos nêutrons do Modelo 2: 1-99%.

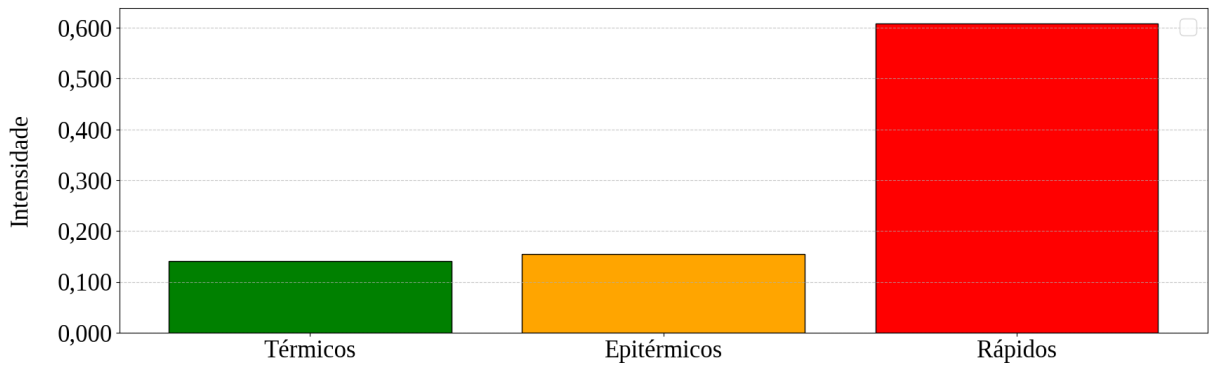


Figura 15: Histograma das classes de energia dos nêutrons do Modelo 2: 50-50%.

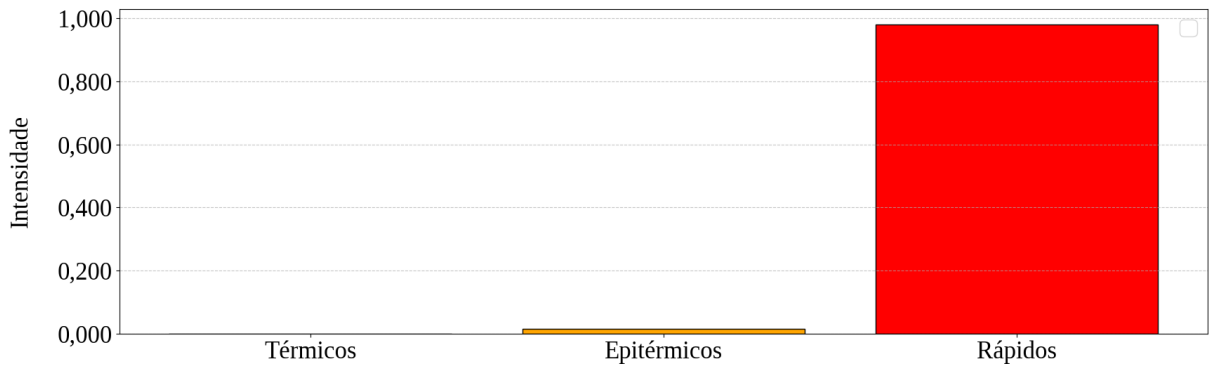


Figura 16: Histograma das classes de energia dos nêutrons do Modelo 2: 100% de metano.

Na terceira fração escolhida do modelo 2 representado na Figura 16 (100% de gás metano), o espectro é quase totalmente dominado por nêutrons rápidos, com aproximadamente 98 – 99% de nêutrons rápidos, enquanto as populações térmica e epitérmica tornam-se praticamente nulas. A substituição completa do óleo por gás elimina quase toda a capacidade de moderação do sistema. A baixa densidade do gás faz com que os nêutrons provenientes da fonte $^{241}\text{Am-Be}$ realizem poucas colisões com núcleos de hidrogênio, mantendo o espectro predominantemente na faixa de energia rápida.

4.1.3 MODELO 3 – ÓLEO MEXICANO E ÁGUA SALGADA

O Modelo 3 é constituído por duas fases líquidas dispostas em um regime anular, modeladas em uma tubulação cilíndrica. Três frações volumétricas foram investigadas:

- **Fração 1:** 1% de óleo combustível mexicano (anel interno) e 99% de água salgada (filme externo) (Figura 17);
- **Fração 2:** 50% de óleo combustível mexicano (anel interno) e 50% de água salgada (filme externo) (Figura 18);
- **Fração 3:** 100% de óleo combustível mexicano (anel interno) e 0% de água salgada (filme externo) (Figura 19).

O Modelo 3, composto por óleo mexicano no anel interno e água salgada no filme externo, apresenta dois fluidos líquidos ricos em hidrogênio, com densidades semelhantes, o que confere ao sistema uma capacidade significativa de moderação neutrônica.

Na primeira fração escolhida do modelo 2 representado na Figura 17 (1% – 99%), a distribuição de nêutrons apresenta aproximadamente 13% de térmicos, 11% de epitérmicos e 26% de rápidos. Nessa configuração, observa-se uma predominância de nêutrons térmicos e epitérmicos devido ao alto poder de moderador da água salgada, cuja eficiência decorre da abundância de hidrogênio e da elevada probabilidade de colisões elásticas. A adição de sal (NaCl) à água não altera significativamente sua capacidade de moderação. A presença de óleo combustível em baixa concentração contribui de forma secundária, mas o comportamento global do sistema é dominado pela água.

Na segunda fração escolhida do modelo 2 representado na Figura 18 (50% – 50%), as proporções permanecem próximas das observadas no caso anterior com cerca de 15% de térmicos, 11% de epitérmicos e 26% de rápidos, mas ocorre uma leve redução da densidade média de hidrogênio devido à substituição de metade do volume de água salgada por óleo combustível. Embora o óleo seja um hidrocarboneto e contenha hidrogênio, ele possui menor concentração de hidrogênio por unidade de volume em comparação à água, o que reduz ligeiramente sua eficiência como moderador e resulta em um pequeno aumento da fração de nêutrons rápidos. Ainda assim, o sistema mantém equilíbrio entre as duas fases líquidas, preservando quantidades apreciáveis de nêutrons térmicos e epitérmicos.

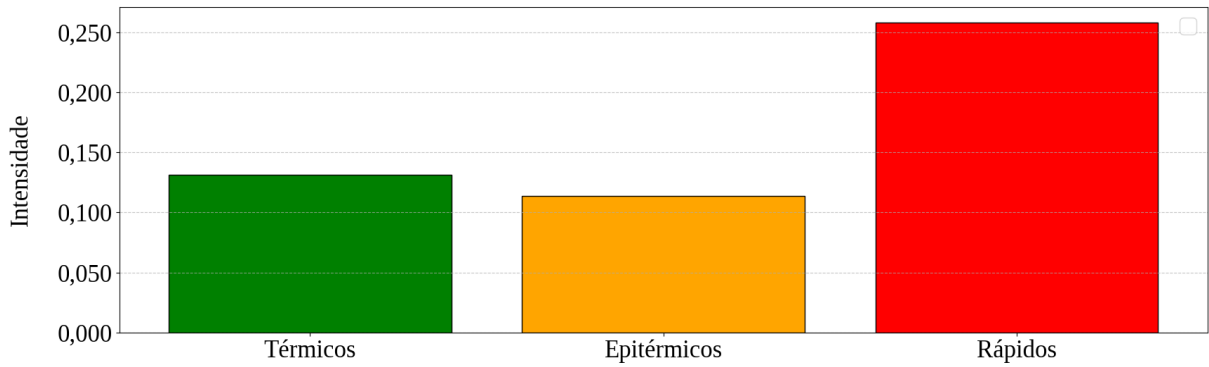


Figura 17: Histograma das classes de energia dos nêutrons do Modelo 3: 1-99%.

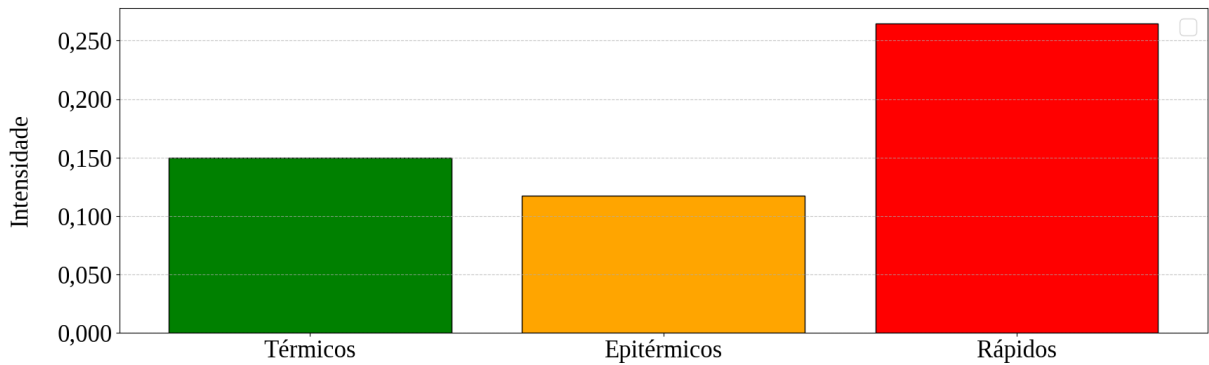


Figura 18: Histograma das classes de energia dos nêutrons do Modelo 3: 50-50%.

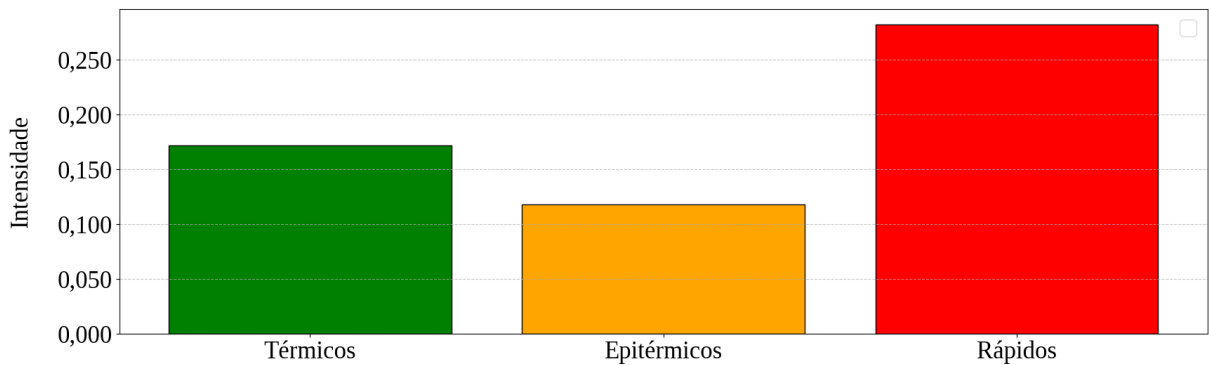


Figura 19: Histograma das classes de energia dos nêutrons do Modelo 3: 100% de óleo mexicano.

Na terceira fração escolhida do modelo 2 representado na Figura 19 (100% de óleo mexicano), correspondente a 100% de óleo combustível mexicano, a distribuição apresenta aproximadamente 17% de nêutrons térmicos, 12% de epitérmicos e 27% de rápidos. Mesmo com a substituição completa da água salgada, nota-se que o óleo, embora menos denso, continua sendo um líquido rico em hidrogênio, permitindo moderação apreciável. O espectro torna-se, entretanto, mais “duro” em comparação com o primeiro cenário (Figura 17), devido à menor

densidade de hidrogênio. Ao contrário do cenário com o gás metano, ainda há uma população significativa de nêutrons térmicos.

Essa capacidade moderadora pode ser explicada pelo parâmetro de perda média de energia por colisão, que é elevado para o hidrogênio. Assim, tanto a água quanto o óleo, por serem compostos ricos em hidrogênio, favorecem a desaceleração dos nêutrons rápidos até a faixa térmica, embora a maior densidade de hidrogênio da água a torne mais eficiente.

Portanto, o Modelo 3 representa um sistema bifásico líquido-líquido com alta densidade global de hidrogênio, resultando em boa eficiência de moderação neutrônica em todas as frações volumétricas. A substituição gradual da água salgada por óleo combustível mexicano provoca um leve endurecimento do espectro, com aumento relativo dos nêutrons rápidos, mas a presença de ambos os líquidos mantém uma proporção significativa de nêutrons térmicos e epitérmicos. Isso evidencia que a moderação permanece eficiente mesmo na ausência total de água.

4.1.4 CURVA DE CALIBRAÇÃO E FRAÇÃO VOLUMÉTRICA

Foram analisadas curvas que relacionam o fluxo de nêutrons, classificados nas faixas térmica, epitérmica e rápida, com a fração volumétrica dos sistemas estudados (0 – 100%). Essa abordagem permite avaliar a influência da composição do meio nos processos de moderação, espalhamento e atenuação dos nêutrons provenientes da fonte $^{241}\text{Am-Be}$, bem como identificar padrões de redistribuição energética do espectro neutrônico relevantes para a inferência das frações volumétricas e para o treinamento das redes neurais profundas.

A Figura 20 apresenta a variação do fluxo de nêutrons nas faixas térmica, epitérmica e rápida em função das 100 frações volumétricas consideradas no Modelo 1, composto por ar seco e água. Observa-se que o fluxo de nêutrons rápidos, representado pela curva azul, apresenta um aumento aproximadamente linear com o crescimento da fração volumétrica do ar seco, refletindo a redução progressiva da capacidade moderadora do meio à medida que a quantidade de água diminui.

Em contraste, as componentes térmica e epitérmica apresentam comportamentos distintos ao longo da variação das frações volumétricas. A faixa epitérmica, representada pela curva vermelha, exibe um aumento inicial do fluxo para frações volumétricas mais baixas de ar seco, resultado da moderação parcial dos nêutrons rápidos, que passam a contribuir de forma mais significativa na região intermediária do espectro energético.

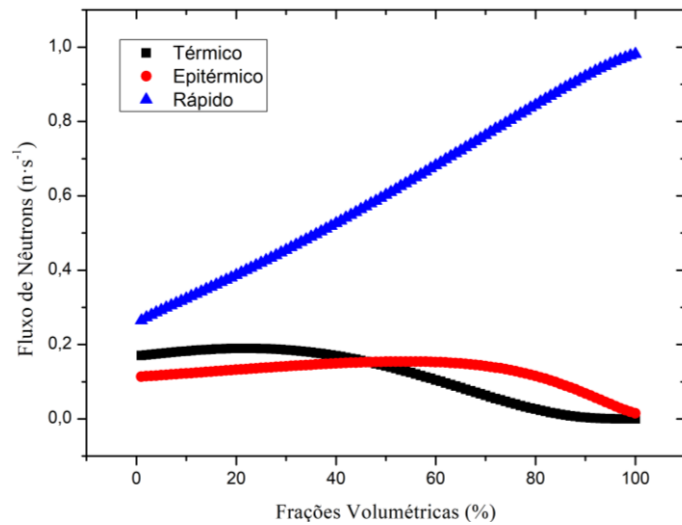


Figura 20: Fluxo de Nêutrons por Frações Volumétricas para o ar seco – Modelo 1

A partir de frações volumétricas próximas a 50%, observa-se uma redução tanto do fluxo epitérmico quanto do térmico, indicando a transição de um regime dominado pelo espalhamento moderador, associado à presença de água, para um regime menos moderador e mais absorvedor, caracterizado pelo aumento da fração de ar seco. Nesse cenário, a diminuição da eficiência de termalização resulta na redução progressiva da contribuição das faixas de menor energia.

Na Figura 21 é apresentado o comportamento do fluxo de nêutrons nas faixas térmica, epitérmica e rápida em função das 100 frações volumétricas consideradas no Modelo 2, composto por gás metano e óleo combustível texano.

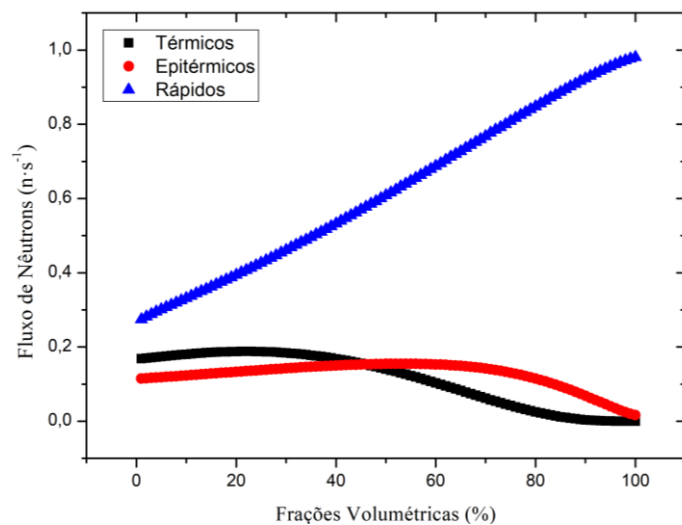


Figura 21: Fluxo de Nêutrons por Frações Volumétricas para o gás metano – Modelo 2

Observa-se que as tendências são qualitativamente semelhantes às discutidas para o Modelo 1. O fluxo de nêutrons rápidos apresenta aumento aproximadamente linear com o crescimento da fração volumétrica, refletindo a redução da capacidade moderadora do meio. As componentes térmica e epitérmica mantêm o padrão geral, com maior contribuição térmica em baixas frações volumétricas e um máximo da componente epitérmica em frações intermediárias, associado à moderação parcial dos nêutrons rápidos. Para frações volumétricas mais elevadas, a diminuição simultânea dessas componentes indica a transição para um regime menos moderador, no qual a faixa rápida passa a predominar.

Na Figura 22 é apresentado o comportamento do fluxo de nêutrons para as 100 frações volumétricas do Modelo 3 (óleo combustível mexicano e água salgada), evidenciando um padrão distinto em relação aos modelos anteriores. Nesse caso, o fluxo de nêutrons rápidos, representado pela curva azul, apresenta um aumento suave e aproximadamente linear ao longo de toda a faixa de frações volumétricas do óleo combustível mexicano, sem variações abruptas ou mudanças de regime.

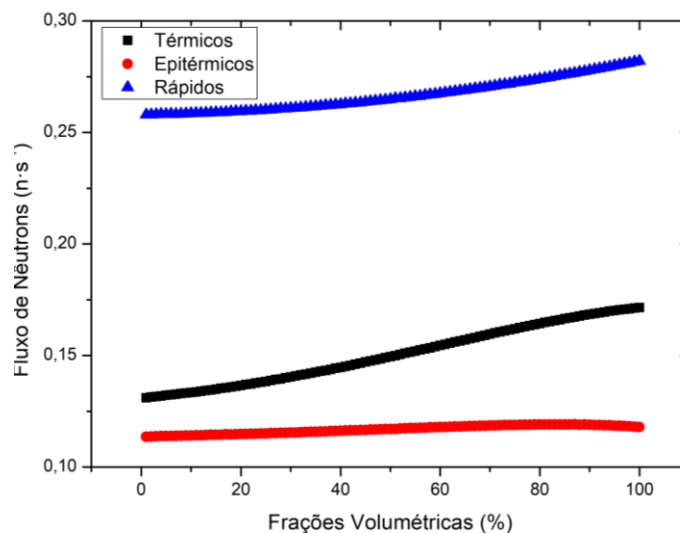


Figura 22: Fluxo de Nêutrons por Frações Volumétricas para o óleo mexicano – Modelo 3

A componente térmica, representada pela curva preta, exibe um crescimento gradual com o aumento da fração volumétrica do óleo combustível mexicano, indicando uma contribuição moderada e progressiva dos processos de desaceleração dos nêutrons no meio. Por sua vez, a faixa epitérmica, representada pela curva vermelha, apresenta baixa intensidade e variação limitada, mantendo-se praticamente constante ao longo da faixa analisada.

Diferentemente dos Modelos 1 e 2, não se observa no Modelo 3 a presença de máximos locais ou pontos de inflexão bem definidos nas componentes térmica e epitérmica, o que indica

a ausência de uma transição espectral marcante. Esse comportamento sugere um regime mais estável de moderação, no qual as contribuições relativas das diferentes faixas energéticas variam de forma contínua com a fração volumétrica.

4.2 DNN: PREDIÇÃO DA FRAÇÃO VOLUMÉTRICA

Uma rede neural profunda (DNN) foi projetada usando Python e teve seus hiperparâmetros otimizados utilizando o *Optuna*. Esta mesma arquitetura foi aplicada aos Modelos 1, 2 e 3. Cada DNN possui três neurônios de entrada, correspondentes às classes de nêutrons (térmicos, epitérmicos e rápidos), e um neurônio de saída, representando a fração volumétrica do fluido. O *Optuna* indicou como configuração ótima uma DNN com quatro camadas ocultas, cada uma com diferentes números de neurônios e funções de ativação. A taxa de aprendizagem (*learning rate*) inicial de 2×10^{-5} foi mantida para todos os modelos. A Tabela 6 apresenta a configuração final definida pelo *Optuna*.

Tabela 6: Hiperparâmetros da DNN.

Camadas Ocultas	Neurônios Camada Oculta	Função de Ativação
1	102	SELU
2	123	SELU
3	403	ReLU
4	669	SELU

4.2.1 MODELO 1

Na Figura 23, são apresentados os gráficos de progressão de treinamento visando observar como se comporta a fase de aprendizagem, considerando o espectro de nêutrons ao realizar a ativação neutrônica no ar seco e na água, respectivamente. A curva azul representa o conjunto de treinamento (Treino), enquanto a curva laranja representa o conjunto de validação (Val). O eixo Y está em uma escala logarítmica, permitindo visualizar quedas rápidas iniciais e pequenas variações posteriores de forma clara, o que seria difícil em escala linear.

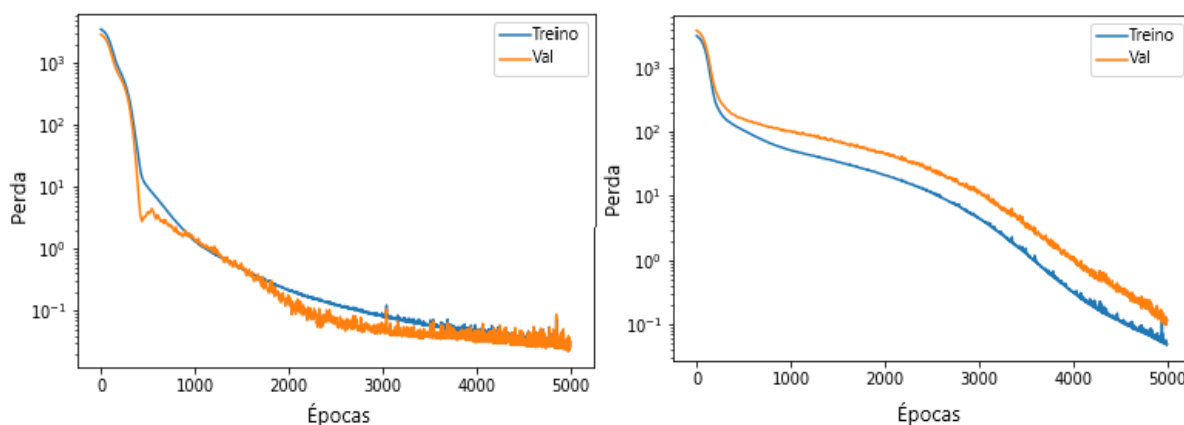


Figura 23: Progressão do treinamento do Modelo 1: ar seco (à esquerda); água (à direita).

Para o ar seco (Figura 23a), a perda de treinamento e validação apresenta queda rápida nas primeiras 100 épocas, seguida de uma diminuição gradual. As curvas permanecem praticamente sobrepostas até o final das 5000 épocas, indicando excelente generalização. Pequenas diferenças em alguns pontos da curva de validação, ligeiramente abaixo da curva de treinamento, reforçam a robustez do modelo. Para a água (Figura 23b), as curvas iniciais seguem comportamento similar, mas após cerca de 500 épocas a curva de validação se mantém consistentemente acima da curva de treinamento. Apesar disso, o modelo ainda demonstra boa capacidade de aprendizado e generalização, mesmo em meio de maior densidade e efeito moderador da água.

A Tabela 7 apresenta a classificação das faixas de erros relativos (ER) para os fluidos do Modelo 1, considerado o banco de dados global (Treinamento + Validação + Teste).

Tabela 7: Classificação das faixas de erros relativos do Modelo 1.

Faixa de ER (%)	Ar Seco	Água
	Porcentagem de amostras	Porcentagem de amostras
0–5	98	99
5–10	1	-
15–20	-	1
45–50	1	-

A ar seco apresenta 98% das amostras com erro relativo menor que 5%, e pequenas quantidades de amostras com erro mais elevado. A água apresenta comportamento similar.

As métricas de desempenho da DNN para o Modelo 1 estão resumidas na Tabela 8.

Tabela 8: Métricas de desempenho – Modelo 1.

Métricas	Ar Seco	Água
MSE	0,014	0,088
RMSE	0,12	0,30
MAPE (%)	0,21	0,46
R^2	1	0,99

A partir da Tabela 8 observa-se que a DNN apresentou excelente capacidade de predição, com erros absolutos e relativos muito baixos e altos coeficientes de determinação. Para o ar seco, o erro quadrático médio (MSE) foi de 0,014 e a raiz do erro quadrático médio (RMSE) de 0,12, indicando que as previsões mantêm uma proximidade elevada com os valores reais. O erro percentual médio absoluto (MAPE) de 0,21% reforça essa precisão, demonstrando que a diferença média entre os valores previstos e observados é praticamente desprezível. O $R^2 = 1$ confirma uma correlação perfeita entre os dados simulados e os valores estimados pela rede, indicando que o modelo explicou integralmente a variabilidade do conjunto de dados.

Para a água, os resultados também demonstram bom desempenho, embora com erros ligeiramente superiores. O MSE de 0,088 e o RMSE de 0,30 revelam uma pequena piora em comparação com o ar, possivelmente porque o ar seco apresenta seções de choque muito baixas, gerando alterações mínimas no espectro de nêutrons e reduzindo a sensibilidade do modelo em comparação à água, que produz assinaturas espectrais muito mais pronunciadas. Ainda assim, o MAPE de 0,46% indica um erro relativo muito baixo.

De modo geral, o desempenho da DNN no Modelo 1 demonstra robustez e alta precisão preditiva, refletindo a eficácia da configuração da rede e dos hiperparâmetros adotados. A proximidade entre os valores preditos e reais em ambos os fluidos evidencia que o modelo foi capaz de aprender de forma eficiente as relações entre os parâmetros de entrada e saída, garantindo estabilidade e confiabilidade nos resultados.

A Figura 24 apresenta os gráficos de regressão linear (R^2) para os dados reais versus preditos.

O modelo de regressão demonstrou um desempenho satisfatório no conjunto de dados de Teste. A alta precisão do modelo foi totalmente confirmada pelas métricas de avaliação, especialmente pelo coeficiente de predição R^2 que atingiu valores de 1 e 0,99. Este resultado indica um erro residual minimizado e significa que o modelo consegue explicar praticamente 100% da variância dos dados reais.

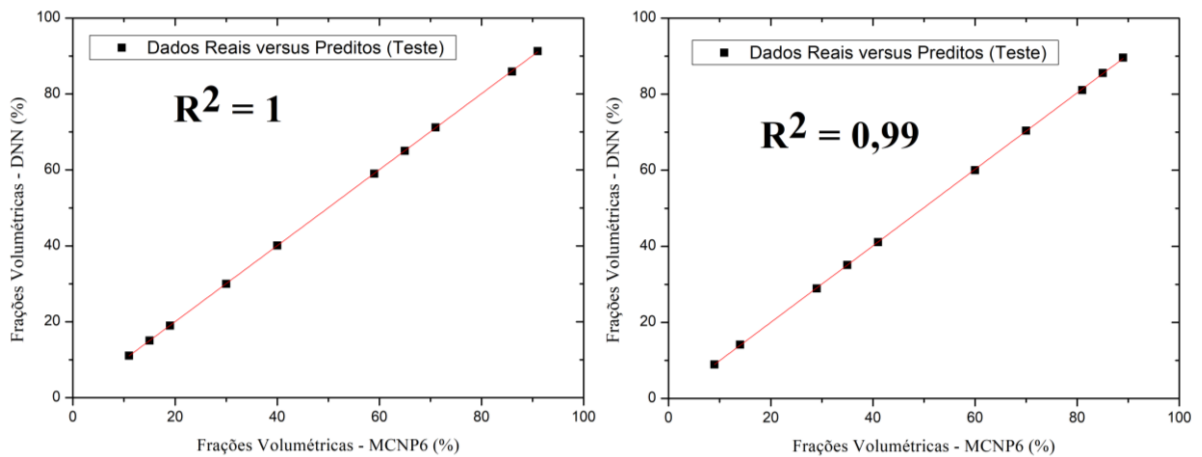


Figura 24: Regressão linear para o Modelo 1: a) água (à esquerda); b) ar seco (à direita).

4.2.2 MODELO 2

A Figura 25 apresenta a progressão do treinamento da rede neural para o Modelo 2, permitindo avaliar o comportamento do aprendizado para os fluidos gás metano e óleo texano, respectivamente.

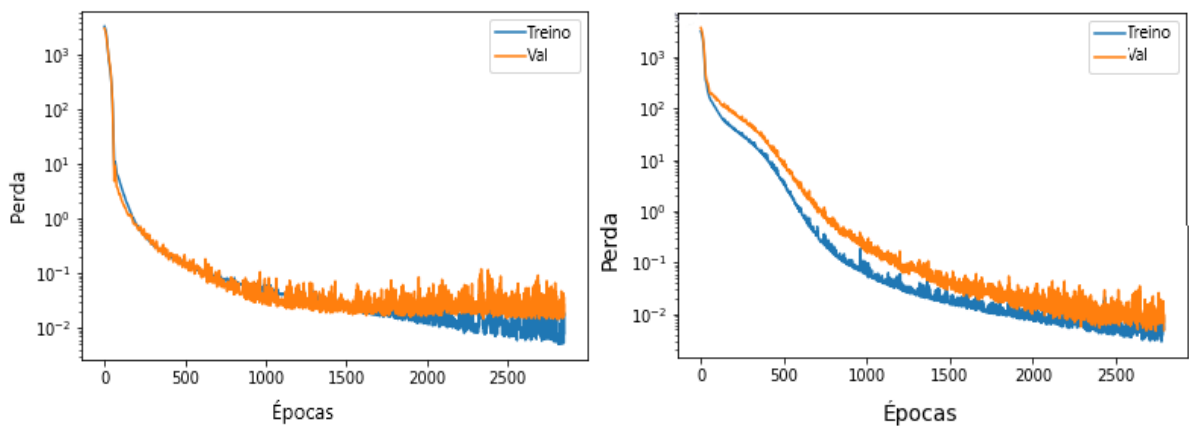


Figura 25: Progressão do treinamento do Modelo 2: gás metano (à esquerda); óleo texano (à direita).

Na Figura 25a, observa-se que ambas as curvas de progressão do treinamento decaem de forma semelhante nas primeiras épocas, indicando uma tendência de um bom processo de aprendizado. Após cerca de 500 épocas, a taxa de redução da função *loss* torna-se menos intensa e as curvas de treinamento e validação permanecem muito próximas. Na Figura 25b, correspondente ao óleo texano, nota-se comportamento análogo ao do gás metano. Esse

comportamento indica que, embora o meio mais denso e fortemente moderador do óleo introduza maior variação espectral, o modelo mantém boa generalização.

A Tabela 9 apresenta a classificação das faixas de erros relativos (ER) para os fluidos do Modelo 2, considerado o banco de dados global.

Tabela 9: Classificação das faixas de erros relativos do Modelo 2.

Faixa de ER (%)	Gás Metano	Óleo Texano
	Porcentagem de amostras	Porcentagem de amostras
0–5	98	99
5–10	1	1
15–20	-	-
35–40	1	-

O gás metano apresenta 98% das amostras com erro relativo inferior a 5%, o que evidência excelente desempenho preditivo do modelo. Em 1% das amostras, o erro varia entre 5% e 10%, e em outra parcela de 1%, entre 35% e 40%, indicando casos pontuais de discrepância mais elevada.

O óleo texano apresenta 99% das amostras com erro relativo inferior a 5%, confirmando boa capacidade de generalização. Contudo, observa-se uma pequena ocorrência de erro mais elevado, com 1% das amostras entre 5 e 10%. Esses valores indicam que, embora o modelo apresente alta precisão na maior parte das predições, uma amostra apresenta dispersão residual que pode estar associada a variações estatísticas do espectro ou à complexidade da resposta nuclear do fluido.

A Tabela 10 apresenta as métricas de desempenho para os fluidos do Modelo 2.

Tabela 10: Métricas de desempenho – Modelo 2.

Métricas	Gás Metano	Óleo Texano
MSE	0,003	0,002
RMSE	0,055	0,047
MAPE (%)	0,18	0,41
R^2	1	1

A Tabela 10 apresenta as métricas de desempenho obtida para os ambos os fluidos do Modelo 2, revelando um comportamento altamente consistente e preciso da DNN utilizada. Os valores extremamente baixos das métricas de erro indicam excelente capacidade de aprendizado e generalização do modelo. O MSE apresentou valores de 0,003 para o gás metano e 0,002 para

o óleo texano, evidenciando uma penalidade média quase nula entre as previsões e os valores reais. De modo complementar, o RMSE apresentou valores de 0,055 e 0,047, respectivamente, confirmando que a dispersão dos resíduos é mínima e que as previsões estão fortemente alinhadas com os dados observados.

O MAPE (%) apresentou valores de 0,18% para o gás metano e 0,41% para o óleo texano, o que representa uma margem de erro relativa inferior a 1% em ambos os casos. As métricas para gás metano e óleo texano são excelentes porque ambos os fluidos alteram fortemente o espectro de nêutrons, devido ao alto conteúdo de hidrogênio (no metano e no óleo) e, no caso do óleo, também à maior densidade, produzindo sinais espectrais claros e facilmente distinguíveis pela rede neural, ao contrário do ar seco. Em ambos os casos, o R^2 igual a 1 demonstra correlação perfeita entre os valores previstos e observados, evidenciando que praticamente toda a variabilidade dos dados foi explicada pela rede.

Esses resultados indicam que a DNN não apenas aprendeu de forma eficiente os padrões do conjunto de treinamento, mas também foi capaz de generalizar adequadamente para o conjunto de teste, sem apresentar sinais de sobreajuste. A consistência observada entre as métricas confirma a robustez da arquitetura e a adequada escolha dos hiperparâmetros empregados. Em síntese, a DNN mostrou excelente capacidade de previsão e estabilidade numérica na análise dos fluidos do Modelo 2, reproduzindo com alta fidelidade o comportamento esperado dos dados simulados.

A seguir tem-se a Figura 26 apresentando os gráficos da regressão linear envolvendo os dados reais e dados preditos.

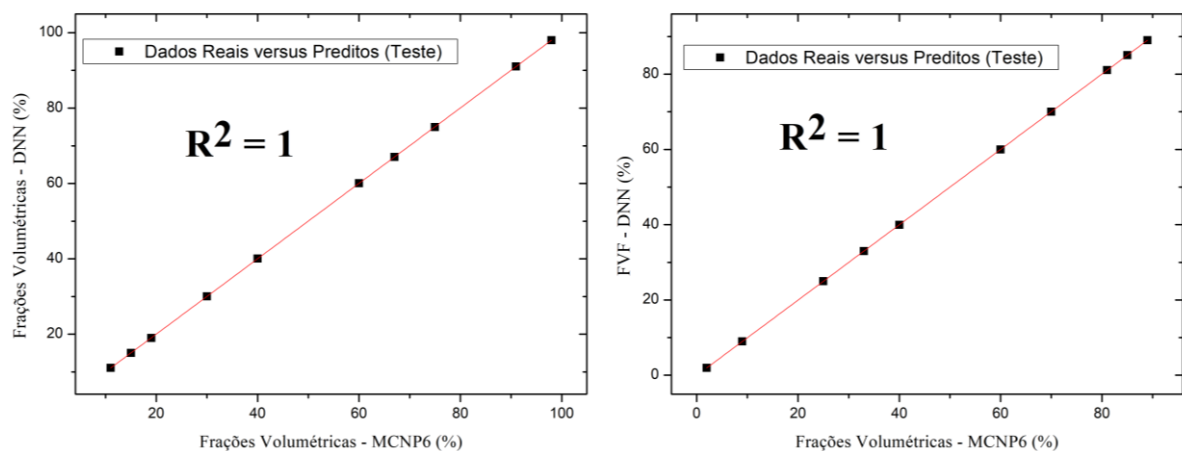


Figura 26: Regressão linear para o Modelo 2: a) gás metano (à esquerda); b) óleo texano (à direita).

O modelo de regressão demonstrou desempenho altamente satisfatório no conjunto de dados de teste. A elevada precisão foi confirmada pelas métricas de avaliação, especialmente pelo $R^2 = 1$ obtido para ambas as fases. Esse resultado evidencia que o erro residual foi praticamente eliminado e que o modelo consegue explicar integralmente a variância dos dados reais.

4.2.3 MODELO 3

A Figura 27 apresenta os gráficos de progressão do treinamento do Modelo 3, obtidos a partir dos conjuntos de treinamento e validação.

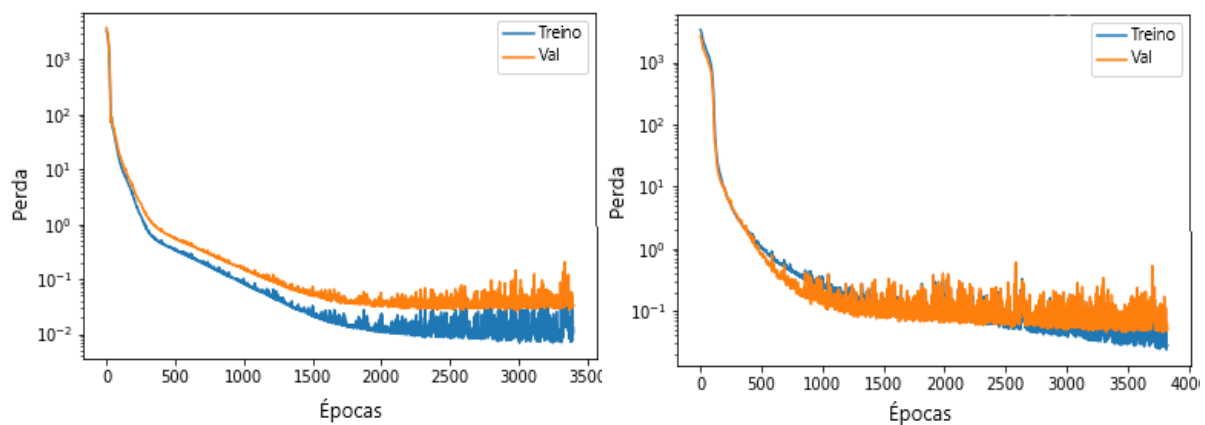


Figura 27: Progressão do treinamento do Modelo 3: óleo mexicano (à esquerda); água salgada (à direita).

Na Figura 27a, correspondente ao óleo mexicano, o coeficiente 10^{-2} na escala logarítmica indica que as funções *loss* convergem de forma satisfatória na região de 3000 épocas, refletindo uma boa estabilidade global do processo de aprendizado. Na Figura 27b, referente à água salgada, o coeficiente de aproximadamente 10^{-1} na escala logarítmica mostra que as funções *loss* convergem adequadamente por volta de 4000 épocas.

A Tabela 11 apresenta a classificação das faixas de ER (%) para os fluidos do Modelo 3, considerado o banco de dados global. Observa-se que a grande maioria das amostras para ambos os fluidos se concentra na faixa de erro mais baixa, entre 0 e 5%, representando 98,00% das amostras para o óleo mexicano e 96,97% para a água salgada. Esses valores indicam excelente desempenho do modelo de regressão, com previsões extremamente próximas dos valores reais.

Tabela 11: Classificação das faixas de erros relativos do Modelo 3.

Faixa de ER (%)	Óleo Mexicano	Água Salgada
	Porcentagem de amostras	Porcentagem de amostras
0–5	98,00	96,97
5–10	-	2,02
10–15	2,00	-
15–20	-	1,01

Para o óleo mexicano, apenas 2,00% das amostras apresentaram erros relativos acima de 5%, o que demonstra uma pequena parcela de casos fora do padrão de ajuste ideal, possivelmente associada a variações locais no espectro de nêutrons ou à menor representatividade dessas condições no conjunto de treinamento. Já a água salgada apresenta 3,03% das amostras com erro relativo superior a 5%, o que representa ligeiramente maior dispersão dos erros em relação ao óleo. Ainda assim, o desempenho geral do modelo permanece altamente satisfatório. Esse comportamento evidencia que o Modelo 3 apresenta excelente capacidade de generalização para ambos os fluidos, sendo capaz de reproduzir de forma precisa as variações nas frações volumétricas do sistema bifásico gás metano-óleo texano. A baixa dispersão dos erros e a alta concentração de amostras na faixa de 0–5% confirmam a robustez e estabilidade da DNN.

A Tabela 12 apresenta as métricas de desempenho para os fluidos do Modelo 3.

Tabela 12: Métricas de desempenho – Modelo 3.

Métricas	Óleo mexicano	Água salgada
MSE	0,012	0,022
RMSE	0,11	0,15
MAPE (%)	1,66	0,39
R^2	1	1

Os resultados indicam um excelente desempenho da DNN, com baixos valores de erro e $R^2 = 1$ para ambas as fases, o que demonstra que o modelo foi capaz de explicar integralmente a variância dos dados reais, reproduzindo com alta fidelidade o comportamento físico do sistema. Para o óleo mexicano, o MSE foi de 0,012 e o RMSE de 0,11, revelando um desvio mínimo entre os valores preditos e os reais. O MAPE (%) de 1,66% sugere que, apesar do ajuste global excelente, pequenas flutuações locais podem ocorrer devido ao fato de a moderação de nêutrons no óleo, embora significativa, ser menos intensa que na água salgada, resultando em um contraste espectral ligeiramente inferior.

Para a água salgada, os resultados mantêm a qualidade, com $MSE = 0,022$, $RMSE = 0,15$ e $MAPE = 0,39\%$, indicando um desvio ligeiramente superior, mas ainda extremamente baixos. Essa diferença pode estar relacionada a pequenas variações no comportamento estatístico do espectro de nêutrons na água salgada, que apresenta maior capacidade de moderação e, conseqüentemente, maior sensibilidade às variações na geometria e nas frações volumétricas.

Embora tanto o anel interno constituído por óleo mexicano como o anel externo constituído por água salgada apresentem capacidade de treinamento muito parecida, devido ao estado físico ser líquido e suas densidades parecidas, dificultando na caracterização de ambas as fases, ainda é possível dizer que o Modelo 3 demonstra desempenho consistente e altamente confiável. A convergência das métricas e o valor de $R^2 = 1$ em ambas as fases confirmam que a rede neural foi capaz de aprender e generalizar as relações entre os parâmetros de entrada e saída de forma completa, reproduzindo o comportamento físico dos sistemas bifásicos com excelente precisão.

A seguir tem-se a Figura 28 apresentando os gráficos de regressão linear envolvendo os dados reais e os dados preditos.

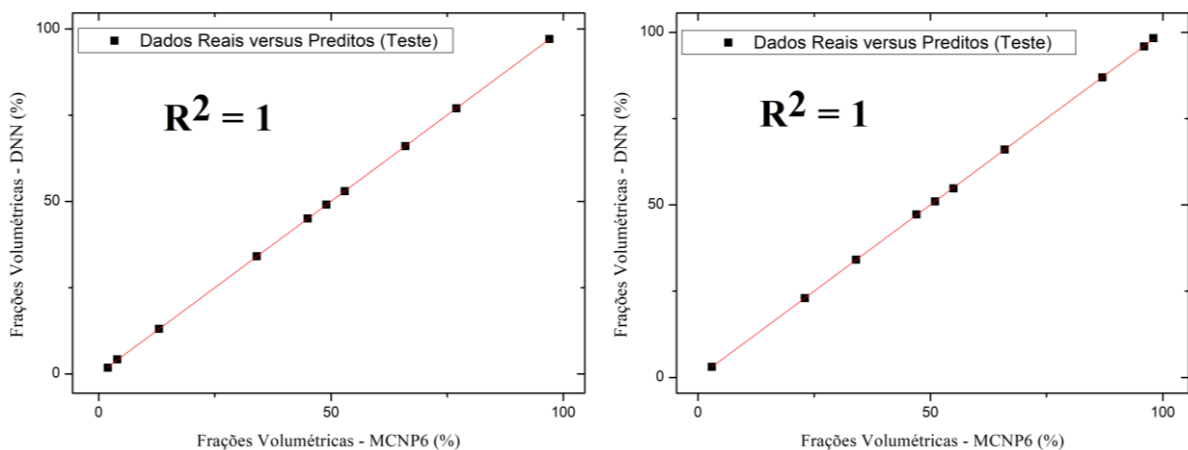


Figura 28: Regressão linear para o Modelo 3: a) óleo mexicano (à esquerda); b) água salgada (à direita).

O Modelo 3 demonstrou um excelente desempenho no conjunto de dados de teste para ambos os fluidos (óleo mexicano e água salgada). Os gráficos de regressão confirmam que os valores preditos estão perfeitamente alinhados com os valores reais, indicando que o erro de previsão é nulo. Esta conclusão é matematicamente validada pelo R^2 que atingiu 1 para ambas as fases, significando que o modelo consegue explicar 100% da variância dos dados.

CAPÍTULO V

5 CONCLUSÕES

Neste trabalho, foi proposta e avaliada uma metodologia para predição de frações volumétricas em regimes bifásicos anular, utilizando uma rede neural profunda (DNN) treinada com dados provenientes de simulações Monte Carlo realizadas com o código MCNP6. O cartão *tally* F1 foi utilizado como detector virtual de nêutrons em uma superfície esférica com geometria 4π , permitindo obter os espectros correspondentes a diferentes fluidos e composição dos fluidos. Essa abordagem híbrida possibilitou avaliar a sensibilidade da técnica frente a mudanças de densidade e composição dos fluidos, confirmando a validade da metodologia em um contexto de simulação teórica.

Do ponto de vista físico, observou-se que a técnica é sensível às variações de frações volumétricas, sendo capaz de distinguir regimes com diferentes eficiências de moderação e absorção neutrônica. Do ponto de vista computacional, a rede neural otimizada apresentou alta precisão preditiva, evidenciando a adequação da metodologia proposta para aplicações industriais que demandam medições não invasivas.

5.1 ANÁLISE FÍSICA – SENSIBILIDADE DAS TÉCNICAS

As análises foram realizadas em tubulações de ferro, avaliando três modelos em regime anular com diferentes combinações de fluidos. Essa configuração mostrou-se eficaz em reconhecer as variações volumétricas e sua influência na produção de diferentes espectros neutrônicos. As alterações de frações volumétricas modificaram de forma significativa a distribuição relativa entre nêutrons térmicos, epitérmicos e rápidos. Essa variação está associada à densidade de núcleos de hidrogênio disponíveis para moderação, de modo que a presença ou ausência de moderadores eficientes, como água ou hidrocarbonetos líquidos, determina o grau de endurecimento espectral.

Os Modelos 1 e 2 (ar-água; gás metano-óleo texano) demonstraram que à medida que se aumenta a fração do fluido menos moderador (ar seco ou gás metano) reduz-se a população de nêutrons térmicos, pois há menos colisões eficazes de espalhamento elástico com núcleos leves. Consequentemente, a seção de choque de captura nos térmicos perde relevância, e os nêutrons permanecem majoritariamente na faixa rápida. O endurecimento do espectro é evidenciado pelo aumento relativo dos nêutrons rápidos e pela redução gradual dos térmicos.

O Modelo 3 (água salgada–óleo mexicano) apresentou comportamento distinto, com maior equilíbrio entre nêutrons epitérmicos e térmicos. Isso ocorre porque ambos os fluidos contêm abundância de hidrogênio, mantendo elevada a probabilidade de moderação e, portanto, uma seção de choque captura significativa nas faixas térmica e epitérmica. A semelhança entre as respostas dos dois líquidos revela compatibilidade nuclear e comportamento espectral estável.

5.2 ANÁLISE COMPUTACIONAL – FRAÇÃO VOLUMÉTRICA

A otimização dos hiperparâmetros por meio *Optuna* permitiu aprimorar o desempenho da DNN, resultando em treinamentos consistentes. As curvas de desempenho do treinamento indicaram convergência adequada entre os conjuntos de dados de treinamento e validação, evidenciando boa generalização e mínimo sobreajuste.

As arquiteturas otimizadas alcançaram alta precisão na predição das frações volumétricas com erros relativos predominantemente inferiores a 5% para mais de 96,97% dos padrões investigados e coeficientes de determinação (R^2) próximos de 1 em todos os modelos. Os resultados apresentaram alta capacidade de generalização e alta precisão na estimativa das frações volumétricas, com valores máximos do Erro Percentual Absoluto Médio (MAPE) inferiores a 2% para todos os casos analisados. Esses resultados confirmam a eficiência da abordagem híbrida Monte Carlo – DNN em traduzir as classes de energia dos nêutrons em parâmetros confiáveis, demonstrando coerência entre os dados simulados e as predições obtidas pelas redes.

Uma das principais limitações deste trabalho está associada à configuração idealizada do sistema de detecção, baseada em uma região esférica com cobertura 4π , a qual resulta na captura de praticamente todos os nêutrons espalhados. Embora essa abordagem seja vantajosa do ponto de vista estatístico e computacional, ela se afasta das condições experimentais encontradas em aplicações industriais reais, nas quais a detecção é limitada tanto pela geometria quanto pelo posicionamento dos detectores. Consequentemente, a elevada sensibilidade observada nas simulações pode superestimar a capacidade de discriminação do método quando transposto para cenários práticos.

5.3 TRABALHOS FUTUROS

Como perspectivas de continuidade, destacam-se as seguintes propostas:

- Desenvolver uma geometria de detecção mais realista, modelando detectores de nêutrons fisicamente representativos e determinando o posicionamento ótimo para a medição dos nêutrons espalhados.
- Realizar validações experimentais dos espectros da fonte de $^{241}\text{Am-Be}$.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AARABI JESHVAGHANI, P. et al. Using statistical features and a neural network to predict gas volume fractions independent of flow regime changes. **Flow Measurement and Instrumentation**, v. 93, p. 102430, 2023.

ABADI, M. et al. **TensorFlow: a system for large-scale machine learning**. Symposium on Operating Systems Design and Implementation (OSDI 2016). **Anais...**2016.

AFFONSO, R. R. W. et al. Flow regime and volume fraction identification using nuclear techniques, artificial neural networks and computational fluid dynamics. **Applied Radiation and Isotopes**, v. 159, p. 109103, 2020.

AGOSTINELLI, S. et al. Geant4—a simulation toolkit. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment**, v. 506, n. 3, p. 250–303, 2003.

AKIBA, T. et al. **Optuna**. Proceedings of the 25th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery & Data Mining. **Anais...**New York, NY, USA: ACM, 25 jul. 2019. Disponível em: <<https://dl.acm.org/doi/10.1145/3292500.3330701>>

ANDREOLLI, I. **Introdução à elevação e escoamento monofásico e multifásico de petróleo**. Rio de Janeiro: Interciência, 2016.

ATTIX, F. H. **Introduction to Radiological Physics and Radiation Dosimetry**. 1ed. ed. Wisconsin. USA: Wiley-VCH, 2004.

BEALE, R. E JACKSON, T. **Neural Computing: An Introduction**. Bristol: Adam Hilger, 1990.

BEGGS, H.D., BRILL, J. P. **Two-phase flow in pipes**. Tulsa: University of Tulsa, 1982.

BEGGS, H. D.; BRILL, J. P. A Study of Two-Phase Flow in Inclined Pipes. **Journal of Petroleum Technology**, p. 607–617, 1973.

BERGSTRA, J.; BENGIO, Y. **Algorithms for hyper-parameter optimization**. Advances in Neural Information Processing Systems 24 (NIPS 2011). **Anais...**Neural Information Processing Systems Foundation, 2011.

BISHOP, C. M.; JAMES, G. D. Analysis of multiphase flows using dual-energy gamma densitometry and neural networks. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment**, v. 327, n. 2–3, p. 580–593, 1993.

BRIESMEISTER, J. F. **MCNP – A General Monte Carlo N-Particle Transport**

Code, Version 4B. Los Alamos, 1997.

CARVALHO, A. C. L. et al. Calcium carbonate scale thickness prediction in annular three-phase flow using gamma-ray densitometry and artificial neural networks. **Radiation Physics and Chemistry**, v. 223, p. 112018, 2024.

CHADWICK, J. The existence of a neutron. **Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character**, v. 136, n. 830, p. 692–708, jun. 1932.

CHOLLET, F. **Deep Learning with Python**. Second ed. Shelter Island, NY: Manning, 2021.

CLEVERT, D. A.; UNTERTHINER, T.; HOCHREITER, S. **Fast and accurate deep network learning by exponential linear units (ELUs)**. INTERNATIONAL CONFERENCE ON LEARNING REPRESENTATIONS. **Anais...**San Juan. Anais: 2016.

DAM, R. S. DE F. et al. **Application of ^{241}Am -Be and artificial neural network to predict volume fraction in multiphase systems**. , 1 out. 2023. Disponível em: <https://inis.iaea.org/search/search.aspx?orig_q=RN:54113167>. Acesso em: 25 nov. 2024

DAM, R. S. DE F. **Cálculo de vazão em sistemas bifásicos utilizando rastreamento de partícula radioativa e redes neurais profundas**. Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2024.

DAM, R. S. F. et al. Volume fraction detection in multiphase systems using neutron activation analysis and artificial neural network. **Applied Radiation and Isotopes**, v. 214, p. 111504, 2024.

DE SOETHE, D.; GIJBELS, R.; HOSTE, J. Neutron Activation Analysis. **John Wiley & Sons, New York, United States.**, 1972.

EATON, B.A., ANDREWS, D.E., KNOWLES, C.R., SILDERBERG, I.H., B.; K.E. The Prediction of Flow Patterns, Liquid Holdup and Pressure Losses Occurring During Continuous Two-Phase Flow in Horizontal Pipelines. **Journal of Petroleum Technology**, v. 12, p. 815–828, 1967.

FLANIGAN, O. Effect of Uphill Flow on Pressure Drop in Design of Two-Phase Gathering Systems. **Oil and Gas Journal**, v. 56, p. 132–141, 1958.

GLASCOCK, M. D. **An Overview of Neutron Activation Analysis**. Columbia: University of Missouri Research Reactor (MURR), 2004.

GLOT, X.; BENGIO, Y. **Understanding the difficulty of training deep feedforward neural networks**. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON ARTIFICIAL INTELLIGENCE AND STATISTICS (AISTATS). Proceedings of Machine

Learning Research. **Anais...**Chia Laguna Resort, Sardenha: 2010. Disponível em: <<https://proceedings.mlr.press/v9/glorot10a.html>>

GOLAN, L. P.; STENNING, A. H. Two-phase vertical flow maps. Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers. **Conference Proceedings**, v. 184, n. 3, p. 110–116, 1969.

GOODFELLOW, I.; BENGIO, Y.; COURVILLE, A. **Deep learning**. Cambridge, MA: MIT Press, 2016.

GOORLEY, T. et al. Features of MCNP6. **Annals of Nuclear Energy**, v. 87, p. 772–783, jan. 2016.

GOVIER, G. W. An Horizontal Pipeline Flow of Air-Water Mixtures. **Canadian Journal of Chemical Engineering**, v. 40, p. 93–104, 1962.

GOVIER, G. W.; AZIZ, K. The Flow of Complex Mixtures in Pipes. **Van Nostrand Rheinhold**, 1972.

HAGEDORN, A. R.; BROWN, K. E. Experimental Study of Pressure Gradients Occurring During Continuous Two-Phase Flow in Small-Diameter Vertical Conduits. **Journal of Petroleum Technology**, v. 17, p. 475–484, 1965.

HAGHI*, A. H.; CHALATURNYK, R.; TALMAN, S. Stress-Dependent Pore Deformation Effects on Multiphase Flow Properties of Porous Media. **Scientific Reports**, v. 9, n. 1, p. 15004, 18 out. 2019.

HANUS, R.; PETRYKA, L.; ZYCH, M. Velocity measurement of the liquid–solid flow in a vertical pipeline using gamma-ray absorption and weighted cross-correlation. **Flow Measurement and Instrumentation**, v. 40, p. 58–63, dez. 2014.

HANUS, R.; ZYCH, M.; GOLIJANEK-JĘDRZEJCZYK, A. Measurements of Dispersed Phase Velocity in Two-Phase Flows in Pipelines Using Gamma-Absorption Technique and Phase of the Cross-Spectral Density Function. **Energies**, v. 15, n. 24, p. 9526, 15 dez. 2022.

HAYKIN, S. **Neural Networks: A Comprehensive Foundation**. New York: Macmillan Publishing, 1994.

HEBB, D. O. **The organization of behavior: a neuropsychological theory**. New York: John Wiley & Sons, 1949.

HEVESY, GEORGE; LEVI, H. The absorption and translocation of lead by plants: a contribution to the application of the method of radioactive indicators in the investigation of the change of substance in plants. **Det Kongelige Danske Videnskabernes Selskab, Matematisk-Fysiske Meddelelser**, v. 14, n. 3, 1936.

HEWITT, G. F.; HALL-TAYLOR, N. S. **Annular Two-Phase Flow**. Oxford; New

York: Pergamon Press, 1970.

HOFFMAN, R. A.; BRITT, W. B. Flow-system measurement of cell impedance properties. **Journal of Histochemistry & Cytochemistry**, v. 27, n. 1, p. 234–240, 1979.

HUGHMARK, G. . Holdup in gas-liquid flow. **Chemical Engineering Progress**, v. 53, p. 62–65, 1962.

IAEA-TECDOC-2025. **COLD NEUTRON SOURCES: PRACTICAL CONSIDERATIONS AND MODERN RESEARCH**. Vienna: IAEA, 2023.

ISHII, M.; HIBIKI, T. **Thermo-Fluid Dynamics of Two-Phase Flow**. New York: Springer, 2011.

ISO 8529-1:2001. **Reference neutron radiations — Part 1: Characteristics and methods of production**. International Organization for Standardization, 2001.

ITO, H. et al. Analyzing the neutron and γ -ray emission properties of an americium–beryllium tagged neutron source. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment**, v. 1057, p. 168701, 2023.

KAWRANKOW, I. ET AL. **The EGSnrc Code System: Monte Carlo simulation of electron and photon transport**. Ottawa: National Research Council Canada, Technical Report PIRS-701, 2017.

KINGMA, D. P.; BA, J. **Adam: A Method for Stochastic Optimization**. 3rd International Conference for Learning Representations. **Anais...**San Diego: 2015.

KLAMBAUER, G.; UNTERTHINER, T.; MAYR, A.; HOCHREITER, S. Self-normalizing neural networks. **Advances in Neural Information Processing Systems**, v. 30, p. 972–981, 2017.

KLUGE, H.; WEISE, K. The neutron energy spectrum of a ^{241}Am -Be(γ ,n) source and resulting mean fluence to dose equivalent conversion factors. **Radiat. Protect. Dosim.**, v. 2, p. 85–93, 1982.

KNOLL, G. F. **Radiation Detection and Measurement**. 4rd ed. ed. Hoboken, NJ: John Wiley & Sons, 2010.

KRUGER, P. Principles of Activation Analysis. **John Wiley & Sons, New York, United States**, 1971.

LAMARSH, J. R.; BARATTA, A. J. **Introduction to nuclear engineering**. 3. ed. Upper Saddle River, NJ: Prentice Hall, 2001.

LECUN, Y.; BENGIO, Y.; HINTON, G. Deep learning. **Nature**, v. 521, n. 7553, p. 436–444, 2015.

LOCKHART, R. W., MARTINELLI, R. C. Proposed Correlation of Data for Isothermal Two-Phase Two-Component Flow in Pipes. **Chem. Eng. Prog.**, p. 39–45, 1949.

MASELLA, J. M.; TRAN, Q. H.; FERRE, D.; PAUCHON, C. Transient simulation of two-phase flows in pipes. **International Journal of Multiphase Flow**, v. 24, n. 4, p. 739–755, 1998.

MASSIGNAM, J. P. D.; PEREIRA, E. S.; THOMÉ, V. M. R. **Medição da fração de vazios em escoamentos bifásicos borbulhantes utilizando ultra-som**. Congresso Brasileiro de P&D em Petróleo e Gás. **Anais...Campinas: ABPG**, 2007. Disponível em: <https://www.portalabpg.org.br/PDPetro/4/resumos/4PDPETRO_ABS_2_3_0065-1.pdf>

MCCONN, R. J. et al. **Compendium of Material Composition Data for Radiation Transport Modeling**. Richland, WA (United States), 2011. Disponível em: <<http://www.osti.gov/servlets/purl/1023125-QtpCud/>>.

MCCULLOCH, W. S.; PITTS, W. A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity. **The Bulletin of Mathematical Biophysics**, v. 5, n. 4, p. 115–133, 1943.

MINSKY, M.; PAPERT, S. Perceptrons. In: **Neurocomputing**. Cambridge, MA: The MIT Press, 1988. p. 161–170.

MOFFITT, G. B. et al. MCNP6 model of the University of Washington clinical neutron therapy system (CNTS). **Physics in Medicine and Biology**, v. 61, n. 2, p. 937–957, 2016.

MOSOROV, V. et al. Improvement of Flow Velocity Measurement Algorithms Based on Correlation Function and Twin Plane Electrical Capacitance Tomography. **Sensors**, v. 20, n. 1, p. 306, 2020.

MOURÃO, A. P. **Tomografia computadorizada: Tecnologias e aplicações**. 2^a edição ed. São Caetano do Sul: Difusão Editora (ou Senac São Paulo), 2015.

MURAKAWA, H.; KIKURA, H.; ARITOMI, A. Application of ultrasonic Doppler method for bubbly flow measurement using two ultrasonic frequencies. In: **Experimental Thermal and Fluid Science**. Elsevier, p. 843–850, 2005.

OLIEMANS, R. V. A. **Two-Phase in Gas-Transmission pipelines**. Joint Petroleum Mechanical Engineering & Pressure Vessels and Piping Conference. **Anais...Cidade do México, México: 76-Pet-25**, 1976.

OSMAN, A. M.; ABDEL-MONEM, A. M. Measurement of void fraction in pipes by nuclear transmission based techniques. **Annals of Nuclear Energy**, v. 152, p. 107994, 2021.

PEDREGOSA, F. et al. Scikit-learn: Machine learning in Python. **Journal of Machine Learning Research**, v. 12, p. 2825–2830, 2011.

RAMACHANDRAN, P.; ZOPH, B.; LE, Q. V. Searching for Activation Functions.

arXiv preprint, 2017.

ROSENBLATT, F. The perceptron: A probabilistic model for information storage and organization in the brain. **Psychological Review**, v. 65, n. 6, p. 386–408, 1958.

ROSHANI, M. et al. Evaluation of flow pattern recognition and void fraction measurement in two phase flow independent of oil pipeline's scale layer thickness. **Alexandria Engineering Journal**, v. 60, n. 1, p. 1955–1966, 2021.

RUMELHART, D. E.; HINTON, G. E.; WILLIAMS, R. J. Learning representations by back-propagating errors. **Nature**, v. 323, n. 6088, p. 533–536, 1986.

SALGADO, C. M. **Identificação de regimes de fluxo e predição de frações de volume em sistemas multifásicos usando técnica nuclear e rede neural artificial**. Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2010.

SALGADO, C. M.; SALGADO, W. L.; DAM, R. S. DE F. **Aplicação de técnica nuclear e rede neural artificial na indústria petrolífera: estudos de casos**. Ponta Grossa, PR: Atena Editora, 2025.

SALGADO, W. L. et al. Application of artificial intelligence in scale thickness prediction on offshore petroleum using a gamma-ray densitometer. **Radiation Physics and Chemistry**, v. 168, p. 108549, 2020.

SALGADO, W. L. et al. Volume fractions calculation of a biphasic system on cylindrical tube using gamma ray and MCNP6 code. **Brazilian Journal of Radiation Sciences**, v. 9, n. 1A, 2021.

SALGADO, W. L. et al. Void fraction prediction using prompt gamma neutron activation analysis and artificial intelligence. **Radiation Physics and Chemistry**, 2023a.

SALGADO, W. L. et al. Application of deep neural network and gamma radiation to monitor the transport of petroleum by-products through polyducts. **Applied Radiation and Isotopes**, v. 200, p. 110973, 2023b.

SALGADO, W. L.; DAM, R. S. F.; SALGADO, C. M. Optimization of a flow regime identification system and prediction of volume fractions in three-phase systems using gamma-rays and artificial neural network. **Applied Radiation and Isotopes**, v. 169, p. 109552, 2021.

SALGADO, W. L.; DAM, R. S. F.; SALGADO, C. M. Development of analytical equations for void fraction in biphasic systems using gamma radiation and MCNP6 code. **Applied Radiation and Isotopes**, v. 214, p. 111549, 2024.

SHEA, P.M., GOZANI, T. BOZORGMANESH, M. A TNA explosive detection system in airline baggage. **Nucl. Instrum. Methods**, v. Methods 29, p. 444–448, 1990.

SNOEK, JASPER; LAROCHELLE, HUGO; ADAMS, R. P. Practical Bayesian

optimization of machine learning algorithms. **Advances in Neural Information Processing Systems 25 (NIPS 2012)**, v. 25, n. NIPS 2012, p. 2951–2959, 2012.

SOUZA, J. N. M. DE. **Modelagem e simulação de escoamento multifásico em dutos de produção de óleo e gás natural**. Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2010.

TAHIR, N. A. **Estudo da aplicação da análise por ativação com nêutrons para a verificação da integridade da cimentação em poços de petróleo utilizando simulação Monte Carlo**. Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2018.

TAITEL, Y.; DUKLER, A. E. A Model For Predicting Flow Regime Transitions in Horizontal and Near-Horizontal Gas-Liquid Flow. **AIChE Journal**, v. 22, p. 47–55, 1976.

TAUHATA, L. et al. **Radioproteção e dosimetria: fundamentos**. 10. rev. ed. Rio de Janeiro: Instituto de Radioproteção e Dosimetria (IRD), Comissão Nacional de Energia Nuclear (CNEN), 2014.

THOMAS, D. et al. REVISION OF ISO 8529—REFERENCE NEUTRON RADIATIONS. **Radiation Protection Dosimetry**, v. 180, n. 1–4, p. 21–24, 2018.

VAN ROSSUM, G.; DRAKE, F. L. Python 3 Reference Manual. **Python 3 Reference Manual**, 2009.

VISED. **Visual Editor**. Disponível em: <<http://www.mcnpvised.com/visualeditor/visualeditor.html>>. Acesso em: 17 nov. 2025.

WERBOS, P. J. **Beyond regression: new tools for prediction and analysis in the behavioral sciences**. Harvard University, 1974.

WOJTAN, L.; URSNBACHER, T.; THOME, J. R. Measurement of dynamic void fractions in stratified types of flow. *Therm. Fluid Science* **29**, p. 383–392, 2005.

ZAMBONI, C. B.; GENIZINI, F. A. **Análise por Ativação com Nêutrons (AAN)**. São Paulo: Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (IPEN), 2007.

ANEXO 1 – FUNÇÕES DE ATIVAÇÃO

As funções de ativação têm um papel fundamental no desempenho das redes neurais artificiais, pois são responsáveis por introduzir não linearidade no modelo, permitindo que a rede aprenda relações complexas entre as variáveis de entrada e saída. Sem essas funções, a rede se comportaria como um modelo linear, independentemente do número de camadas ocultas. Entre as funções de ativação mais utilizadas em redes neurais profundas destacam-se: ELU, ReLU e Swish.

Função ELU

A função ELU (*Exponential Linear Unit*) é projetada para evitar o problema do *vanishing gradient* e acelerar a convergência do treinamento. Sua formulação é expressa pela Equação 15.

$$ELU(z) = \{z, z \geq 0; \alpha(e^z - 1), z < 0$$

Equação 15

Função ReLU

A função ReLU (*Rectified Linear Unit*) é a mais amplamente utilizada em redes neurais profundas devido à sua simplicidade computacional e eficiência no aprendizado. Sua formulação é dada pela Equação 16.

$$ReLU(z) = \max(0, x)$$

Equação 16

Função Swish

A função *Swish* (*Sigmoid-weighted Linear Unit*), proposta por Ramachandran *et al.* (2017), é uma função suave e contínua, que pode apresentar desempenho superior à ReLU em várias arquiteturas profundas. Sua definição é apresentada na Equação 17.

$$Swish(z) = \frac{z}{1 + e^{-z}} = z \cdot \text{sigmoide}(z)$$

Equação 17

A seguir, apresentam-se os gráficos das funções de ativação discutidas, mostrando o comportamento delas em relação ao domínio de entrada z (ver Figura 29).

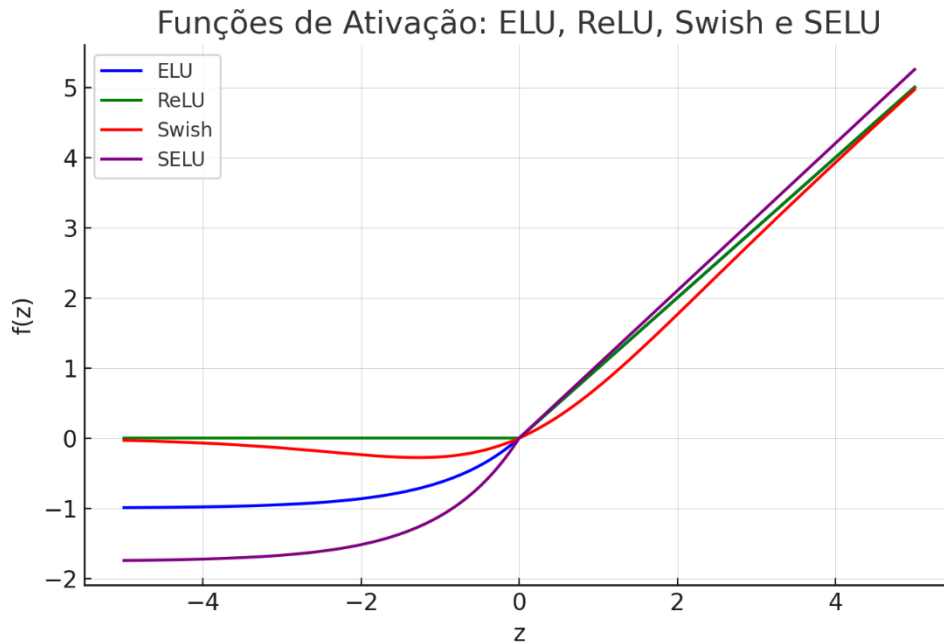


Figura 29: Funções de Ativação (Fonte: O autor).

Derivadas das Funções de Ativação

As derivadas das funções de ativação são fundamentais para o processo de retropropagação do erro (*backpropagation*), pois determinam como os pesos da rede serão atualizados durante o aprendizado.

Derivada da Função ELU

A primeira derivada da função ELU (*Exponential Linear Unit*) é uma função boa para evitar o problema do *vanishing gradient* e para acelerar a convergência. A formulação ELU é dada a seguir pela Equação 18.

$$ELU'(z) = \begin{cases} 1, & z \geq 0 \\ \alpha e^z, & z < 0 \end{cases}$$

Equação 18

Derivada da Função ReLU

A formulação ReLU é dada a seguir pela Equação 19.

$$ReLU'(z) = \begin{cases} 1, & z > 0 \\ 0, & z \leq 0 \end{cases}$$

Equação 19

Derivada da Função Swish

A derivada da função Swish é dada por pela Equação 20.

$$Swish'(z) = \sigma(z) + z \cdot \sigma(z)(1 - \sigma(z))$$

Equação 20

A Figura 30 ilustra o comportamento das derivadas das funções de ativação ELU, ReLU, Swish e SELU. Observa-se que a ReLU possui uma derivada constante igual a 1 para valores positivos e nula para negativos, o que pode ocasionar o problema dos “neurônios mortos”. Em contraste, as funções ELU e SELU suavizam a transição, mantendo gradientes não nulos também em valores negativos, favorecendo a convergência. A função Swish exibe uma derivada contínua e suave em toda a faixa de z , combinando propriedades lineares e não lineares, o que resulta em um aprendizado mais estável e eficiente.

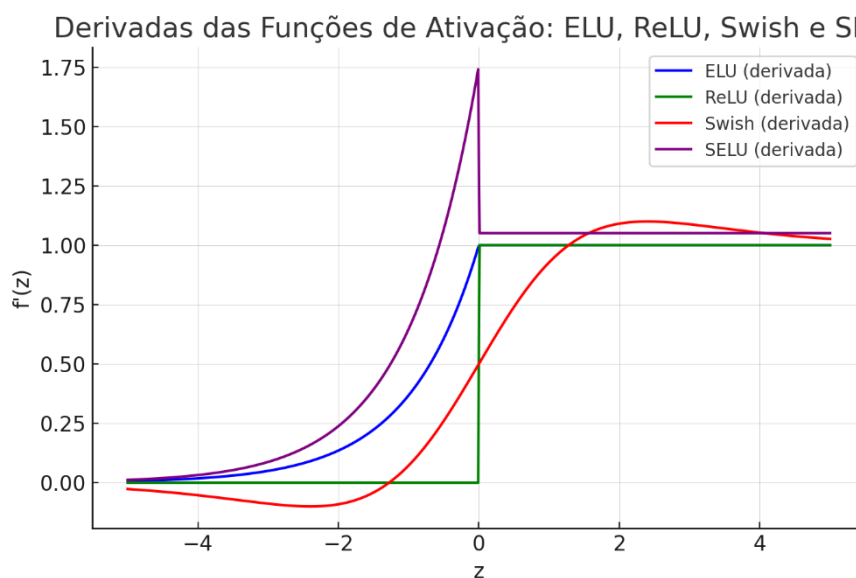


Figura 30: Derivadas das Funções de Ativação (Fonte: O autor).

O gráfico mostra o comportamento das derivadas das principais funções de ativação utilizadas em redes neurais profundas, evidenciando diferenças de suavidade e saturação entre elas. Em síntese, as funções de ativação e suas derivadas exercem papel central no processo de aprendizado das redes neurais artificiais. Funções contínuas e diferenciáveis, como *Swish*, ELU e SELU, promovem gradientes mais estáveis, reduzindo o risco de saturação e de *vanishing gradient*, o que melhora a capacidade da rede de aprender relações complexas e não lineares. Dessa forma, a escolha adequada da função de ativação impacta diretamente a velocidade de convergência, precisão dos resultados e generalização do modelo, aspectos essenciais para o desempenho de redes neurais profundas.

Aplicação na Retropropagação do Erro

No processo de aprendizado, a retropropagação (*backpropagation*) utiliza as derivadas das funções de ativação para calcular o gradiente da função de perda em relação aos pesos sinápticos $W^{(l)}$. Esse gradiente é expresso genericamente utilizando a Equação 21.

$$\frac{\partial L}{\partial W^{(l)}} = \frac{\partial L}{\partial a^{(l)}} \cdot \frac{\partial a^{(l)}}{\partial z^{(l)}} \cdot \frac{\partial z^{(l)}}{\partial W^{(l)}}$$

Equação 21

Simplificando, obtém-se a Equação 22.

$$\frac{\partial}{\partial W^{(l)}} = \delta^{(l)} \cdot (a^{(l-1)})^T$$

Equação 22

Nessa formulação, $\delta^{(l)}$ representa o erro propagado da camada $l + 1$ para a camada l , enquanto $a^{(l-1)}$ corresponde às ativações da camada anterior. Assim, as derivadas das funções de ativação determinam como o erro é retropropagado e ajustam o grau de atualização dos pesos da rede.