



IDENTIFICAÇÃO DA REGIÃO DE INTERFACE PARA MONITORAÇÃO NO
TRANSPORTE DE SUBPRODUTOS DE PETRÓLEO EM POLIDUTOS USANDO
RADIAÇÃO GAMA E REDES NEURAIAS ARTIFICIAIS

William Luna Salgado

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

Orientador: Ademir Xavier da Silva

Rio de Janeiro
Setembro de 2021

IDENTIFICAÇÃO DA REGIÃO DE INTERFACE PARA MONITORAÇÃO NO
TRANSPORTE DE SUBPRODUTOS DE PETRÓLEO EM POLIDUTOS USANDO
RADIAÇÃO GAMA E REDES NEURAIS ARTIFICIAIS

William Luna Salgado

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

Orientadores: Ademir Xavier da Silva

Aprovada por: Prof. Ademir Xavier da Silva
Profª. Inayá Corrêa Barbosa Lima.
Dr. Cláudio Márcio do Nascimento Abreu Pereira.
Prof. José Marques Lopes.
Prof. Edmilson Monteiro de Souza.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL
SETEMBRO DE 2021

Salgado, William Luna

Identificação da região de interface para monitoração no transporte de subprodutos de petróleo em polidutos usando radiação gama e redes neurais artificiais / William Luna Salgado. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2021.

XIV, 89 p.: il.; 29,7 cm.

Orientador: Ademir Xavier da Silva

Tese (doutorado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Nuclear, 2021.

Referências Bibliográficas: p. 74-81.

1. Região de Interface. 2. Transporte em polidutos. 3. Radiação gama. 4. Código MCNP6. 5. Nível de pureza. 6. Rede neural artificial. I. Silva, Ademir Xavier da. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Nuclear. III. Título.

A Deus, por permitir que eu chegasse até o fim.

À minha família, em especial ao meu Pai.

E a todos aqueles que também acreditaram

Verdadeiramente.

AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer ao orientador Prof. Dr. Ademir Xavier da Silva que guiou este trabalho com dedicação e compreensão desde o período de aquisição de conhecimentos teóricos até a etapa de conclusão. Igualmente, apresento meus cumprimentos:

À Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ) e ao Instituto de Engenharia Nuclear (IEN) pelo conhecimento técnico-científico adquirido para a realização deste trabalho.

Aos professores da COPPE/PEN pelos conhecimentos transmitidos ao longo da minha trajetória no curso de doutorado e a todo corpo administrativo pela ajuda em todos os processos administrativos.

Aos meus pais, César e Luciane pelo esforço realizado durante minha educação e instrução que me propiciou chegar até aqui, fato este de suma importância para toda minha família e para mim.

À minha companheira Alessandra Galvão pelo auxílio, paciência, ensinamentos, compreensão e muito carinho, dedicado ao longo deste trabalho.

Aos amigos feitos no IEN pela ajuda e torcida a favor, em especial, Eddie J. Avilan Puertas e Eder Fernando da Silva.

Aos amigos e torcedores: Maurício Lopes, Vinicius Luz, Virgínia Silveira e Ricardo Agnez pelos incentivos durante todo este trabalho.

Reafirmo meus agradecimentos a todos que citei e aproveito para agradecer também aos que, porventura, tenha deixado de citar. Dedico a vocês este trabalho, mérito da cooperação de todos.

Por fim, meu muito obrigado a todos que direta ou indiretamente contribuíram para a realização deste trabalho.

“No que diz respeito ao desempenho, ao compromisso, ao esforço, à dedicação, não existe meio termo. Ou você faz uma coisa bem-feita ou não faz.”

(Ayrton Senna)

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

IDENTIFICAÇÃO DA REGIÃO DE INTERFACE PARA MONITORAÇÃO NO
TRANSPORTE DE SUBPRODUTOS DE PETRÓLEO EM POLIDUTOS USANDO
RADIAÇÃO GAMA E REDES NEURAIIS ARTIFICIAIS

William Luna Salgado

Setembro/2021

Orientador: Ademir Xavier da Silva

Programa: Engenharia Nuclear

Este trabalho apresenta uma metodologia para identificar a região de interface de subprodutos de petróleo transportados em polidutos usando densitometria gama e rede neural artificial para reduzir o volume de produtos contaminados. A simulação matemática da geometria de medição é composta por uma fonte de raios gama com energia de 662 keV (^{137}Cs), a fonte é colimada para obter um feixe de radiação estreito, e dois detectores NaI(Tl) de $1\frac{1}{4} \times \frac{3}{4}$ ", um para medir o feixe transmitido e outro para medir o feixe espalhado. A função resposta de um detector real foi validada experimentalmente e forneceu dados mais realísticos para a simulação matemática. Diversos raios de uma tubulação de aço foram investigados variando de 4 a 10 polegadas. Os modelos estáticos adotados foram desenvolvidos usando o código MCNP6, para um regime de fluxo estratificado. Fluidos encontrados na indústria petrolífera, gasolina, querosene, óleo combustível e glicerina, foram usados para compor diversas combinações de níveis de pureza. Desta forma, os espectros registrados em ambos os detectores foram usados como dados de entrada para treinamento e avaliação de redes neurais artificiais. Além disto, desenvolveu-se um sistema inteligente baseado em duas redes neurais (Classificadora e Preditora) visando aumentar a precisão dos resultados. A metodologia proposta apresenta potencial para identificar a região de interface apresentando precisão de 1% como nível de impureza. Estes resultados foram avaliados com as métricas Erro relativo médio e erro quadrático médio e apresentaram 1,12% e 0,204 para todos os padrões investigados respectivamente.

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

IDENTIFICATION OF THE INTERFACE REGION FOR MONITORING THE
TRANSPORT OF PETROLEUM BY-PRODUCTS IN POLYDUCTS USING
GAMMA RADIATION AND ARTIFICIAL NEURAL NETWORKS

William Luna Salgado

September/2021

Advisor: Ademir Xavier da Silva

Department: Nuclear Engineering

This study presents a methodology to identify the interface region of petroleum by-products transported in polyducts using gamma-ray densitometry and an artificial neural network to reduce the volume of contaminated products. The mathematical simulation of the measurement geometry is composed of a 662 keV (^{137}Cs) gamma-ray source and scintillation detectors. The source is collimated to obtain a narrow radiation beam, and two $1\frac{1}{4}\times\frac{3}{4}$ " NaI(Tl) detectors were used, one to measure the transmitted beam and the other to measure the scattered beam. The response function of a real detector was experimentally validated and provided more realistic data for mathematical simulation. Several radii of this steel duct were investigated ranging from 4 to 10 inches. Static models were developed using the MCNP6 code, for a stratified flow regime. Fluids found in the oil industry, gasoline, kerosene, fuel oil and glycerol were used to compose various combinations of purity levels. In this way, the spectra recorded in both detectors were used as input data for training and evaluation of artificial neural networks. Furthermore, an intelligent system based on two neural networks (Classifier and Predictor) was developed to increase the accuracy of the results. The proposed methodology has the potential to identify the interface region presenting 1% accuracy as the degree of impurity. These results were evaluated with the mean relative error and root mean squared error metrics and presented, respectively, 1.12% and 0.204 for all investigated patterns.

SUMÁRIO

SUMÁRIO.....	ix
LISTA DE FIGURAS	xi
LISTA DE TABELAS	xiii
LISTA DE SIGLAS E ABREVIACÕES	xiv
CAPÍTULO 1	1
1 – INTRODUÇÃO.....	1
1.1 – Revisão Bibliográfica	5
1.2 – Objetivo	11
1.3 – Relevância.....	12
CAPÍTULO 2	13
2 - FUNDAMENTOS TEÓRICOS	13
2.1 - Transporte de Produtos em Polidutos.....	13
2.2 – Fundamentos da Radiação	15
2.2.1 – Interação da radiação gama com a matéria.....	16
2.2.2 – Atenuação do feixe de fótons.....	20
2.2.3 – Detecção da radiação ionizante.....	21
2.2.4 – Detectores de NaI(Tl)	23
2.3 – Cálculo de Fração de Volume com Densitometria Gama.....	27
2.4 – O Método de Monte Carlo	30
2.4.1 – O Código MCNP6	31
2.5 – Redes Neurais Artificiais	33
2.5.1 – Redes Neurais Artificiais Multicamadas	35
2.5.2 – Algoritmo de Treinamento de Retropropagação do Erro (<i>Back-propagation</i>).....	36
CAPÍTULO 3	38
3 – MATERIAIS E MÉTODOS.....	38
3.1 – Materiais	38
3.2 – Metodologia	40
3.2.1 – Características do detector NaI(Tl).....	40
3.2.2 – Modelagem do detector de NaI(Tl)	41
3.2.3 – Geometria proposta do sistema de medição	44
3.2.4 – Predição da pureza dos fluidos por RNA.....	46

3.2.5 – Avaliação da robustez do treinamento.....	49
3.2.6 – Aperfeiçoamento do sistema proposto e identificação do fluido.....	52
CAPÍTULO 4	54
4 – RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	54
4.1 – Validação da modelagem do detector de NaI(Tl).....	54
4.2 – Desenvolvimento dos Modelos para RNA (fração de volume).....	57
4.3 – Predição do Nível de Pureza.....	59
4.3.1 – Potencialidade das ferramentas utilizadas	59
4.3.2 – Resultado para a generalização do modelo.....	65
4.3.3 – Resultado do aperfeiçoamento do modelo.....	69
CAPÍTULO 5	72
5 – CONCLUSÕES.....	72
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	74
APÊNDICE A	82
ARTIGOS PUBLICADOS EM REVISTAS INTERNACIONAIS.....	85
ARTIGOS SUBMETIDOS EM REVISTAS INTERNACIONAIS	89

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Região de interface no poliduto.	14
Figura 2: Representação do efeito fotoelétrico (TAUHATA, 2013).	17
Figura 3: Diagrama esquemático do espalhamento incoerente (TAUHATA, 2013).	17
Figura 4: Esquema ilustrativo das possibilidades de interação de fótons com a matéria.	19
Figura 5: Probabilidade de ocorrência dos efeitos em função do número atômico do material absorvedor e da energia da radiação gama (TAUHATA, 2013).	20
Figura 6: Esquema típico de detecção para um detector cintilador NaI(Tl).	22
Figura 7: Geração de um pulso elétrico em um detector cintilador NaI(Tl)	23
Figura 8: Resolução típica de um detector de NaI(Tl) (baixa resolução) para dois picos de energia em comparação com um detector de alta resolução.	26
Figura 9: Comparação de duas FWHM para detectores distintos.	27
Figura 10: Geometria usada para cálculo de fração de volume.	28
Figura 11: Estrutura de uma Rede Neural Artificial MLP.	35
Figura 12: Representação esquemática da fonte radioativa: a) modelo utilizado no código MCNP6; b) deposição de material radioativo.	39
Figura 13: Representação esquemática do Modelo matemático do detector NaI(Tl).	41
Figura 14: Geometria de medição simulada proposta para cálculo do nível de pureza.	45
Figura 15: Arquitetura da RNA1 para cálculo da pureza dos fluidos.	47
Figura 16: Densidade de cada região de interface (<i>transmix</i>) simulada para os quatro fluidos. .	50
Figura 17: Configuração da RNA 2 desenvolvida neste estudo.	51
Figura 18: Rede classificadora dos fluidos presentes na região de interface.	53
Figura 19: Rede preditiva desenvolvida para aumentar a precisão do cálculo da pureza dos fluidos.	53
Figura 20: Curva de eficiência obtida por modelagem matemática e validada experimentalmente.	55
Figura 21: Curva de resposta FWHM em função da energia.	56
Figura 22: Comparação da forma dos espectros experimental e simulado no código para fonte de: a) Césio, b) Amerício.	57
Figura 23: Espectros obtidos com a simulação de gasolina e óleo.	58
Figura 24: Conjunto de padrões: Treinamento, Teste e Produção: a) para todo os padrões; b) zoom na região de 0 a 10 %.	59
Figura 25: Espectros obtidos pelo código MCNP6 para o detector: a) de transmissão (D1) de espalhamento: b) D2 em 15°; c) D2 em 30° e d) D2 em 45°.	60
Figura 26: Correlação entre resultados da RNA1 e dados reais para os padrões de Treinamento.	61

Figura 27: Resultados obtidos pela RNA1 para o nível de pureza do subconjunto de teste.	62
Figura 28: Curva representativa da região de interface.....	64
Figura 29: Correlação entre resultados da RNA 2 e padrões reais considerando os subconjuntos: a) Treinamento; b) Teste.....	65
Figura 30: Erros absolutos de todos os padrões para cada par de fluidos.....	67
Figura 31: Resposta do indicador de pureza da RNA 2 para o subconjunto de Validação	68
Figura 32: Precisão da predição para cada par de fluidos.	69

LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Características das fontes utilizadas para avaliação da resposta do detector.	38
Tabela 2: Dados dos fluidos investigados neste estudo.	49
Tabela 3: Valores para os coeficientes de ajuste da curva de eficiência.	56
Tabela 4: Valores dos coeficientes de ajuste da função GEB.	57
Tabela 5: Comparação dos resultados obtidos pela solução analítica e código MCNP6.	58
Tabela 6: Parâmetros de treinamento da RNA1.	61
Tabela 7: Predição da RNA1 para o conjunto de Validação	62
Tabela 8: Análise da predição da RNA1 usando parâmetros estatísticos.	63
Tabela 9: Classificação de faixa de erros para a predição da RNA1.	63
Tabela 10: Predição da RNA 2 para o conjunto de Validação.	66
Tabela 11: Análise da predição da RNA 2 usando parâmetros estatísticos.	67
Tabela 12: Classificação de faixa de erros para a predição da RNA 2.	68
Tabela 13: Matriz de Confusão para cada par de fluido.	70
Tabela 14: Classificação de faixa de erros para a predição da RNA 4.	70
Tabela 15: Métricas matemáticas para avaliação da predição da rede RNA 4.	71

LISTA DE SIGLAS E ABREVIACÕES

AIEA:	Agência Internacional de Energia Atômica (<i>International Atomic Energy Agency</i> – IAEA)
AMC:	Analisador MultiCanal (<i>MultiChannel Analyzer - MCA</i>)
DAP:	Distribuição de Altura de Pulsos
DFD:	Distância Fonte-Detector
FVF:	Fração de Volume de Fluido
FWHM:	Largura à meia altura do fotopico (<i>Full Width at Half Maximum</i>)
GEB:	<i>Gaussian Energy Broadening</i> (comando disponibilizado no MCNP)
MCNP:	<i>Monte Carlo N-Particle</i> : Código computacional para transporte de radiação
MLP:	Arquitetura de rede <i>feed-forward Multilayer Perceptron</i>
NaI(Tl):	Detector cintilador de Iodeto de Sódio dopado com Tálcio
NPS:	Número de histórias (<i>Number of Starting Particles</i>)
PLA:	Ácido Polilático
RNA:	Rede Neural Artificial
INP:	Arquivo de entrada (<i>Input</i>)
MRE:	Erro relativo médio (<i>Mean Relative Error</i>)
RMSE:	Erro quadrático médio (<i>Root Mean Squared Error</i>)

CAPÍTULO 1

1 – INTRODUÇÃO

O petróleo é a principal fonte de energia do mundo moderno e está presente em uma série de produtos que se usa cotidianamente. O petróleo é um óleo de origem fóssil que leva milhões de anos para ser formado nas rochas sedimentares em áreas marítimas e terrestres. O petróleo é uma matéria-prima muito utilizada em várias atividades industriais, pois pode ser transformado em diversos produtos, tais como: diesel, gasolina, óleo combustível, gás liquefeito de petróleo (GLP), querosene e nafta. Além disso, também está presente em fertilizantes, plásticos, tintas e borrachas entre outros produtos. Devido a importância do petróleo na vida de todos nós, existe uma necessidade crescente na demanda do transporte dessas *commodities*, suas atividades de extração, refino e distribuição são de grande importância para a economia de um país.

O transporte de grandes quantidades de alguns destes produtos vem sendo realizado por meio de dutovias, que são um sistema de dutos interconectados. Normalmente, as dutovias comumente utilizadas na indústria transportam apenas um único produto, como por exemplo, as linhas de transporte que conectam as plataformas de exploração *offshore* à costa. No entanto, visando o aperfeiçoamento deste modal, que requer altos investimentos para sua instalação, apresenta-se como alternativa o seu uso para transportar diversos tipos de produtos em uma única dutovia, também chamado de poliduto, tais como os oleodutos. Esse transporte é comumente utilizado por refinarias e terminais, pois permite que múltiplos produtos possam ser transportados pela mesma dutovia (MOHITPOUR, 2005).

Na indústria petrolífera, o transporte por meio deste modal é bastante comum na distribuição de seus derivados, representando uma excelente alternativa para movimentar, principalmente, grandes volumes de produtos para longas distâncias. Apresenta algumas vantagens, quando se compara com outros modais, tais como: elimina a necessidade de estocagens, reduz as perdas de produtos, aumenta a segurança na operação, e como consequência torna-se mais econômico (SOUZA, 2015; CAFARO e CERDÁ, 2007; FREIRE, 2009).

No Brasil, existem muitos polidutos instalados e um que se destaca é o poliduto denominado OSBRA (São Paulo – Brasília), que fica localizado na região Sudeste e possui uma extensão de 964 km, e tubulação com diâmetro de 12 polegadas. Suas

principais instalações são compostas por terminais de armazenamento de combustíveis para distribuição (ramais locais de distribuição e bases de carregamento de caminhões-tanque) e estações de bombeamento (KOTCHETKOFF, 2009). Este poliduto transporta: óleo diesel, gasolina, GLP e querosene de aviação (QAV). Sua capacidade máxima mensal é de 920.793 m³ e transportou 7.293.039 m³ em 2016 (TRANSPETRO).

A operação de transporte de produtos em polidutos é realizada em forma de bateladas¹ sequenciais. Por isso, é necessário decidir quais produtos devem ser transportados em determinado momento, ou seja, a sequência de transporte dos produtos. Neste caso, o gerenciamento e a operação da linha de transporte devem considerar algumas variáveis, tais como: a disponibilidade do produto e as características físico-químicas dos produtos. Este tipo de operação de transferência pode ser realizado sem o uso de separadores físicos (*pigs*²), o que provoca a formação de uma mistura na região entre os dois produtos, ou seja, é inevitável que ocorra o contato físico entre duas bateladas consecutivas formando uma região de mistura, comumente chamada de região de interface. Como exemplo, considere o transporte de dois produtos A e B, suponha que o produto A está sendo bombeado, quando em certo momento, o produto B é inserido no duto. A partir daí o produto B começa a empurrar o produto A. Nesta troca inicia-se a formação da região de interface que representa a área de contato entre os dois produtos. Normalmente, a região de interface é incorporada ao produto menos nobre (menos rigoroso em relação à especificação de qualidade), já em alguns casos, ela não pode ser incorporada a nenhum dos dois produtos por apresentar características incompatíveis com os mesmos (VICENT-GENOD, 1984). A título de ilustração, considere uma sequência de bateladas em um poliduto entre gasolina e GLP que produz uma interface que necessita ser separada e tratada. Enquanto que, na batelada entre gasolina comum e gasolina *premium*, a mistura formada na região de interface vai ser incorporada como gasolina comum, já que esta interface poderá perder a especificação de gasolina *premium*.

A região de interface aumenta ao longo do comprimento do poliduto, à medida que é “movimentada”. Esse processo deve-se a uma combinação de diversos fatores, tais como: o perfil de velocidade e regime do escoamento, a dimensão do poliduto, a viscosidade dos fluidos e à ação da turbulência. Desta forma, o volume da região de

¹ O termo batelada é usado na indústria para designar uma determinada quantidade de um produto.

² Pigs instrumentados são ferramentas para a inspeção interna em dutos que transportam óleo e seus derivados.

interface depende diretamente das condições de operação e gerenciamento do poliduto e dos produtos a serem transportados, e é de grande importância, pois qualquer erro na estimativa da região de interface pode conduzir a perda de uma batelada inteira, caso ela fique fora da especificação (FOWLER e BROWN, 1943).

O processo de formação da região de interface gera custos adicionais para as companhias transportadoras, pois são necessários tratamento em unidades de separação, reprocessamento³ do volume oriundo da região de interface em uma refinaria ou a perda de valor de mercado dos produtos. Assim, é fundamental dispor de um mecanismo que possa estimar e minimizar tanto quanto possível o tamanho da região de interface (JONES e PADDOCK, 1982; TECHO e HOLBROOK, 1974). Por isso, para a indústria de produção e transporte de petróleo há uma clara necessidade de dispositivos que possibilitem a avaliação correta com precisão dos diversos parâmetros que envolve o transporte por polidutos, tais como: a vazão, o regime de fluxo, a região de interface e a fração de volume e velocidade superficial de cada produto.

A identificação da região de interface, na prática, é realizada por meio da construção de uma curva de densidades. O início da região de interface é definido quando ocorre variação na medição de um densímetro localizado em um dos extremos do poliduto e quando a resposta deste densímetro volta a ficar constante e igual à densidade do segundo produto, considera-se o fim da região de interface. Embora sensores convencionais possam ser utilizados para determinar a densidade dos produtos, eles são caros devido aos altos custos de instalação e manutenção, pois precisam ficar em contato físico com o produto, o qual pode ser abrasivo/corrosivo, causando danos aos sensores que necessitam serem trocados periodicamente (CARVALHO *et al.*, 2003). Isto mostra a necessidade de desenvolver metodologias que sejam capazes de identificar de forma precisa a região de interface em diferentes combinações de produtos, desta forma aperfeiçoando o transporte em polidutos e reduzindo os custos operacionais.

No contexto das técnicas nucleares, a técnica da densitometria gama vem sendo aplicada de forma satisfatória em diversas áreas, tais como nas medidas de fluxo (MI *et al.*, 1998), na monitoração de aplicações de produtos e derivados de petróleo (KHORSANDI e FEGGHI, 2011; SALGADO *et al.*, 2020a), nos cálculos de frações de volume (ABOUELWABA e KENDALL, 1980; NAZEMI *et al.*, 2016; SALGADO *et*

³ Além do custo do reprocessamento, há também o custo do transporte até a refinaria e outros custos decorrentes desta logística reversa.

al., 2020b; 2009, 2010; HANUS *et al.*, 2018), na predição da densidades de produtos (ABDULRAHMAN e SHOKIR, 2011; SALGADO *et al.*, 2016; ROSHANI *et al.*, 2018) e no rastreamento de partículas radioativas (DAM *et al.*, 2019). Neste cenário, a densitometria gama pode substituir os sensores convencionais, pois podem fornecer medidas confiáveis, em tempo real, da flutuação da densidade com alta precisão sem modificar as condições operacionais da planta industrial, visto que os procedimentos de análise não são invasivos. Estas vantagens tornam estes medidores de densidade muito importante na indústria e, por esta razão, tem sido investigado e aperfeiçoado por muitos pesquisadores (SALGADO *et al.*, 2016; KHORSANDI e FEGHHI, 2011; ROSHANI *et al.*, 2013; KHORSANDI *et al.*, 2013; MOOSAVI e SOLTANI, 2013; SABZEVARI e MOOSAVI, 2014; HASSAN *et al.*, 2009; CHUONG *et al.*, 2020). Além disso, a alta sensibilidade dos detectores de radiação NaI(Tl) permite o uso de fontes radioativas seladas com atividades menores, de forma a minimizar o risco radiológico dos trabalhadores.

A técnica é baseada na incidência de um feixe de raios gama que, após interagirem com o sistema investigado, são registrados por um ou mais detectores de radiação. Assim é possível determinar a pureza do produto que está sendo transportado, ou seja, como a região de interface é formada pela mistura de dois produtos distintos, a densidade desta região é diferente da densidade de cada material puro. A análise por medidas de transmissão e espalhamento de raios gama pode ser obtida por meio de equações analíticas ou pela comparação dos sinais registrados por detector(es) com um conteúdo de uma tabela de calibração de densidades. No entanto, as soluções por equações analíticas geralmente são fornecidas para condições de contorno muito restritas e qualquer variação em um dos diversos parâmetros pode até inviabilizar seu uso. Da mesma forma, esta tabela pode ser influenciada por parâmetros importantes que dependem das condições de medições, tais como: raio do duto, espessura das paredes do duto, temperatura e pressão, e até mesmo erros causados no próprio procedimento de calibração (MAUCEC e DENIJS, 2009).

Uma solução para contornar estes problemas é a utilização de ferramentas de inteligência artificial, como as redes neurais artificiais (RNAs), para reconhecer distintas informações presentes nas distribuições de altura de pulsos (DAPs) obtidas por um ou mais detectores, podendo prever satisfatoriamente o nível de pureza dos produtos, e, assim identificando a região de interface. No entanto, para utilizar a RNA é necessário um conjunto de padrões com diferentes níveis de pureza e raios do tubo. Para

isso, foi desenvolvida uma geometria de medição, considerando um regime de fluxo estratificado e os fluidos gasolina e óleo, usando a técnica de densitometria gama com dupla modalidade pelo código computacional MCNP6 (GOORLEY *et al.*, 2016) baseado no método de Monte Carlo⁴. Essa técnica de medição dos feixes transmitidos e espalhados é capaz de fornecer uma maior sensibilidade na previsão do nível de pureza dos fluidos.

Esta situação mostra a necessidade de desenvolver uma metodologia para a identificação precisa da região de interface encontrada no transporte de subprodutos de petróleo em polidutos para reduzir o volume de produtos reprocessados. Desta forma, diminuindo o impacto econômico e mantendo a qualidade de todos os produtos transportados, bem como a economia de energia elétrica que é usada para a operação da bomba que impulsiona os produtos. Por isso, é de fundamental importância determinar o instante em que um fluido transportado é considerado puro, ou seja, sem mistura, ajudando a preservar a integridade do fluido transportado.

1.1 – REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Há uma série de modelos disponíveis na literatura que visam aproximar a extensão da região de interface. No entanto, esses modelos variam em suas previsões e têm um alcance muito restrito, pois a maioria das equações considera alguns parâmetros e negligenciam outros que influenciam no crescimento da região de interface. O efeito da dispersão axial longitudinal⁵, sugerido amplamente como o fenômeno governante do processo de mistura dos produtos no transporte em polidutos, descreve a interação de um meio contaminante em outro meio, devido aos efeitos de mistura que ocorrem quando dois meios estão em contato um com o outro diretamente em um poliduto.

FOWLER e BROWN (1943), BIRGE (1947) e SMITH e SULZE (1948) realizaram as primeiras investigações experimentais sobre a região de interface em transporte de petróleo e derivados. Eles observaram que esta região é função de parâmetros do sistema, tais como: volume, propriedades físico-químicas (densidade e

⁴ O método é uma ferramenta de simulação largamente usada para o transporte de radiação, principalmente onde medidas físicas são impraticáveis ou inconvenientes.

⁵ O termo dispersão axial refere-se à contaminação longitudinal devido aos efeitos convectivos e difusivos, predominantes no escoamento de bateladas de produtos em polidutos.

viscosidade) e velocidade do fluido (número de Reynolds). Observações do escoamento permitiram concluir que o comprimento da região era diretamente proporcional ao comprimento do duto e inversamente proporcional ao número de Reynolds. No entanto, tais informações eram úteis apenas para os sistemas em que foram realizadas tais observações, não sendo possível avaliar a reprodutibilidade do método.

DANCKWERTS (1953) realizou estudos teóricos sobre a dispersão longitudinal e sugeriu a aplicação de funções de distribuição de tempo de residência (RTD) para estimar o escoamento de fluidos em dutos. Afirmava que no modelo de escoamento de pistão perfeito, o perfil de velocidades e consequentemente a dinâmica do escoamento “sofria” a ação do efeito de borda nas paredes do duto que afetaria a dispersão longitudinal. Nesse modelo o perfil de concentração do contaminante tem uma forma parabólica devido ao gradiente de velocidade do escoamento, mas a difusão radial presente deforma esse perfil parabólico.

TAYLOR (1954) sugeriu, por meio de um balanço energético de um escoamento turbulento, que o perfil de velocidade desempenha um papel significativo na dispersão de um meio no outro na direção axial e propôs um modelo semelhante à equação de difusão convencional para determinar o comprimento da região de interface em função da velocidade do fluido e do coeficiente de correlação da flutuação da velocidade. A região de interface pode ser estimada como sendo diretamente proporcional a raiz quadrada do comprimento de duto percorrido pela interface dos produtos. No entanto, a estimativa do coeficiente de correlação da velocidade dificulta sua aplicação.

LEVENSPIEL e SMITH (1957) sugeriram um modelo utilizando a técnica de traçadores e a medição das funções distribuição do tempo de residência. Propuseram um modelo que considera o número de Péclet para o cálculo do coeficiente de dispersão longitudinal de um meio no outro. O modelo considera os coeficientes de dispersão como uniformes em toda a área da seção transversal do fluxo e que tal suposição só será válida em números elevados de Reynolds, isto é, em altas velocidades de escoamento dos fluidos. Quando se considera a definição clara da extensão da região de interface entre dois meios em um poliduto o modelo matemático desse escoamento deve relacionar as características físicas do sistema (comprimento e diâmetro do duto, rugosidade das paredes) bem como do escoamento (propriedades físico/químicas do

fluido, temperatura e pressão interna, volume transferido) para descrever o fenômeno de mistura entre os meios.

AUSTIN e PAULFREY (1964) publicaram um dos principais avanços na investigação da dispersão axial. Eles reuniram dados experimentais disponíveis na literatura e identificaram, para um escoamento turbulento, um processo de estratificação dentro do duto que origina curvas de dispersão distintas cujo coeficiente de dispersão é dependente do número de Reynolds do escoamento. Os autores propuseram determinar o coeficiente de dispersão axial levando em consideração o fato de que a região turbulenta seria formada por três sub-regiões: subcamada laminar, camada amortecedora e núcleo turbulento, cada um com um perfil dependente do número de Reynolds.

ABOUELWafa e KENDALL (1980) descreveram uma metodologia utilizando a técnica de atenuação de raios gama para medir, de maneira estática, a fração de volume de misturas trifásicas de ar, água e óleo. O método desenvolvido é uma forma precisa e simples de determinar as frações de volume em qualquer circunstância em dutos multifásicos.

CHIKWENDU e OJIAKOR (1985) descreveram o escoamento em um duto como sendo composto por duas camadas distintas com cada uma possuindo diferentes características de difusão e perfis de velocidade. A camada interna apresenta uma velocidade de escoamento mais rápida e uma subcamada externa mais lenta, definindo um coeficiente de dispersão efetivo. Em analogia, a teoria proposta por Danckwerts, a função de distribuição de tempo de residência é obtida a partir das soluções separadas para as duas camadas, ou seja, as soluções são independentes de cada camada e são sobrepostas para fornecer a distribuição efetiva esperada pelo sistema.

TOMADA *et al.* (1987) relatou o desenvolvimento de medidores de fluxo multifásico utilizando duas energias de raios gama. Ele mediu as frações de volume utilizando feixe unidirecional (*pencil beam*) e comparou com aquelas obtidas usando válvulas de fechamento rápido (*quick closing valves*). A comparação não foi satisfatória especialmente em altas vazões de ar o qual, segundo os autores, pode ser atribuído ao método de interpretação de dados usados por eles.

REBGETZ, WATT, e ZASTAWNY (1991) mostraram numericamente que uma medida com boa precisão pode ser obtida para a medição frações de volume de gás, água e óleo em misturas homogêneas. Foi utilizada uma geometria com feixe unidirecional (*pencil beam*) usando a técnica de atenuação de radiação gama com duas energias (59,5 keV e 356 keV). Os autores descreveram ainda, que essa técnica tem potencial para se tornar mais abrangente e desta forma determinar em tempo real as frações de volume de cada componente.

BISHOP e JAMES (1993) introduziram a técnica de rede neural artificial no reconhecimento do regime de fluxo e da fração de volume de fluidos (gás, água e óleo). Os dados para o treinamento foram obtidos com a técnica de atenuação gama utilizando duas energias de 662 keV (Cs^{137}) e 1,33 MeV (Co^{60}), seis feixes (três verticais e três horizontais) unidirecionais (*pencil beam*) e seis detectores pontuais. Diversas redes foram treinadas e testadas sob dados simulados por computador.

MI *et al.*, (1997) desenvolveram um sistema de redes neurais artificiais com o objetivo de classificar o regime de fluxo em seção de teste horizontal. A rede utilizou como padrões de entrada medidas obtidas com sensores de impedância. Após o treinamento do sistema, a resposta da rede estava de acordo com os resultados obtidos por observação visual de outros autores. A vantagem deste método é que o sistema, uma vez treinado, pode automaticamente enviar a informação sobre o regime de fluxo.

YANG *et al.* (2003) investigaram e validaram o uso de redes neurais artificiais na determinação, em tempo real, das propriedades de um sistema bifásico sob regime turbulento de bolhas submetido à altas pressões. A rede neural supervisionada com algoritmo de treinamento *back-propagation* foi treinada com informações obtidas a partir de resultados de simulações de um modelo teórico. O estudo estabeleceu para a rede prever as distribuições de frações de vazio e as velocidades de líquido e gás. As previsões da rede quando comparadas com dados experimentais demonstraram boa concordância, desta forma, o modelo foi validado.

SALGADO *et al.* (2009) utilizaram o código computacional MCNPX para obter frações de volume de gás, água e óleo em regime de fluxo anular, estratificado e homogêneo. Desenvolveram redes neurais artificiais para analisar as DAPs obtidas por

três detectores NaI(Tl) para registrar feixes de transmissão e espalhamento provenientes de fontes de radiação gama. Utilizaram uma geometria com feixe largo (*narrow beam*). Para tornar o cálculo das frações de volume menos dependente do regime de fluxo.

KHORSANDI e FEGHHI (2011) apresentaram um novo método baseado em medidas de feixes transmitido e espalhado e duas energias para determinar a densidade de derivados de petróleo. Os resultados experimentais foram comparados com dados simulados por meio do código MCNP apresentando boa concordância, erro relativo máximo menor que 2%. Concluíram que o método de transmissão é 90% mais sensível do que o de espalhamento para variações da densidade do fluido. Em condições práticas, os derivados de petróleo podem ser diferenciados um dos outros com precisão de $0,1 \text{ g.cm}^{-3}$.

PATRACHARI (2012) realizou investigações sobre fenômeno da dispersão axial no comprimento da interface, considerando a dependência da espessura de uma camada próxima da parede do duto. O pesquisador percebeu que quando o fluido flui em uma tubulação, uma subcamada laminar se forma perto da parede da tubulação, o que contribui para o aumento da dispersão axial, levando a um aumento no comprimento da região de interface. A espessura da camada quase estacionária depende da viscosidade e da densidade dos fluidos envolvidos.

EL ABD (2014) comparou a determinação das frações de volume por meio de medições de raios gama de transmissão e de espalhamento utilizando uma secção de testes com um tubo cilíndrico, uma fonte pontual de Cs-137 de $10 \mu\text{Ci}$ e um detector de NaI(Tl). Foi simulado o regime estratificado com uma composição bifásica água-ar. A determinação das frações de volume utilizando medições de espalhamento e de transmissão apresentou uma boa concordância com as frações de volume reais.

SALGADO *et al.* (2016) investigaram a resposta de um sistema de fluxo monofásico para prever a densidade de derivados de petróleo. A aproximação se baseou no reconhecimento das DAPs por meio de RNAs treinadas por meio de dados simulados obtidos pelo código MCNPX. Os resultados apresentaram erro relativo médio de 0,96% demonstrando boa concordância entre os valores reais e os obtidos pela RNA.

Foi demonstrado, também, que o diâmetro externo do duto não influenciou nos resultados.

AFFONSO *et al.* (2020) investigaram o reconhecimento de padrões de distribuição de raios gama por meio de uma rede neural artificial. O sistema de detecção utilizou uma geometria de feixe estreito, consistindo de uma fonte de raios gama e um detector de NaI(Tl). Os modelos dos regimes de fluxo anular estratificado foram desenvolvidos utilizando o código MCNPX, a fim de obter conjuntos de dados para treinamento da rede neural artificial. Utilizaram o programa computacional para estudos de dinâmica de fluidos Ansys-CFX para simular frações de volume baseados em parâmetros reais de escoamento. Estes modelos foram modelados e transformados em *voxels* e transferidos para o código. Ambos os regimes de fluxo foram identificados corretamente e as frações de volume foram previstas com erros inferiores a 1,1%.

SALGADO *et al.* (2020a) identificaram com precisão a região de interface formada no transporte de subprodutos de petróleo em polidutos, utilizando a densitometria gama. A geometria simulada foi composta por uma fonte colimada de ^{137}Cs e um detector de NaI(Tl) para medir o feixe transmitido. Fizeram uma validação experimental do regime de fluxo estratificado utilizando água e óleo. As diferentes frações de volume foram calculadas utilizando o código MCNPX. Destacaram a potencialidade deste código que se provou ser eficaz na elaboração dos modelos.

CHUONG *et al.* (2020) determinaram a densidade de líquidos com base no método de espalhamento gama. Investigaram a dependência analítica da razão R (razão da área sob um único pico de espalhamento para um líquido em relação à água) sobre a densidade de um líquido em tubos cilíndricos de vários diâmetros. A relação entre R e a densidade do líquido foi descrito por modelo linear e quadrático. O quadrático foi mais apropriado para todos os diâmetros de tubos investigados. No entanto, para diâmetros menores que 2 cm ambos modelos se ajustam muito bem. Para líquidos com densidades entre 0,6 e 1,3 g.cm⁻³, a relação entre R e a densidade era linear para os diâmetros dos tubos investigados. Propuseram determinar a densidade do líquido com base nas variações da inclinação e intercepção da calibração linear versus o diâmetro do tubo. A confiabilidade do método foi avaliada usando para líquidos (n-hexano, éter dietílico,

acetonitrila, tolueno e glicerol) usando tubos com diâmetro internos de 1.8, 2.25 e 2.68 cm. Os resultados da densidade líquida tiveram desvios relativos máximo de 4,3.

1.2 – OBJETIVO

O principal objetivo deste estudo é o desenvolvimento de uma metodologia para identificação da região de interface (nível de pureza) e a classificação dos fluidos (subprodutos de petróleo) no transporte em polidutos, em fluxo bifásico (gasolina, querosene, óleo combustível e glicerina) sob regime de fluxo estratificado com um sistema baseado em técnicas de atenuação da radiação gama (por meio do método de Monte Carlo) e com a utilização de Redes Neurais Artificiais (RNAs).

Desta forma, este trabalho estabelece uma metodologia original por meio de um sistema composto por uma RNA capaz de predizer o nível de pureza dos fluidos e predizer com boa precisão a região de interface. A técnica baseia-se em reconhecimento dos padrões das Distribuições de Altura de Pulsos (DAPs) simulados pelo código MCNP6.

Para realizar o objetivo proposto, fizeram-se necessário a execução das seguintes etapas:

- i) Avaliar a potencialidade da utilização do código MCNP6 na modelagem dos sistemas bifásicos, gasolina – óleo, submetidos ao regime de fluxo estratificado;
- ii) Modelar e validar experimentalmente a resposta de um detector cintilador;
- iii) Desenvolver uma geometria composta por detectores e feixe largo (*narrowbeam*) utilizando a modalidade dupla;
- iv) Desenvolver uma rede neural artificial para a predição do nível de pureza em sistemas de transporte de fluidos em polidutos, avaliando a potencialidade da RNA;
- v) Produzir os padrões de treinamento e de avaliação da rede neural artificial;
- vi) Desenvolver uma metodologia para identificação da região de interface independentemente do raio do tubo utilizando uma rede neural artificial;
- vii) Avaliar o sistema proposto com diversas combinações de fluido e implementar um indicador de pureza na rede neural;
- viii) Desenvolver uma rede neural para classificar os fluidos que compõem a região de interface;
- ix) Aperfeiçoar o treinamento das redes neurais visando aumentar a precisão nos resultados do nível de pureza.

1.3 – RELEVÂNCIA

A grande vantagem da técnica de densitometria gama é a possibilidade de serem efetuadas análises sem a necessidade de interrupção da operação normal da instalação (técnicas não invasivas) apresentando confiabilidade nos resultados e em tempo real. Além disto, a alta sensibilidade dos detectores permite o uso de fontes radioativas seladas, o que minimiza o risco radiológico para os trabalhadores. O sistema proposto não provoca danos ou contaminação radiológica-química ao equipamento sendo considerada segura do ponto de vista ambiental, desde que todas as exigências de radioproteção sejam cumpridas.

Diante disso, a disponibilidade de um equipamento não invasivo capaz de identificar precisamente a região de interface no transporte de produtos em polidutos e possibilita o efetivo controle da sua localização é de grande interesse para a indústria de petróleo. Ou seja, dispor desta tecnologia tornará possível determinar o instante exato em que um produto é considerado puro, ou seja, sem mistura, contribuindo para preservar a integridade dos produtos transportados e reduzir perdas por reprocessamento e tratamento dos produtos descartados. Isto teria um impacto econômico considerável por manter a qualidade de todos os produtos transportados, aprimorar a produtividade e de oferecer flexibilidade e confiabilidade.

CAPÍTULO 2

2 - FUNDAMENTOS TEÓRICOS

Neste capítulo serão descritos os conhecimentos teóricos necessários para uma melhor compreensão da metodologia proposta neste trabalho. Abordagens sobre os seguintes assuntos serão tratados: radiação gama, transporte de produtos em poliduto, modelagem matemática utilizando o método de Monte Carlo e Redes Neurais Artificiais.

2.1 - TRANSPORTE DE PRODUTOS EM POLIDUTOS

O transporte dutoviário é o modal de transporte que consiste num sistema de dutos para movimentar produtos sólidos, líquidos e gasosos. Esse modal é uma das formas mais econômicas e seguras de transportar grandes volumes de material, principalmente de petróleo e seus derivados, especialmente quando comparados com os modais rodoviários e ferroviários. Dutovias que transportam mais de um produto são comuns em todo o mundo e recebem o nome de polidutos. O transporte de produtos em polidutos é uma prática bastante difundida e ocorre na forma de bateladas, que consiste no bombeamento sequencial de diferentes produtos ou de diferentes qualidades de um mesmo produto (tais como: diesel S10 e diesel S500) em contínua sucessão sem qualquer tipo de separação física (*pigs*), através do poliduto (GOMES *et al.*, 2002).

O transporte em bateladas oferece à indústria a possibilidade de movimentação de diversos produtos por um mesmo duto, conferindo economia e agilidade nas entregas, mas também provoca um efeito colateral que é a região de interface. Visto que nem sempre é possível utilizar *pigs*, pois seu uso depende do diâmetro da tubulação e da velocidade do escoamento. Além disto, o *pig* pode ficar agarrado no interior da tubulação ocasionando uma parada total do funcionamento da instalação.

A interface é definida como a região no interior do duto em que os produtos estão em contato direto um com o outro, havendo assim uma “mistura” entre os dois produtos que se contaminam. Na indústria petrolífera o problema da contaminação entre as bateladas tem sido uma preocupação desde o início da operação dos primeiros polidutos, devido às especificações rígidas para cada tipo de combustível como gasolina, diesel e etanol. Para diminuir custos os tamanhos das bateladas são

maximizados para que a região de interface seja uma pequena percentagem do total transportado.

Na *Figura 1* é apresentado um fluxograma esquemático de um poliduto que transportam os produtos A e B, assim como a região de interface que é formada entre as bateladas destes produtos. Neste esquema é possível observar que o produto B estava sendo bombeado pelo duto, e então este bombeamento é interrompido e em seguida se inicia o bombeamento do produto A, ou seja, o produto A começa a ser introduzindo no duto. Uma região de interface dos dois produtos é formada e nos terminais são utilizados três tanques para separar os produtos A e B e o produto gerado a partir da mistura (região de interface).

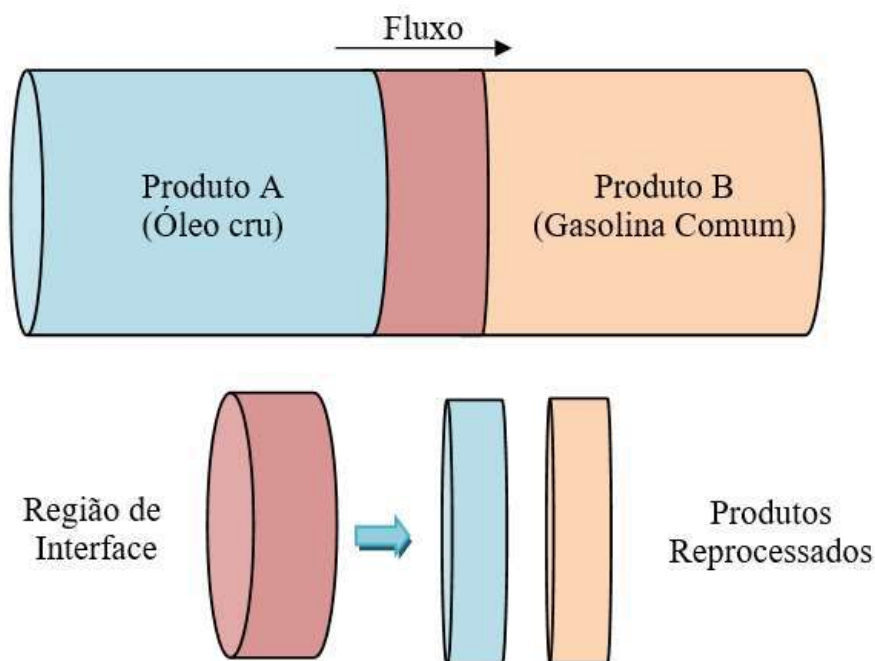


Figura 1: Região de interface no poliduto.

Próximo aos tanques de envio, esta região é mínima e normalmente causada pela manobra da troca de produtos bombeados o que requer que a válvula de envio do produto A continue aberta até que a válvula do produto B seja completamente aberta para evitar perda de pressão da linha. Continuando o bombeamento do produto B, a região de interface percorre todo o comprimento do poliduto, aumentando seu tamanho gradualmente, devido, por exemplo, a dispersão dos produtos, então a região de interface atinge seu comprimento máximo no recebimento.

A concentração máxima (fração de volume) permitida do produto A no B, e vice-versa, delimitam o comprimento da região de interface. Alguns fatores que contribuem para o crescimento da região de mistura são:

- Perfil de velocidade e pressão do escoamento;
- Número de estações de bombeamento;
- Distância percorrida pela interface;
- Difusão entre os dois produtos.

Uma vez contaminado, toda essa região é considerada como produto de qualidade inferior (por exemplo: gasolina Comum e *Premium*) ou é separada e transportada de volta à refinaria ao processo de refino, onde será reprocessada (por exemplo: óleo cru e gasolina) o que implica num aumento do custo do produto final.

Atualmente, a região de interface é identificada por meio do histórico de um densímetro, que é posicionado nas extremidades do duto. A interface começa quando ocorre variação na medida da densidade, no densímetro e quando sua resposta se torna constante novamente e igual à densidade do produto B, o fim da região de interface é alcançado. No entanto, esses limites são extremamente difíceis de serem determinados com precisão, pois existem variações nas densidades dos produtos com a pressão e temperatura, além de erros associados aos instrumentos (densímetros, sensores de vazão e etc).

Nos pontos de recebimento ao longo das dutovias, são retiradas amostras de cada batelada para confirmar seu início e verificar as suas propriedades. É importante poder distinguir as interfaces dos produtos para que, na chegada ao terminal, cargas consecutivas possam ser segregadas nos seus respectivos tanques com o mínimo de contaminação. Dentre os métodos usados para marcar bateladas, destacam-se os baseados em diferenças de densidade, em diferenças de viscosidade e em diferenças de cor. Neste trabalho é proposto um sistema baseado em técnicas nucleares.

2.2 – FUNDAMENTOS DA RADIAÇÃO

No contexto dos medidores de fluxo bifásicos baseados na atenuação de raios gama, torna-se necessário para melhor entendimento o estudo da interação da radiação

gama com os meios em análise. De forma geral, estes instrumentos consistem de uma fonte(s) de radiação e detector(es) posicionado(s) do lado externo ao tubo. A radiação gama pode interagir com a matéria transferindo energia, o que provoca uma série de excitações e ionizações de átomos ao longo do seu percurso. Nas seções seguintes serão apresentados tópicos definindo melhor como este processo ocorre.

2.2.1 – INTERAÇÃO DA RADIAÇÃO GAMA COM A MATÉRIA

Os principais processos de interação do fóton com a matéria são: o Efeito Fotoelétrico, os Espalhamentos Incoerente e Coerente e a Produção de Pares. A probabilidade relativa de ocorrência de cada um destes eventos está relacionada com a energia do fóton incidente e com o número atômico do alvo.

i) Efeito Fotoelétrico

É o processo de interação em que a energia de um fóton é totalmente absorvida por um elétron fortemente ligado (em geral da camada K) ao átomo do material, este elétron é ejetado com uma energia cinética (E_c) bem definida, conforme *Equação 1*.

$$E_c = h\nu - B_e$$

Equação 1

Onde:

h – constante de Planck (eV);

ν – frequência da radiação (s^{-1});

B_e – energia de ligação do elétron orbital (eV).

Por meio das leis de conservação de momento e energia e sabendo-se que a massa nuclear é muito maior que a massa do elétron, a energia de recuo do átomo é desprezível, desta forma conclui-se que a energia cinética do elétron ejetado é igual à energia incidente menos a energia de ligação do elétron orbital. A probabilidade de ocorrência deste efeito é maior em baixas energias (na faixa de energia de ligação dos elétrons) e em alvos com número atômico alto. No entanto, após a ejeção do elétron de uma determinada camada uma vacância é deixada por ele e preenchida por uma

reorganização do orbital eletrônico, seguido da emissão de um raio X característico. O efeito fotoelétrico é ilustrado na *Figura 2*.

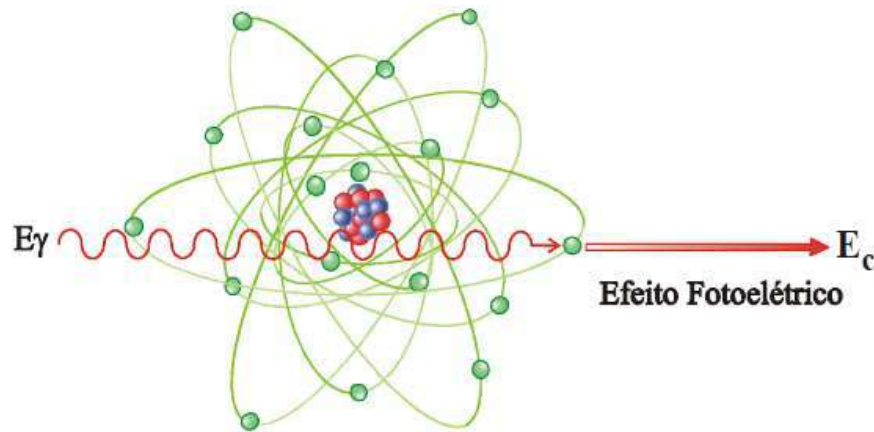


Figura 2: Representação do efeito fotoelétrico (TAUHATA, 2013).

ii) Espalhamento Incoerente ou Efeito Compton

É o processo de interação em que um fóton é espalhado por um elétron das camadas fracamente ligadas de um átomo que absorve somente uma fração de sua energia, nesta interação o fóton incidente após ser espalhado continua seu “caminho” no material em outra direção e com energia inferior ao fóton incidente, conforme ilustrado na *Figura 3*.

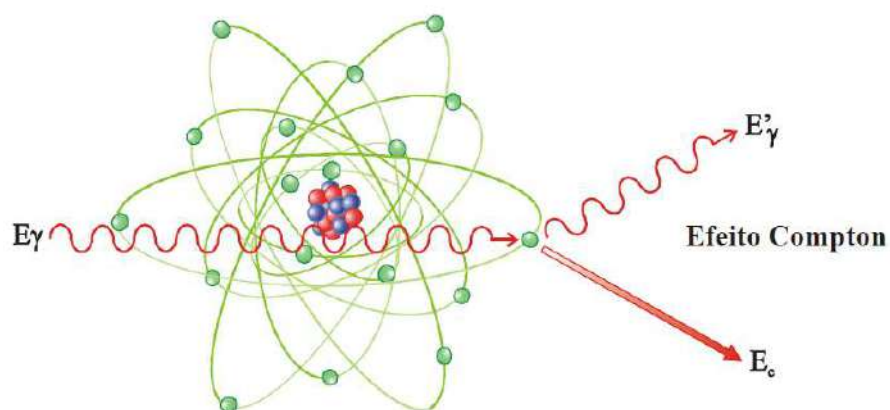


Figura 3: Diagrama esquemático do espalhamento incoerente (TAUHATA, 2013).

A partir das leis de conservação do momento e de energia, a energia do fóton espalhado (E'_c) depende da energia do fóton incidente e do ângulo de espalhamento em relação à direção do fóton incidente, conforme *Equação 2*.

$$E'_c = \frac{h\nu}{1 + \frac{h\nu}{m_0c^2}(1 - \cos\theta)}$$

Equação 2

Onde:

$h\nu$ – energia do fóton incidente (eV);

m_0c^2 – energia de repouso do elétron (eV);

θ – ângulo de espalhamento (em grau).

A probabilidade de ocorrência deste fenômeno é diretamente proporcional à energia do fóton e inversamente ao número atômico do alvo. O efeito Compton é, ainda, desprezível quando comparado ao efeito fotoelétrico para energias abaixo de 100 keV e à medida que a energia aumenta o efeito do espalhamento Compton é mais evidente (SEELENTAG e PANZER, 1979).

iii) Espalhamento Coerente ou Efeito Rayleigh

O espalhamento *Rayleigh*, ocorre quando fótons de baixa energia interagem com elétrons fortemente ligados ao átomo, desta forma mudando somente sua direção. É o processo de interação correspondente à absorção e reemissão da radiação pelo átomo, ou seja, a energia do fóton espalhado é igual à energia do fóton incidente, mudando somente sua direção. Este efeito tem maior probabilidade de ocorrência em baixas energias dos fótons incidentes e para alvo com elevado número atômico. Este efeito tem pouca importância na faixa de energia utilizada neste trabalho, 662 keV, no entanto ele é considerado. O efeito *Rayleigh* pode ser considerado um caso particular do Espalhamento Compton.

iv) Produção de Pares

Quando fótons de energia superior a 1022 keV passam próximo de átomos com número atômico alto e interagem com o forte campo elétrico nuclear a radiação eletromagnética é “absorvida” e um par elétron-pósitron é emitido, por meio da *Equação 3*.

$$\gamma \rightarrow e^{-} + e^{+} + E_c$$

Equação 3

A energia cinética (E_c) do elétron e do próton criados é igual à energia do fóton incidente menos 1022 keV necessários para a criação das partículas. O espectro de distribuição de energia das partículas formadas é contínuo. Neste trabalho, a faixa de energia utilizada está abaixo do limiar para a ocorrência deste fenômeno, portanto, este efeito não será abordado com mais detalhes ao longo deste estudo.

Quando a radiação eletromagnética interage com a matéria podem ocorrer três processos básicos, como mostrado na *Figura 4*.

- i) Absorção total do fóton: quando ocorre a transferência de toda a energia do fóton incidente para o meio alvo;
- ii) Espalhamento do fóton: quando o fóton espalhado tem uma energia igual ou inferior à energia do fóton incidente, no entanto o fóton espalhado possui direção diferente do fóton incidente;
- iii) Transmissão do fóton: quando não ocorre nenhum tipo de interação e a energia do fóton transmitido é igual à do fóton incidente.

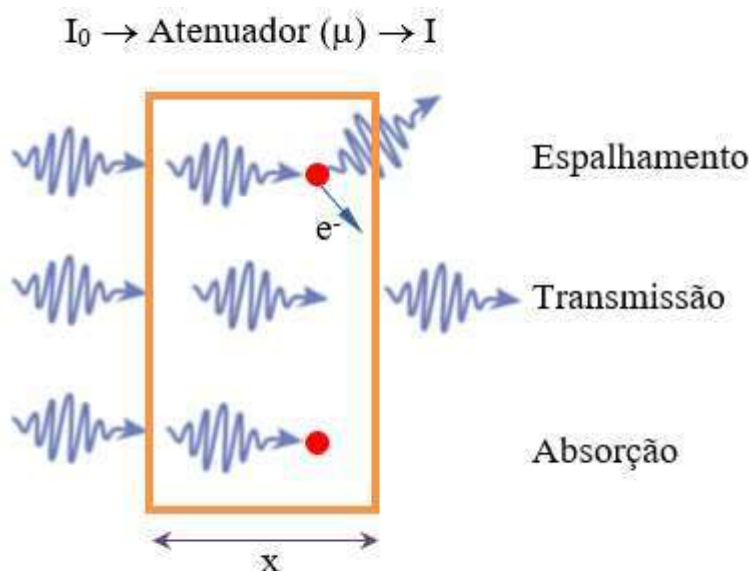


Figura 4: Esquema ilustrativo das possibilidades de interação de fótons com a matéria.

Onde: I_0 é o feixe incidente, I é o feixe transmitido, μ é o coeficiente de atenuação da amostra e x é sua espessura.

A distribuição de probabilidades destes efeitos para elementos com diferentes números atômicos em função da energia do fóton incidente é mostrada na [Figura 5](#). A combinação desses três tipos de interações produz a atenuação total do feixe incidente.

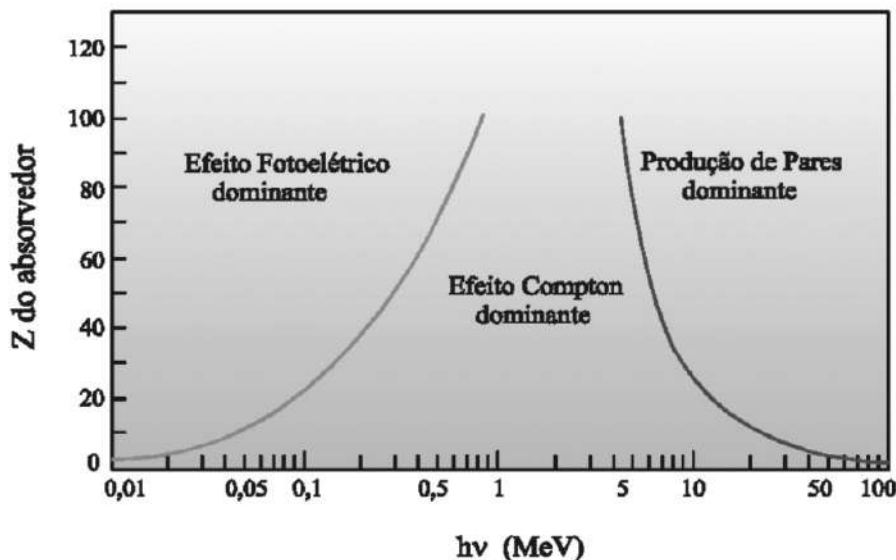


Figura 5: Probabilidade de ocorrência dos efeitos em função do número atômico do material absorvedor e da energia da radiação gama (TAUHATA, 2013).

Como exemplo, considere que o número atômico (Z) do absorvedor seja 20 e a energia seja 0,5 MeV, neste caso, o efeito Compton é predominante. Mas se o Z do absorvedor for 100, o efeito Fotoelétrico passa ser o dominante.

2.2.2 – ATENUAÇÃO DO FEIXE DE FÓTONS

Quando um feixe de raios gama incide em um material com determinada espessura, parte do feixe é espalhada, parte é absorvida e parte do feixe atravessa todo o material sem interagir (feixe transmitido). A atenuação de um feixe de raios gama monoenergéticos pode ser calculada por meio da lei de Beer-Lambert, dada pela [Equação 4](#) (LEIPUNSKI *et al.*, 1965).

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

Equação 4

Onde:

I – intensidade transmitida de raios gama (fótons.cm⁻².s⁻¹);

I_0 – intensidade incidente de raios gama (fótons.cm⁻².s⁻¹);

x – espessura do meio alvo (cm);
 μ – coeficiente de atenuação linear (cm^{-1}).

O coeficiente de atenuação linear é a probabilidade do feixe de radiação “sofrer” atenuação devida a eventos de espalhamento, absorção ou formação de pares. Seu valor depende do meio absorvedor e é função da energia dos raios gama. No entanto, o coeficiente de atenuação linear normalmente é utilizado como coeficiente de atenuação mássico, pois independe do estado físico do material e é definido pela razão do coeficiente de atenuação linear pela densidade do material, conforme *Equação 5*.

$$\mu_m = \frac{\mu}{\rho}$$

Equação 5

Onde:

μ – coeficiente de atenuação linear (cm^{-1});
 ρ – densidade do material (g.cm^{-3}).

2.2.3 – DETECÇÃO DA RADIAÇÃO IONIZANTE

Detectores de radiação são dispositivos capazes de indicar e registrar sua presença. São constituídos basicamente por um material sensível à radiação e um sistema capaz de transformar os efeitos da radiação gerados em seu interior numa grandeza possível de ser registrada e medida.

O mecanismo básico de funcionamento de todos os detectores de radiação é a dissipação de energia pela partícula incidente no detector. Quando um feixe de radiação interage com o volume sensível do detector, dependendo do processo de interação (efeitos Fotoelétrico, Rayleigh, Compton ou Formação de Pares), toda ou parte de sua energia é absorvida e é utilizada para a geração de luz, portadores de cargas, etc, dependendo do tipo do detector. Para cada fóton detectado é gerado um pulso de carga, cuja altura fornece a energia transferida pelo fóton e a contagem destes pulsos corresponde ao número de interações, ou seja, indica a atividade da fonte.

Neste caso, a informação primária obtida é uma distribuição da energia depositada e, com isso, após um tratamento, é possível obter informações do espectro de energia. Para efetuar a espectrometria, o sinal proveniente do detector necessita ser

processado. Um esboço representativo de um sistema de medição para os detectores cintiladores de NaI(Tl) é mostrado na *Figura 6*.

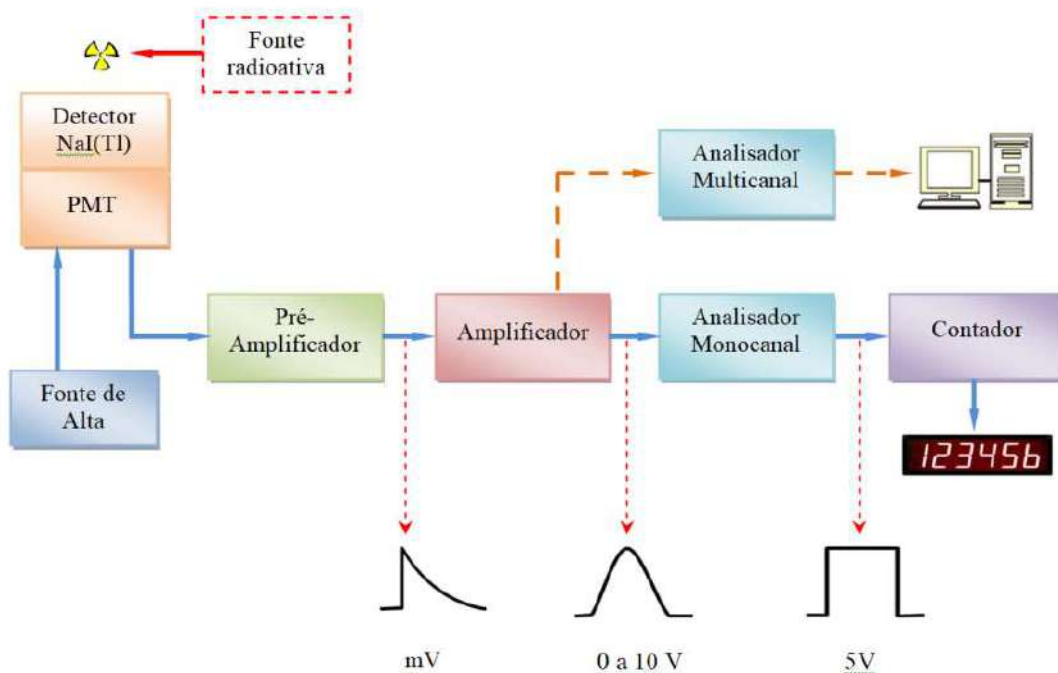


Figura 6: Esquema típico de detecção para um detector cintilador NaI(Tl).

Os principais módulos que compõem o sistema de espectrometria são:

- i) **Um pré-amplificador:** sensível à carga cuja função é integrar a carga elétrica, gerando um sinal de tensão cuja amplitude é proporcional à carga integrada, realizando, ainda, o “casamento de impedâncias” entre o detector e o amplificador;
- ii) **Um amplificador:** cuja finalidade básica é modelar a forma do pico de sinal e aumentar a amplitude do sinal proveniente do pré-amplificador (normalmente menor que 1,0 V) para faixas de tensão mais convenientes (de 0 a 10 V) para análise posterior e, por meio de conformação dos pulsos, *maximizar* a relação sinal-ruído;
- iii) **Um analisador multicanal (AMC):** que classifica e conta os pulsos conforme suas amplitudes e armazena a contagem dos pulsos em canais.
- iv) **Um analisador monocanal:** capaz de gerar um sinal lógico padrão, cada vez que o sinal gerado pelo amplificador estiver entre determinados valores (modo diferencial ou janela) ou acima de um valor mínimo (modo integral).

2.2.4 – DETECTORES DE NaI(Tl)

Materiais cintiladores são aqueles em que o tempo de vida do estado excitado é inferior a 10^{-9} segundos e o processo de desexcitação ocorre por meio da emissão de um fóton de luz visível, fenômeno chamado de fluorescência. O detector cintilador de iodeto de sódio ativado com tálio - NaI(Tl), produz cintilações⁶ com uma intensidade luminosa muito elevada, quando comparada com outros materiais orgânicos. Para aumentar a probabilidade de emissão de fótons de cintilação e reduzir os efeitos de autoabsorção de luz no cristal, são introduzidas impurezas em pequenas quantidades, que são chamadas de ativadores, neste caso o ativador é o Tálio (TSOULFANIDIS, 1995).

Para transformar as cintilações produzidas no cristal em sinal elétrico, é utilizado um tubo fotomultiplicador constituído de um fotocátodo que converte⁷ fótons de luz visível em elétrons, uma cascata de dinodos focaliza, acelera e multiplica os elétrons originais produzindo um pulso de corrente com intensidade suficiente para ser coletado pelo ânodo⁸ e processado por um sistema de espectrometria. Um esquema da geração de um pulso elétrico a partir da interação da radiação gama num detector cintilador NaI(Tl) pode ser visualizado na *Figura 7*.

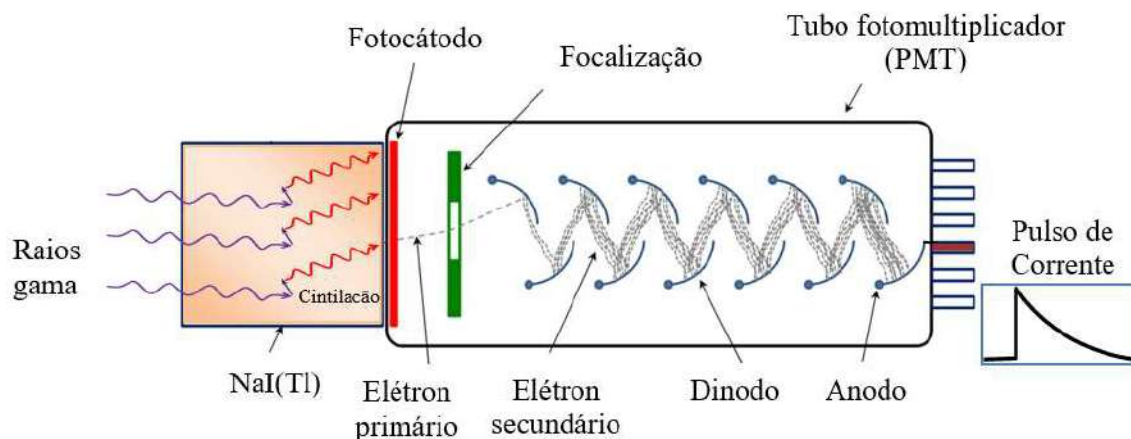


Figura 7: Geração de um pulso elétrico em um detector cintilador NaI(Tl)

(Baseada em <https://commons.wikimedia.org/wiki/File:PhotoMultiplierTubeAndScintillator.svg>, 21/12/2020).

⁶ É a fração de energia de todas as partículas incidentes que é transformada em luz visível. Existe uma série de interações da radiação com o material cintilador com transferência de energia cuja desexcitação não ocorre pela emissão de luz, mas principalmente sob a forma de calor.

⁷ Catodo de uma válvula fotoelétrica capaz de emitir elétrons quando excitado por luz.

⁸ Eletrodo que emite elétrons por meio do fenômeno da emissão secundária em uma válvula.

O número de elétrons convertidos é proporcional à energia da radiação incidente no cristal e é razoavelmente linear para uma faixa significativa de energias de raios gama. Isto permite relacionar a amplitude do sinal de corrente à energia absorvida pelo cristal. Em cada dinodo da fotomultiplicadora é produzido um número maior de elétrons em relação ao dinodo anterior.

Os detectores cintiladores NaI(Tl) apresentam como principais vantagens: i) Alta eficiência de contagem, devido a sua densidade ($3,667 \text{ g.cm}^{-3}$) e o elevado número atômico do iodo ($Z = 53$), ii) Facilidade de usinagem, possibilitando a obtenção de cristais grandes e formatos específicos e iii) Não necessita de um sistema de refrigeração para operação, por isso possui baixo custo de operação. O detector de NaI(Tl) foi escolhido para ser utilizado neste trabalho devido às suas grandes vantagens.

As principais propriedades de um detector de radiação (raios gama e raios X) são:

i) Eficiência de detecção

Nem todas as partículas emitidas por uma fonte radioativa emissora de fótons interagem com volume sensível do detector, por isso é necessário relacionar o número de impulsos registrados pelo detector com o número de impulsos incidentes no detector.

A Eficiência de detecção se caracteriza pela capacidade de um detector em registrar fótons emitidos por uma fonte em uma determinada energia e é fortemente influenciada por vários fatores, tais como: as características do sistema de contagem (fonte-detector), a composição do cristal cintilador e suas propriedades físicas (dimensões, densidade e opacidade). De um modo geral, a eficiência diminui sensivelmente com o aumento da energia dos fótons incidentes, isto se deve ao maior grau de penetração dos fótons em energias mais altas e ao tamanho limitado do detector. Várias definições de eficiência são de uso comum para os detectores de raios gama:

- **Eficiência absoluta:** é a razão entre o número de sinais registrados pelo detector e o número de raios gama emitido pela fonte;
- **Eficiência intrínseca:** é a razão entre o número de sinais registrados pelo detector e o número de raios gama que incidem no detector.

As eficiências, ainda, podem-se subdividir em Total e de Fotopico, nesta somente serão considerados os pulsos relativos à absorção total da energia do fóton incidente, enquanto na primeira são considerados todos os pulsos registrados pelo detector.

Quando uma fonte de radiação é posicionada próxima a um detector, a eficiência absoluta de fotopico pode ser calculada a partir da *Equação 6*.

$$\varepsilon(E) = \frac{C}{t \cdot A \cdot P \cdot k}$$

Equação 6

Onde:

C – número de contagens registrado no detector na região fotoelétrica;

t – tempo de contagem (s);

A – atividade da fonte radioativa (Bq);

P – probabilidade de emissão para raios gama na energia “E” (%);

k – fator de correção da meia-vida.

A incerteza padrão da eficiência é dada pela *Equação 7*, desconsiderando-se as incertezas do tempo de contagem, da probabilidade de emissão e da constante de correção de decaimento, pois são valores muito pequenos.

$$\sigma\varepsilon = \sqrt{\left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial C} \cdot \sigma C\right)^2 + \left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial A} \cdot \sigma A\right)^2}$$

Equação 7

Onde:

σC – incerteza associada às contagens;

σA – incerteza associada à atividade;

ii) Resolução em Energia

A resolução em energia de um detector de radiação determina o alargamento da DAP, e fortemente na região fotoelétrica, ou seja, avalia a capacidade do detector de discriminar duas ou mais energias bem próximas no espectro de energia, ver *Figura 8*.

Quando a resolução é alta podem-se notar dois picos e quando ela é baixa um único pico pode ser observado. Tal fato dificulta a identificação da energia. Alguns fatores podem contribuir para diminuir a resolução de um detector, tais como a flutuação estatística do número de cargas coletadas, o ruído eletrônico tanto do detector como da cadeia espectrométrica, corrente de fuga e a coleta incompleta de cargas.

Especificamente em detectores NaI(Tl) tem-se também mais fatores que contribuem para piorar a resolução em energia, tais como: as flutuações do número de cargas coletadas no ânodo do fotomultiplicador, por sua vez devidas a flutuações no número de elétrons secundários produzidos nos dinodos e no número de fotoelétrons liberados no fotocatodo.

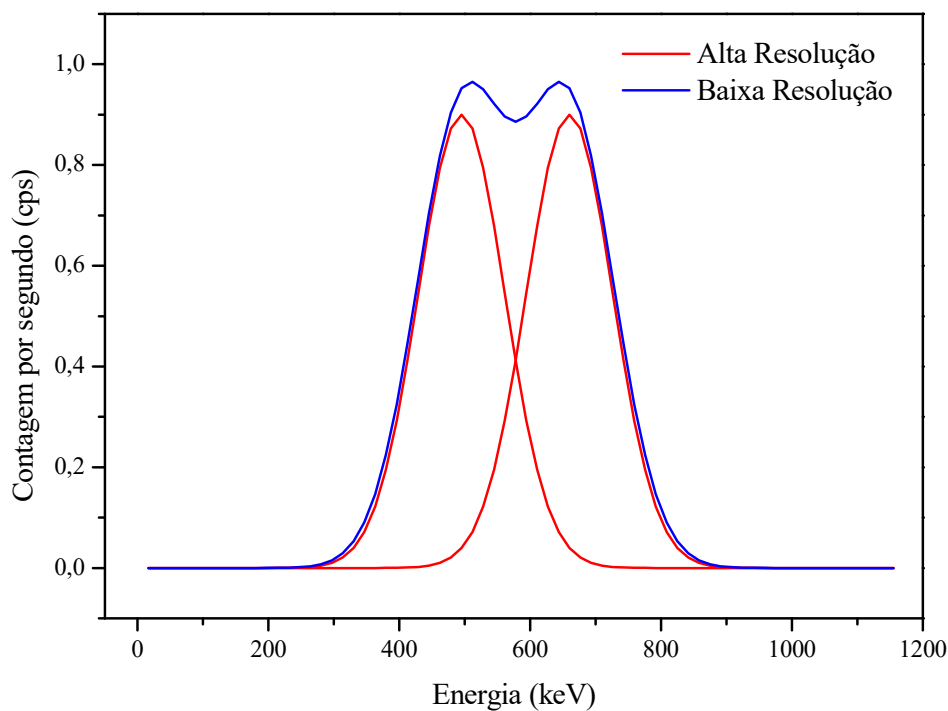


Figura 8: Resolução típica de um detector de NaI(Tl) (baixa resolução) para dois picos de energia em comparação com um detector de alta resolução.

Na prática, se obtém a resolução em energia de um fotopico, obtida por um detector, medindo a largura total à meia altura (FWHM) do pico Gaussiano para uma determinada energia, conforme [Figura 9](#), acima da linha de base da radiação de fundo ([DEBERTIN e HELMER, 1988](#)).

A definição matemática para se obter a resolução é dada pela [Equação 8](#).

$$R = \frac{\Delta E}{E_0} \Rightarrow R = \frac{FWHM}{E_0}$$

Equação 8

Onde:

$FWHM$ – largura à meia altura do fotopico (eV);

E_0 – energia central do fotopico (eV).

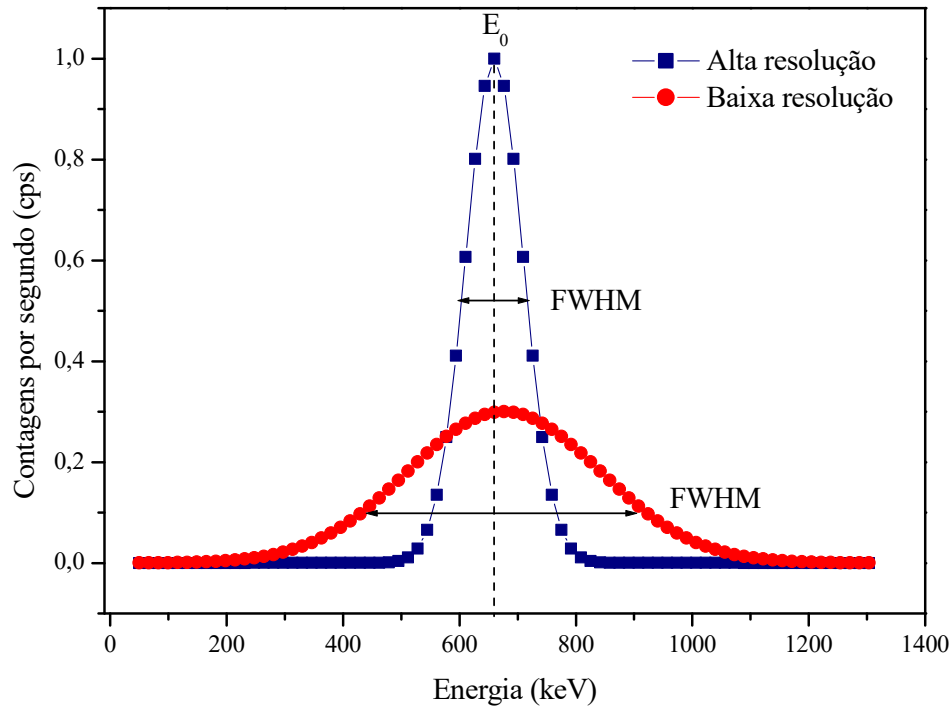


Figura 9: Comparação de duas FWHM para detectores distintos.

2.3 – CÁLCULO DE FRAÇÃO DE VOLUME COM DENSITOMETRIA GAMA

O método é baseado na atenuação de um feixe monoenergético de raios gama transmitido por um tubo contendo fluxo bifásico. Considerando-se um modelo simplificado do regime de escoamento estratificado com fases líquidas em um tubo de seção transversal quadrada, conhecendo as dimensões e características do tubo e os fluidos têm-se a intensidade do feixe transmitido dada pela equação de Beer – Lambert modificada, de acordo com as *Equações 9 e 10*.

$$I(E) = I_0(E) \cdot \exp\left(\sum_1^i \mu_i(E)x_i\right)$$

Equação 9

Onde:

I – intensidade transmitida de raios gama (fótons. $\text{cm}^{-2}.\text{s}^{-1}$);

I_0 – intensidade incidente inicial de raios gama da fonte (fótons. $\text{cm}^{-2}.\text{s}^{-1}$);

μ_i – coeficiente de atenuação linear total do fluido i (cm^{-1});

E – energia da radiação incidente;

x_i – espessura do fluido (cm).

Uma fonte de radiação colimada e com energia suficiente para penetrar e ser transmitida através do sistema: tubo-fluidos é posicionada de um lado do duto e diametralmente oposta à fonte, um detector de cintilação NaI(Tl) é colocado para registrar as contagens do feixe transmitido. O sinal registrado no detector é proporcional à transmissão dos raios gama devido ao sistema tubo-fluidos. Os fluidos de alta densidade causam uma diminuição na taxa de contagem no detector, enquanto os fluidos de densidade mais baixa resultam em uma taxa de contagem mais alta, para a mesma geometria de contagem. Considerando uma geometria de medição unidirecional (*pencil beam*⁹) e perpendicular às camadas de fluido em sistemas bifásicos heterogêneos sob o regime de fluxo estratificado, conforme mostrado na *Figura 10*.

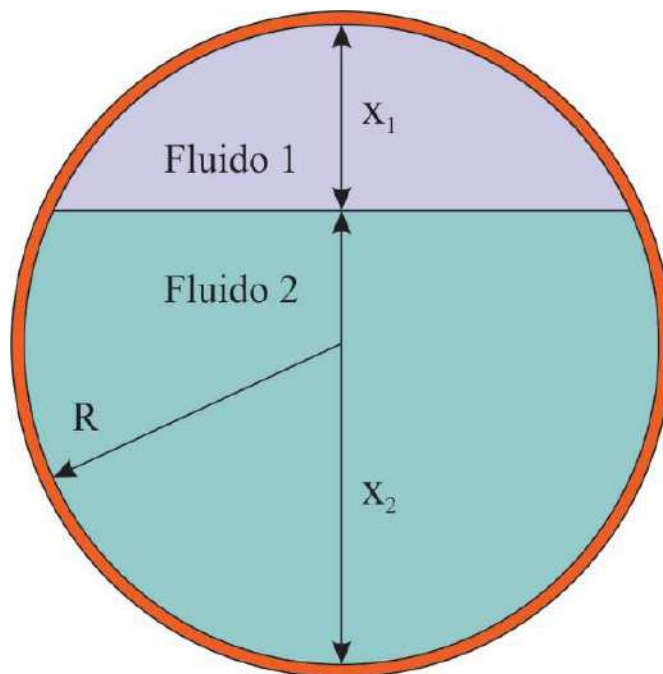


Figura 10: Geometria usada para cálculo de fração de volume.

⁹ Feixe de radiação emitido em única direção e colimadíssimo, muito estreito.

O procedimento adotado para cálculo da fração de volume de fluido (FVF) usando a técnica de atenuação gama baseia-se em cálculos das espessuras (x_1 e x_2) de cada fluido que correspondem ao caminho percorrido pela radiação. Para um feixe tipo *pencil beam*, estes valores podem ser obtidos pelas *Equações 10* e *11* (ABOUELWAFI e KENDALL, 1980).

$$x_1 = \frac{\ln(I/I_2)}{\mu_2 - \mu_1}$$

Equação 10

$$x_2 = \frac{\ln(I/I_1)}{\mu_1 - \mu_2}$$

Equação 11

Onde:

$x_{1,2}$ – espessura dos fluidos 1 e 2;

$\mu_{1,2}$ – coeficiente de atenuação linear dos fluidos 1 e 2.

A partir destes valores e por meio de manipulações matemáticas é possível determinar a FVF em sistemas bifásicos heterogêneos sob o regime de fluxo estratificado por meio das *Equações 12* e *13* (ABOUELWAFI e KENDALL, 1980).

$$\alpha_1 = \frac{\ln(I/I_2)}{\ln(I_1/I_2)}$$

Equação 12

$$\alpha_1 = 1 - \alpha_2$$

Equação 13

Onde:

$\alpha_{1,2}$ – fração de volume do fluido 1 ou 2;

I – intensidade de raios gama transmitidos com tubo contendo fluidos 1 e 2;

$I_{1,2}$ – intensidade contendo apenas o fluido 1 ou 2.

No espalhamento Compton, a energia do fóton espalhado é menor que a do fóton incidente, ou seja, o fóton incidente transfere uma fração de sua energia para um elétron das camadas fracamente ligadas de um átomo, resultando em um fóton de energia reduzida (*Equação 2*). A probabilidade do espalhamento de Compton é diretamente proporcional à energia do fóton e inversamente ao número atômico da amostra. O número de fótons dispersos que chegam ao detector pode ser calculado usando a equação de Klein-Nishina (KLEIN e NISHINA, 1929). No caso de uma amostra homogênea e geometria da fonte pontual, os termos das integrais e a seção transversal diferencial de Klein-Nishina são constantes. Portanto, a taxa de contagem depende apenas da densidade do material examinado, desse modo, a variação da densidade da amostra pode ser calculada.

Vale mencionar que a espessura do tubo influencia na intensidade do feixe transmitido, porém o cálculo da FVF é independente deste fator, visto que a espessura é um termo comum na razão das frações de volume.

2.4 – O MÉTODO DE MONTE CARLO

É uma ferramenta de simulação computacional que se baseia em métodos estatísticos de compreensão de sistemas físicos e/ou matemáticos complexos usando números gerados aleatoriamente, visando a geração de uma gama de soluções. A solução pode ser determinada com maior precisão utilizando números cada vez maiores de ensaios. O método de Monte Carlo teve aplicações iniciais para solucionar o problema de difusão de nêutrons em material passível a fissão nuclear, o que difundiu assim sua aplicação (NASSER, 2012). O método de Monte Carlo é aplicado principalmente em problemas físicos cuja solução é complicada ou até impossível de serem obtidos de forma experimental. Pode ser utilizado nos estudos que envolvam o transporte da radiação, simulando a trajetória individual das partículas e os processos de sua interação com matéria pela geração de números pseudo-aleatórios, a partir da distribuição de probabilidade que rege os processos físicos envolvidos. No desenvolvimento deste trabalho será utilizado o código MCNP6 (GOORLEY *et al.*, 2016).

2.4.1 – O CÓDIGO MCNP6

O código computacional MCNP6 é baseado no método de Monte Carlo. É um código versátil, amplamente utilizado na área de transporte da radiação e sua interação com a matéria, envolvendo nêutrons, fótons, elétrons, ou até todos simultaneamente, é capaz de transportar mais de 37 tipos diferentes de partículas.

Para o transporte de fótons, o código considera os Espalhamentos Coerentes e Incoerentes, a possibilidade de ocorrer emissão de Fluorescência após o Efeito Fotoelétrico, a Produção de Pares com emissão de Radiação de Aniquilação e a Radiação de Freamento (Bremsstrahlung). A faixa de energia que pode ser representada no código é de 1 keV até 100 GeV ([LANL, 2003](#)).

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

- Todas as informações necessárias são definidas em um arquivo de entrada (INP), não requerendo do usuário conhecimento de linguagens de programação, tais como: FORTRAN, MORTRAN, C++ etc.
- Extensa coleção de bibliotecas de seção de choque.

O código MCNP6 é descrito como a junção dos códigos computacionais MCNP5 ([LANL, 2003](#)) e MCNPX ([PELOWITZ, 2005](#)). No entanto, o MCNP6 possui características como uma nova versão de biblioteca de dados nucleares ENDF/B-VII.1 para fótons de energia mais baixa (1 keV até 1 eV) e adição de dados específicos para o transporte de elétrons e dados para espalhamento de fótons. Além disso, novas ferramentas (modelos físicos) exclusivas tais como: o comando ACT (*Activation Control Card*) utilizado para reações nucleares com produção de raios gamas, nêutrons atrasados (nêutron *delayed*) e o comando *Time Tally* que permite discriminar os eventos em janelas de tempo pré-determinadas ([GOORLEY et al., 2016](#)). Tais vantagens tornam

este código mais eficiente ainda na simulação de amostras multielementares com radioisótopos que possuem meia-vida bastante distintas muito utilizados em ativação neutrônica. O código MCNP6 é composto por uma série de comandos e arquivos de dados relacionados com a interação da radiação com a matéria, desta forma, é possível que o usuário desenvolva um arquivo de entrada de dados (INP), que é processado pelo código, contendo a descrição da geometria do problema em estudo. Esta estrutura é subdividida da seguinte forma:

- Descrição das células (*Cell Cards*): Contém as informações sobre o tipo de material e densidade de que cada célula é composta. Para esta representação, utilizam-se operadores booleanos com combinações de formas geométricas pré-definidas, tais como: esferas e planos.
- Descrição das Superfícies (*Surface Cards*): As formas geométricas básicas que compõem cada célula são definidas por caracteres mnemônicos indicando o tipo de superfície seguido de coordenadas que caracterizam seu posicionamento no espaço.
- Descrição dos Dados Físicos (*Data Cards*): A fonte é definida de acordo com sua geometria (pontual, plana, volumétrica), posicionamento no espaço, direção, tipo e energia da radiação, os materiais utilizados na simulação também são definidos neste bloco. É possível selecionar que tipos de partículas simular e a forma de como são analisadas pode ser definida utilizando os comandos (*tallies*) que fornecem diferentes grandezas de interesse (contadores), tais como: corrente de partículas, fluxo de partículas, deposição de energia e DAP.

Tomando como exemplo a “história” de um fóton, de uma forma simplificada, o processo que o código utiliza segue as etapas abaixo (PANI *et al.*, 1987):

- i) A seleção, de forma aleatória, da distância percorrida pelos fótons entre as interações descritas pela distribuição de probabilidade, conforme *Equação 14*.

$$x = \frac{-1}{\mu \cdot \ln(A)}$$

Equação 14

Onde:

μ – coeficiente de atenuação linear total (cm^{-1});

A – número aleatório.

ii) A seleção do tipo de interação, por números aleatórios, proporcional às seções de choque dos processos físicos possíveis de ocorrerem. Dependendo da interação é realizada a escolha de uma nova trajetória.

iii) Caso o código também esteja seguindo os elétrons gerados, para cada interação de um fóton é também gerada uma história para o elétron liberado.

iv) Esta história se encerra quando o fóton ultrapassar os limites das regiões que descrevem a geometria de contagem (escape) ou quando a energia do fóton ou do elétron chegar um valor mínimo (energia de corte) ou ainda quando a energia do fóton ou do elétron for completamente absorvida.

O número de histórias especificado no código define a precisão e a flutuação estatística dos resultados. As respostas calculadas são acompanhadas pelo erro relativo (R) estimado, utilizado para a avaliação da qualidade dos resultados e é proporcional ao número de histórias (NPS), conforme a *Equação 15* (GOORLEY *et al.*, 2016).

$$R = \frac{\sqrt{N}}{N}$$

Equação 15

Onde:

N – número de contagens.

Desta forma, para reduzir o erro relativo à metade é necessário aumentar em quatro vezes o número de histórias ou ainda utilizar as técnicas de redução de variância, quando o tempo de processamento se tornar impraticável.

2.5 – REDES NEURAIIS ARTIFICIAIS

O cérebro humano é composto por uma estrutura de grande complexidade, formada pelas as redes neurais biológicas, com capacidade de processamento não-linear e paralela, que possui a capacidade de se organizar para a execução de determinadas

tarefas (HAYKIN, 1994). É justamente este paralelismo que garante ao homem a capacidade de armazenar e representar o conhecimento adquirido, tornando-o acessível (BEALE e JACKSON, 1990).

Os computadores são muito mais rápidos do que o cérebro humano em cálculos de operações matemáticas; já na execução de funções simples, tais como, a identificação e o reconhecimento de padrões visuais ou sonoros podem ser realizados facilmente pelo nosso cérebro. Esta característica inspirou pesquisadores a desenvolver modelos baseados no funcionamento do cérebro humano – as Redes Neurais Artificiais (RNAs).

A principal característica das RNAs é a capacidade de aprender por meio de exemplos. São capazes de descobrir comportamentos e padrões a partir de um conjunto finito de informações¹⁰, denominado conjunto de treinamento. A rede é capaz de generalizar o conhecimento adquirido durante o processo de treinamento, ou seja, a RNA torna-se capaz de responder adequadamente para novas situações, não incluídas no conjunto de treinamento.

Uma RNA constitui-se de unidades simples de processamento interconectadas, chamadas neurônios artificiais¹¹. Cada neurônio é responsável pelo mapeamento de dados de “entradas” e “saídas” por meio de funções matemáticas, normalmente não-lineares (HAYKIN, 1994).

As RNAs têm-se mostrado de fácil aplicação e eficientes, especialmente em problemas onde não há uma formulação analítica ou onde não é requerido um conhecimento prévio da distribuição das variáveis, ou ainda, quando o próprio problema se modifica constantemente com o tempo. O funcionamento de uma RNA pode ser descrito em duas fases distintas:

- A fase de treinamento, chamada de fase *off-line*, realizada pelo uso de um algoritmo¹² de aprendizagem, onde é necessário que a RNA aprenda os padrões de um conjunto de exemplos previamente fornecidos.
- A fase de operação, chamada de fase *on-line*, na qual a RNA é usada para responder a novas situações, e não precisa mais do conjunto de treinamento.

¹⁰ Dados que são passados para uma rede neural artificial durante o processo de treinamento.

¹¹ Os neurônios artificiais são modelos matemáticos simplificados do neurônio biológico que procuram simular sua forma, comportamento e funções básicas.

¹² É um conjunto de regras bem definidas para adaptar os parâmetros de uma rede neural para a solução (aprender) de determinada função.

2.5.1 – REDES NEURAIS ARTIFICIAIS MULTICAMADAS

Uma RNA multicamadas com propagação do sinal adiante (*feed-forward Multilayer Perceptron* - MLP¹³) é composta de várias camadas de neurônios. Este tipo de arquitetura caracteriza-se pela organização dos neurônios em uma camada de entrada, uma ou mais camadas intermediárias, onde ocorre a maior parte do processamento, e uma camada de saída. A rede MLP é considerada como um aproximador universal de funções, pois permite mapear qualquer função, sendo que seu grau de precisão dependerá principalmente do número de neurônios, bem como da escolha eficiente do conjunto de dados de treinamento (CYBENKO, 1989). Uma representação de uma rede neural artificial MLP é apresentada na *Figura 11*.

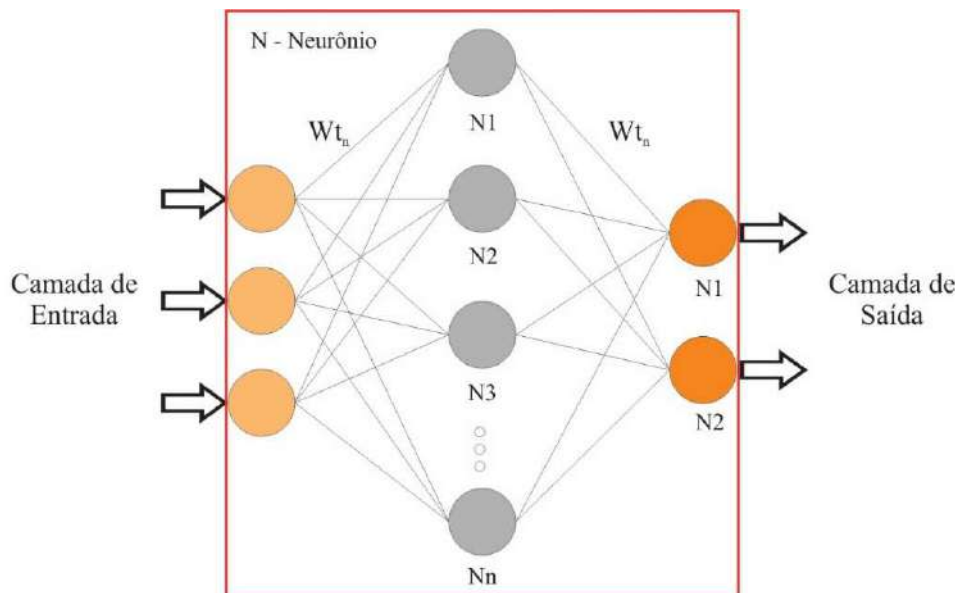


Figura 11: Estrutura de uma Rede Neural Artificial MLP.

O processo de aprendizado supervisionado de uma RNA se adapta aos dados de forma a assimilar o conhecimento nele contido. De modo simplificado durante o treinamento de uma rede, cada padrão de treinamento compreende um vetor de entrada e um vetor de saída a ele associado. À medida que o treinamento se desenvolve, o erro tende a diminuir e a rede a superajustar-se (*over fitting*) aos valores deste conjunto, conduzindo a perda de capacidade de generalização. Para contornar este problema, utiliza-se um mecanismo de validação cruzada (*Cross validation*) (HAYKIN, 1994) que

¹³Tipo de arquitetura de modelo sem ligações de retroalimentações.

se inicia dividindo o conjunto de dados em dois subconjuntos: Treinamento e Teste. O conjunto de Teste é utilizado para verificação da generalização da rede, ou seja, avalia a eficiência da RNA, evitando seu supertreinamento. O erro para o subconjunto de Teste tende a diminuir no início do treinamento e, a aumentar quando a rede começa a se superajustar indicando perda de generalização; neste momento o processo de treinamento deve ser interrompido.

Outro parâmetro de análise de desempenho do treinamento da RNA é a avaliação feita por meio de métricas de erros, por exemplo: valores do Erro Relativo Médio (RME) até atingir um valor suficientemente pequeno ou quando a função objetivo torna-se estacionária. Após o final do treinamento da rede, uma avaliação se a rede fornece saídas com erros inferiores a uma precisão desejada é realizado com uso de um terceiro subconjunto de dados, denominado de Validação. A importância deste subconjunto está no fato dos dados não terem sido usados anteriormente pela rede durante a etapa de treinamento e mede se o treinamento foi adequado, sem ser tendencioso (HAYKIN, 1994; ZHANG e RONG, 1996).

2.5.2 – ALGORITMO DE TREINAMENTO DE RETROPROPAGAÇÃO DO ERRO

O algoritmo de retropropagação do erro (*Back-propagation*) realiza aproximações locais para o mapeamento entre a entrada e a saída da rede e é utilizado para classificar, aproximar funções e prever tendências (RUMELHART, HINTON e WILLIAMS, 1986). Este algoritmo é baseado no método de gradiente descendente, que calcula as derivadas parciais de uma função de erro, com relação ao vetor peso (W_t) de certo vetor de entradas. Seu objetivo é minimizar a função erro entre a saída real da rede e a saída desejada (HAYKIN, 1994). O treinamento da rede é dividido em duas fases. Inicialmente, escolhem-se, normalmente de forma aleatória, os pesos e um padrão é apresentado à camada de entrada da rede.

i) A primeira fase consiste na propagação adiante (*forward*) dos estímulos apresentados que fluem por meio da rede, da entrada para a saída, até que seja obtida a resposta na saída da rede. A saída obtida é comparada com o valor esperado e o erro entre eles é calculado.

ii) A segunda fase ocorre em sentido oposto, este erro é retropropagado (*Back-propagation*) pelas camadas antecessoras até a camada de entrada, modificando apropriadamente os pesos das camadas internas para que se produza a saída desejada.

Cada vez que um padrão é apresentado à rede, os pesos são modificados na direção desejada para produzir um erro menor na próxima vez que o mesmo padrão for apresentado. O processo de treinamento é iterativo e termina após um determinado critério de parada ser atingido. Neste trabalho, uma RNA de multcamadas com propagação do sinal adiante (*perceptron multilayer feed-forward* - MLP) de 5 camadas foi utilizada. O algoritmo de aprendizagem (supervisionado) é a retro propagação do erro *Back-propagation*.

CAPÍTULO 3

3 – MATERIAIS E MÉTODOS

A metodologia apresentada neste estudo utiliza o código MCNP6 para simular a transmissão e o espalhamento de raios gama de uma fonte de radiação (^{137}Cs – 661,657 keV) ao interagir em uma tubulação com os produtos (fluidos) gasolina e óleo, e seu registro é feito por dois detectores de $1\frac{1}{4} \times \frac{3}{4}$ " de NaI(Tl). Com o uso destas simulações foi gerado um conjunto de dados para treinar e avaliar uma rede neural artificial (RNA) para avaliar o nível de pureza de um regime de fluxo estratificado bifásico. Nesta secção são apresentados a metodologia desenvolvida para determinação das frações de volume, as curvas-resposta das características do detector e sua validação experimental, assim como o estudo sobre a simulação matemática e a utilização da RNA como algoritmo matemático para obtenção das características do regime bifásico.

3.1 – MATERIAIS

As características das fontes radioativas e do sistema espectrométrico utilizado neste estudo são descritas a seguir. As fontes foram preparadas e calibradas pelo Laboratório de Metrologia por Radiação Ionizante (LNMRI) do Instituto de Radioproteção e Dosimetria (IRD), Brasil. As características das fontes radioativas que utilizadas são mostradas na *Tabela 1*.

Tabela 1: Características das fontes utilizadas para avaliação da resposta do detector.

Fonte	Energia (keV)	Meia Vida (ano)	Probabilidade de Emissão (%)	Atividade (kBq)*
^{241}Am	59,541	432,60	35,92	28,15
	80,998		33,31	
^{133}Ba	302,851	10,55	18,31	17,80
	356,013		62,05	
^{137}Cs	661,657	30,08	84,99	22,98
^{60}Co	1173,228	5,27	99,85	46,078
	1332,492		99,98	

*Atividade corrigida para a data do experimento.

Os dados das fontes radioativas calibradas foram obtidos no aplicativo *Isotope Browser*, versão 5.15.74 Android, IAEA, *Nuclear Data Section* (IAEA, 2017).

As fontes utilizadas são compostas de um disco de acrílico com 25,4 mm de diâmetro e 5,0 mm de espessura, com um orifício de 4,0 mm no centro. Adiciona-se uma solução padrão do radionuclídeo desejado, gota a gota, na região formada pelo disco de acrílico e então é colocada uma tampa de acrílico com 1,0 mm de espessura. Na *Figura 12* é apresentado um diagrama da montagem das fontes radioativas utilizadas, a parte em amarelo representa a tampa da fonte.

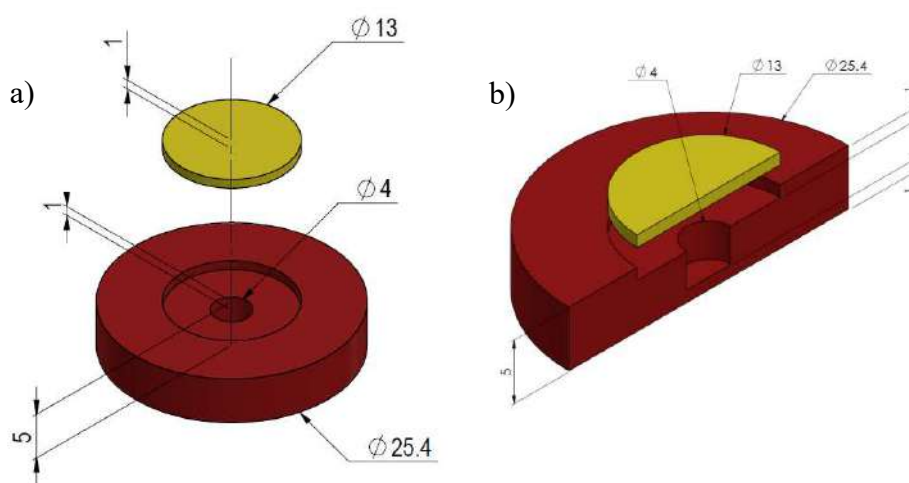


Figura 12: Representação esquemática da fonte radioativa: a) modelo utilizado no código MCNP6; b) deposição de material radioativo.

O Sistema de espectrometria foi baseado em um detector $1\frac{1}{4} \times \frac{3}{4}$ " de NaI(Tl), foi utilizado um conjunto de módulos eletrônicos para obter e processar o sinal gerado pelo detector. As características do sistema espectrométrico utilizado são:

- Fonte de alta voltagem fabricada pela Canberra, modelo 3106D;
- Pré-amplificador fabricado pela Canberra, modelo 2005;
- Amplificador marca Tennelec, modelo TC245;
- Analisador monocal marca Ortec, modelo 551;
- Analisador multicanal (AMC) usando uma placa de aquisição de dados, de baixo custo, marca National Instruments, modelo USB-6009. Este equipamento foi usado como base para o desenvolvimento do multicanal (*software*) pelo Instituto de Engenharia Nuclear (IEN) (FARIAS *et al.*, 2019).

3.2 – METODOLOGIA

O método é baseado na transmissão de um feixe de raios gama através de um tubo contendo fluidos em um sistema multifásico que pode ser calculado pela Equação de Beer-Lambert. Enquanto para o espalhamento, a energia do fóton é calculada pela equação de Compton e o número de fótons dispersos que chegam ao detector pode ser calculado usando a seção de choque diferencial de Klein-Nishina.

3.2.1 – CARACTERÍSTICAS DO DETECTOR NaI(Tl)

Para a utilização de detectores NaI(Tl) em medições é necessário determinar as curvas de eficiência de contagem em função da energia do fóton incidente e da resolução em energia. Os parâmetros de calibração de um detector podem ser determinados experimentalmente, para isto é necessário a utilização de padrões radioativos cujas energias de emissão abranjam todo o intervalo de interesse (de 59,541 até 1332 keV).

A curva de eficiência absoluta de fotopico do detector foi determinada experimentalmente, com os padrões radioativos listados na Tabela 1, visando a validação quantitativa da modelagem do detector (EWA *et al.*, 2001; SALGADO *et al.*, 2010). O tempo de medição para todos os experimentos foi de 60 minutos e a distância fonte-detector (DFD) foi de 28 mm, mantida com auxílio de um suporte desenvolvido em Ácido Polilático (PLA), posicionado na direção do eixo axial do detector. Esses parâmetros foram escolhidos de forma a minimizar o tempo morto, diminuir o efeito soma¹⁴ e para que os erros associados devido à estatística de contagem permanecessem abaixo de 1%. Além disso, foram consideradas a radiação de fundo (BG) e as contribuições devidas às múltiplas interações pelo Efeito Compton.

Outra função de resposta estudada neste trabalho é a resolução em energia. Para sua determinação foi utilizado o mesmo procedimento para a obtenção da curva de eficiência. Após os fotopicos serem identificados por meio do AMC foi calculada a largura à meia altura (FWHM) de cada fotopico para determinar a resolução do detector, por meio da *Equação 8*.

¹⁴ Ocorre quando, o radionuclídeo emite dois ou mais fótons dentro de um intervalo de tempo muito curto de forma que o sistema de detecção é incapaz de separar os dois eventos considerando-os como um só. Ocorre também quando a taxa de emissão dos fótons é muito elevada.

3.2.2 – MODELAGEM DO DETECTOR DE NaI(Tl)

Utilizando o código MCNP6 é possível calcular a função resposta de detectores com excelentes resultados. Para isso o detector deve ser modelado com a maior precisão possível, pois as variações no tamanho do cristal influenciam na determinação da eficiência (NAKAMURA, 1983; SIMA, 1990; CONTI *et al.*, 1999).

Para a modelagem matemática do cristal do detector¹⁵ foi considerado um cilindro homogêneo de iodeto de sódio ativado com tálio: NaI(Tl) (BERGER e SELTZER, 1972) com $3,667 \text{ g.cm}^{-3}$ de densidade. O cristal do detector é envolvido, por uma camada refletora de óxido de magnésio (MgO) para minimizar a perda de luz. Todo o conjunto é encapsulado por uma capa de alumínio para proteção. Estes materiais precisam ser considerados na simulação, visto que atenuam a incidência dos fótons, principalmente em baixa energia. A densidade do material reflexivo é de $3,58 \text{ g.cm}^{-3}$ (SAITO e MORIUCHI, 1981 e ORION e WILOPOLSKI, 2002) e a densidade do alumínio é $2,6989 \text{ g.cm}^{-3}$ (MCCONN JR., 2011). A representação gráfica do modelo do detector é apresentada na *Figura 13*.

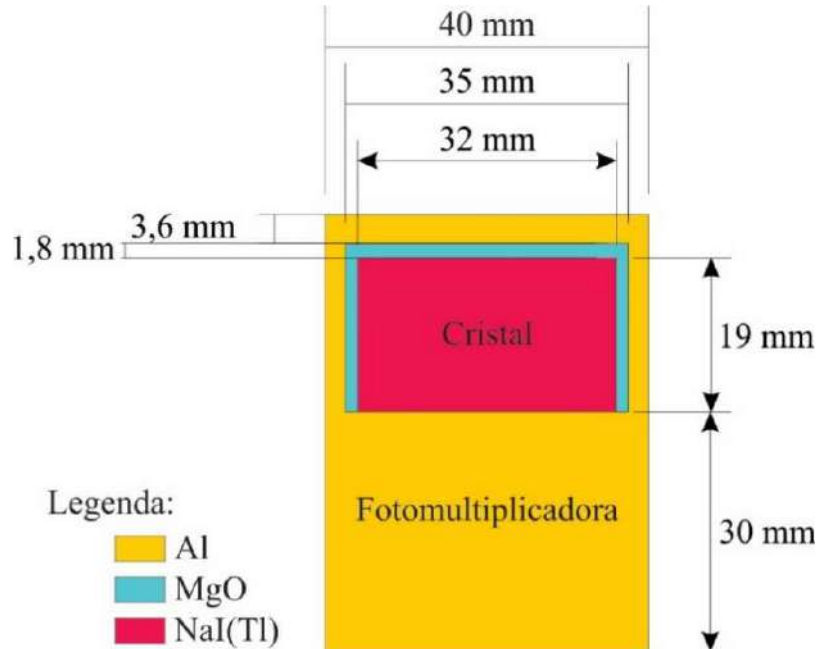


Figura 13: Representação esquemática do Modelo matemático do detector NaI(Tl).

¹⁵ Na realidade apenas um detector foi validado e considerou-se suas características para o segundo detector.

Outras considerações importantes deste modelo devem ser mencionadas:

- i) a fotomultiplicadora, posicionado atrás do cristal, foi tratado como um disco de alumínio com 30 mm de espessura (SHI *et al.*, 2002; SALGADO *et al.*, 2020);
- ii) uma fonte radioativa do tipo volumétrico com emissão isotrópica é simulada no código MCNP6.
- iii) os elétrons gerados pela radiação gama no cristal NaI(Tl) são completamente absorvidos pela espessura do cristal, portanto não foram considerados na simulação.
- iv) os materiais ao redor do cristal do detector foram considerados atenuadores pela incidência de fótons de baixa energia, principalmente até 300 keV (EWA *et al.*, 2001).

Quando os manuais técnicos não declaram as informações sobre as características de um detector (forma do cristal e as dimensões do volume ativo) ou mesmo quando o modelo ou fabricante do detector não é conhecido, essas informações podem ser obtidas realizando uma gamagrafia (SALGADO *et al.*, 2012). No entanto, como o MCNP não simula fótons de luz e sim interação da radiação com o meio, uma hipótese de que o volume real seja diferente daquele que de fato corresponda à eficiência do detector poderia ser investigada. Por isso para determinar esses valores com precisão foi realizado um processo iterativo entre as contagens obtidas na simulação e a variação da espessura e diâmetro do volume sensível do detector (cristal). Este procedimento foi realizado usando duas fontes puntiformes, ^{241}Am (59,541 keV) e ^{137}Cs (661,657 keV). As medições foram executadas usando ambas as fontes posicionadas no sentido do eixo axial em relação ao cristal com uma DFD de 28 mm. Os cálculos partiram dos valores do detector obtido pela técnica de gamagrafia, que foi de 31,75 mm de diâmetro e 19,05 mm de espessura (CONTI *et al.*, 1999; SALGADO *et al.*, 2012).

Esta geometria foi reproduzida por simulação e os resultados foram comparados com os valores experimentais. Com esses valores verificou-se que a contagem total registrada foi maior do que a obtida experimentalmente. A espessura e o diâmetro do cristal foram gradualmente reduzidos até que o valor da contagem total obtida ficasse de acordo com o valor experimental, definindo assim o volume real do cristal (CONTI *et al.*, 1999). Para avaliar tal procedimento, foi feita a curva de eficiência absoluta de fotopico simulada e comparada com a obtida experimentalmente.

Para considerar a resolução de energia do detector NaI(Tl) na simulação matemática, utilizando o código MCNP6, tornando-o mais realista, é necessário utilizar um tratamento especial para a DAP, em que os picos de energia se comportam como uma função gaussiana, ampliando-a de acordo com a *Equação 16*. Vale destacar que a informação obtida por medida espectrométrica de raios gama representa uma DAP que representa os diferentes processos de interação da radiação com o detector. Devido à energia depositada pelos fótons neste detector, efeitos espúrios são inseridos neste processo de medição, tais como: picos de escape¹⁶, resolução energética etc.

$$f(E) = C \cdot \exp - \left(\frac{E - E_0}{FWHM/2\sqrt{\ln 2}} \right)^2$$

Equação 16

Onde:

E – energia “alargada” (MeV);

E_0 – energia “não alargada” (MeV);

C – constante de normalização (MeV);

$FWHM/2\sqrt{\ln 2}$ – largura de Gauss (MeV).

Este tratamento é realizado por meio de parâmetros que são fornecidos pelo usuário ao arquivo de entrada (INP) com o comando *Gaussian Energy Broadening* (GEB) do comando FTn, disponível no código MCNP6 (GOORLEY *et al.*, 2016). Esses parâmetros foram obtidos experimentalmente a partir da aproximação de mínimos quadrados da função não linear usando a *Equação 17*.

$$FWHM = a + b\sqrt{E} + cE^2$$

Equação 17

Onde:

E – energia dos raios gama incidentes (MeV);

a , b , c – constantes ajustadas pelo usuário.

¹⁶Se um fóton de raios X característico for emitido na direção contrária à do fóton incidente haverá a probabilidade deste fóton sair do volume sensível do detector, sem ser absorvido, ou seja, escapar.

A resposta da simulação foi obtida utilizando o comando de saída “tally card F8”, disponível no código MCNP6, que apresenta uma DAP devido aos fótons na região sensível do cristal. O comando F8 também exibe o erro relativo devido às contagens em cada faixa do espectro de energia. Para obter boas estatísticas devido às contagens em cada faixa de energia da DAP, o número de histórias (NPS) utilizado foi de 1×10^8 obtendo erro relativo em cada canal de energia da DAP abaixo de 1%. Não foi considerado o transporte de elétrons, pois a espessura de NaI(Tl) é mais do que suficiente para absorver a energia dos elétrons. Uma simulação inicial foi realizada onde se comprovou tal comportamento. Como isso elevou sensivelmente o tempo computacional, o transporte do elétron foi desativado.

3.2.3 – GEOMETRIA PROPOSTA DO SISTEMA DE MEDIÇÃO

O modelo matemático proposto, simulado no código MCNP6, representa uma geometria de medição que utiliza uma fonte de ^{137}Cs com emissão de raios gama de 661,657 keV e dois detectores cintiladores de NaI(Tl). Uma colimação matemática foi desenvolvida para utilizar um feixe largo com divergência suficiente para fornecer boa estatística de contagem em ambos os detectores de NaI(Tl). Visando reduzir o tempo computacional das simulações, a fonte colimada foi elaborada numa configuração de cone utilizando os cartões SI, SP e SB disponíveis no código MCNP6. Em todas as simulações utilizou-se um ângulo sólido máximo entre a fonte e o detector D1 com abertura angular de $8,7^\circ$, suficiente para fornecer boa estatística de contagem nos detectores. Ambos os detectores foram posicionados em torno de uma tubulação de aço 316L com 0,3 cm de espessura de parede e densidade de $8,0 \text{ g.cm}^{-3}$ (MCCONN JR., 2011). Visando avaliar a metodologia em tubulações com raios diferentes, foram desenvolvidos sete modelos com raio interno de 4 a 10 polegadas com passos de 1 polegada. O primeiro detector (D1) é posicionado diametralmente oposto à fonte, para medir o feixe transmitido, enquanto que o segundo (D2) para medir o feixe espalhado. Neste caso, foi realizado um estudo para avaliar qual seria o melhor posicionamento deste detector. Três ângulos em relação à fonte foram investigados, 15° , 30° e 45° . A melhor posição do detector foi escolhida de acordo com os resultados da predição da rede neural observando-se o Erro relativo médio (*Mean Relative Error – MRE*) e erro quadrático médio (*Root Mean Squared Error – RMSE*) e número de casos com erros até 10%. Vale destacar que o segundo detector objetiva aumentar a área de visualização da

seção transversal inspecionada do tubo, além de fornecer um conjunto mais completo de informações sobre os fluidos para inferência da rede neural artificial.

O interior do tubo foi preenchido com diferentes quantidades de fluidos (níveis de pureza) para investigar a atenuação e o espalhamento dos raios gama. Neste estudo, utilizaram-se como fluidos: gasolina (C_8H_{18}) com densidade de $0,721 \text{ g.cm}^{-3}$ e óleo combustível com densidade de $0,955 \text{ g.cm}^{-3}$ (MCCONN JR., 2011). O registro F8, disponível no código, foi utilizado para estimar a DAP (preservando as diferenças inerentes, de agora em diante DAP será referenciada como espectro) registrada nos detectores. O espectro foi classificado de 20 a 800 keV com passos de 10 keV. Essa faixa de energia foi escolhida porque os espectros foram adquiridos considerando a energia de 661,657 keV da fonte de ^{137}Cs . Importante mencionar que o detector foi validado numa ampla faixa de energia permitindo a utilização de outras fontes de energia (^{60}Co e ^{192}Ir), tornando o procedimento versátil. Uma representação esquemática da geometria de medição proposta é apresentada na *Figura 14*.

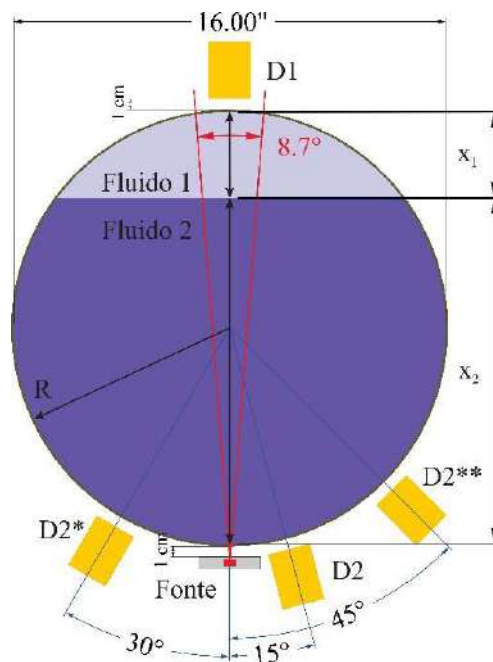


Figura 14: Geometria de medição simulada proposta para cálculo do nível de pureza.

As equações disponíveis na literatura consideram tubo com seção reta quadrada e como é proposto neste trabalho um tubo com seção circular, por isso se fez necessário desenvolver uma equação para determinar a fração de volume dos fluidos. Desta forma, conhecendo a espessura dos fluidos (x_1 e x_2) por meio das *Equações 10* e

11, calcula-se a integral da área ocupada pelos fluidos, o que pode ser feito usando a *Equação 18*.

$$S(x) = 2 \cdot \int_0^h \sqrt{R^2 - (y - R)^2} dy$$

Equação 18

Onde:

R – raio do tubo (cm);

y – parâmetro matemático para calcular a integral.

Por meio de manipulações matemáticas e utilizando o método trigonométrico, o cálculo da fração volumétrica é dado pela *Equação 19* (SALGADO *et al.*, 2020). A demonstração completa deste procedimento matemático está disposta no APÊNDICE A.

$$\alpha(x_n) = \frac{\pi R^2}{2} + R^2 \cdot \sin^{-1} \left(\frac{x_n - R}{R} \right) + (x_n - R) \cdot \sqrt{R^2 - (x_n - R)^2}$$

Equação 19

3.2.4 – PREDIÇÃO DA PUREZA DOS FLUIDOS POR RNA

A RNA1 de multicamadas com propagação do sinal adiante (MLP) de 5 camadas foi utilizada nesta investigação baseada no algoritmo de retro propagação do erro (*Back-propagation*). Os padrões de treinamento da RNA1 foram formados pelos espectros obtidos a partir dos detectores D1 e D2 nas diversas combinações do nível de pureza dos fluidos e os raios internos das tubulações.

A geração dos subconjuntos de dados para treinamento e teste da rede é uma parte fundamental deste estudo, portanto, modificaram-se os valores das espessuras dos fluidos (x_1 e x_2) no regime de fluxo estratificado, conforme *Figura 14*. As frações de volume foram calculadas pela Equação 20 desenvolvida neste trabalho. Para obter um conjunto de padrões, muitas combinações de pureza dos fluidos foram variadas de 0 a 100%, nos extremos de 1 até 10% e de 90 a 100% com passos de 1% e na faixa intermediária de 10 a 90 % com passos de 10%. Além disto, variou-se o raio da tubulação de 4 a 10 polegadas com passos de 1 polegada. Tal procedimento possibilitou

gerar um conjunto de simulações totalizando 203 (29×7) padrões, sendo 29 padrões diferentes de níveis de pureza dos fluidos para cada um dos 7 valores de raio investigados. O conjunto de padrões original foi dividido em três subconjuntos: Treinamento (TRT) contendo 143 padrões (70%), Teste (TST) consistindo de 40 padrões (20%) e Validação (VAL) consistindo de 20 padrões (10%) (ZADEH *et al.*, 2016). Importante destacar que para identificar a região de interface faz-se necessário saber quando determinado fluido é puro, por isso nesta investigação os limites inferiores e superiores são mais detalhados, respectivamente início e final da região de interface.

A partir da resposta de cada um destes 203 padrões simulados no código MCNP6 foram obtidas as contagens relativas aos feixes transmitido e espalhado que constituem os respectivos espectros de energia. O NPS utilizado foi determinado para obter estatísticas aceitáveis, com valores de erro relativo (ER) inferior a 3% para todas as subdivisões de energia dos espectros, de acordo com o manual do código MCNP6 (GOORLEY *et al.*, 2016).

Para o desenvolvimento da RNA1, utilizaram-se como padrões de entrada o raio interno do duto e os espectros, que foram usados diretamente para “alimentar” a rede, obtidos pelos detectores D1 (Contagens relativas às energias de 20 a 800 keV) e D2 (Contagens relativas às energias de 20 a 300 keV) que totalizaram 119 neurônios. Vale destacar que um estudo sobre o posicionamento do detector D2 foi realizado para determinar a sua melhor posição em relação à predição da rede neural. Enquanto que, os dados de saída consistem de 1 neurônio, o nível de pureza de cada fluido. Um esquema do modelo da rede proposto com os dados de entrada e de saída é apresentado esquematicamente na *Figura 15*.

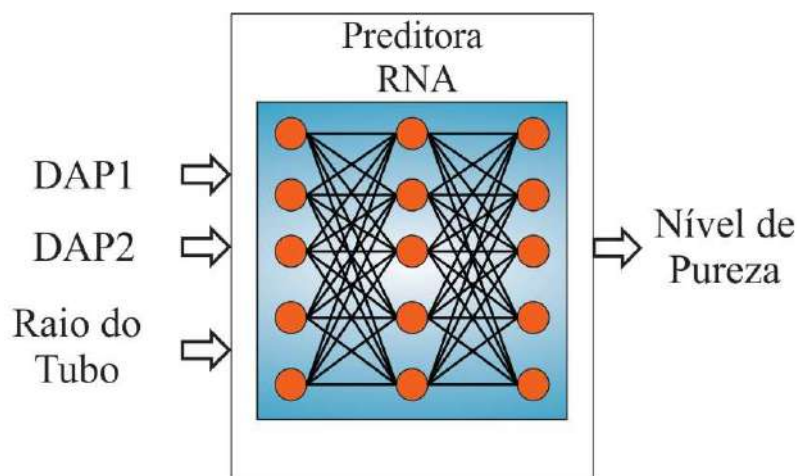


Figura 15: Arquitetura da RNA1 para cálculo da pureza dos fluidos.

O subconjunto de Teste foi usado para avaliar a generalização da RNA1, com intuito de evitar seu super treinamento (*over training*), pelo critério de parada: validação cruzada (*cross-validation*) (HAYKIN, 1994). Após o treinamento da RNA1, realizou-se por meio do subconjunto de Validação uma avaliação final, tendo como objetivo testar a RNA1 na fase de operação.

Depois que a RNA1 é treinada e validada, ela pode ser usada para predição da pureza dos produtos sem a necessidade de qualquer ajuste adicional para a realização de medições on-line, e não necessita mais dos dados utilizados na fase de treinamento. A resposta da rede para o nível de pureza para cada subconjunto de padrões de Treinamento, Teste e Validação foi avaliada usando as métricas do erro relativo médio (*Mean Relative Error* – MRE), erro quadrático médio (*Mean Square Error*– MSE), erro quadrático médio (*Root Mean Square Error* – RMSE) e erro médio absoluto (*Mean Absolute Error* – MAE). O MRE é uma medida da incerteza da medição em comparação com o valor real para certo conjunto de dados e é calculado por meio da *Equação 20*.

$$MRE(\%) = \frac{1}{N} \sum_1^N \frac{|(x_{real} - x_{ann})|}{|x_{real}|} \cdot 100$$

Equação 20

O erro quadrático médio (*Mean square error*– MSE) é provavelmente o índice de erro mais comumente utilizado. Ele penaliza erros maiores porque a quadratura de números maiores tem um impacto maior do que a quadratura de números menores. O MSE é a soma dos erros quadráticos dividida pelo número de observações, conforme *Equação 21*.

$$MSE = \sum_1^N \frac{(x_{real} - x_{ann})^2}{N}$$

Equação 21

O RMSE é uma medida frequentemente usada para medir as diferenças entre os valores previstos pela rede e os valores reais e pode ser calculado usando a *Equação 22*. O RMSE atribui um peso extra, penalizando grandes erros.

$$RMSE = \sqrt{\sum_1^N \frac{(x_{real} - x_{ann})^2}{N}}$$

Equação 22

A MAE é a soma das diferenças absolutas entre o valor real e a previsão dividida pelo número de observações, conforme *Equação 23*.

$$MAE = \sum_1^N \frac{|x_{real} - x_{ann}|}{N}$$

Equação 23

Onde:

N – representa o número de dados;

x_{real} – valor real;

x_{ann} – valor de predito pela RNA.

3.2.5 – AVALIAÇÃO DA ROBUSTEZ DO TREINAMENTO

O modelo proposto de medição (*Figura 14*) apresentada na seção 3.2.3 foi testado com quatro diferentes fluidos: Gasolina (Gas), Querosene (Ker), Óleo combustível (Oil) e Glicerina (Gly) e suas principais características destes fluidos são apresentadas na *Tabela 2* (MCCONN JR., 2011).

Tabela 2: Dados dos fluidos investigados neste estudo.

Fluido	Elemento	Fração Mássica	Densidade	Fórmula
Gasolina	H	0.157000	0.721	C ₈ H ₁₈
	C	0.843000		
Querosene	H	0.160000	0.8190	C ₁₄ H ₃₀
	C	0.840000		
Óleo Combustível	H	0.125878	0.955	-
	C	0.862308		
	S	0.011814		
Glicerina	H	0.087554	1.2613	(C ₃ H ₈ O ₃)
	C	0.391262		
	O	0.521185		

Nesta etapa, considerou-se uma tubulação de aço 316L com valor fixo de raio igual a 20.32 cm (8") e 0,2 cm de espessura. Como o estudo visa identificar a região de interface no transporte em polidutos, foram formados seis grupos para investigação: Gas–Ker, Gas–Oil, Gas–Gly, Ker–Gly, Ker–Oil, Oil–Gly. Os padrões com diversas frações de volume foram calculados, conhecendo-se o comprimento de x_1 ou x_2 , pela [Equação 19](#) descrita no item 3.2.3. Na [Figura 16](#), a título de ilustração é apresentada a curva de transporte de quatro bateladas de Gas – Gly – Oil – Ker.

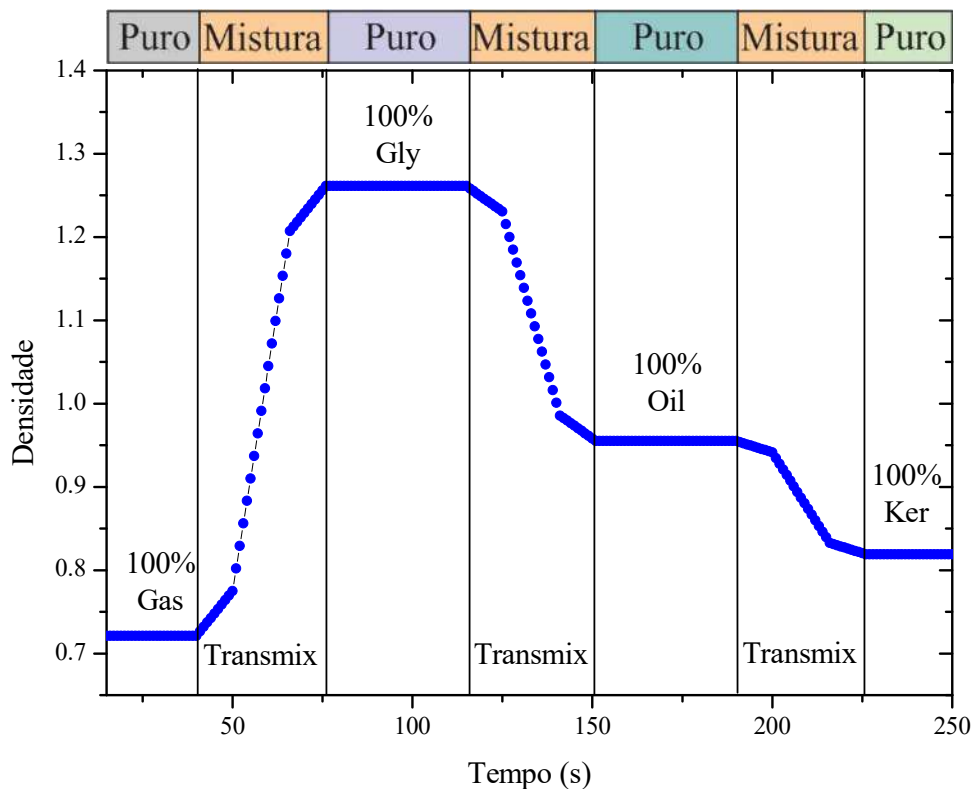


Figura 16: Densidade de cada região de interface (*transmix*) simulada para os quatro fluidos.

De fato, a região de interface representa uma combinação entre dois fluidos que estão em contato um com o outro. Nesta região, a quantidade do segundo fluido é gradualmente aumentada quando se move na direção do primeiro fluido.

Foi desenvolvida uma RNA2, que corresponde a uma rede de multicamadas com propagação do sinal adiante (MLP) de 5 camadas com o algoritmo de aprendizagem de retro propagação do erro (*Back-propagation*). Desta forma, para compor os padrões para treinamento da RNA2 obtiveram-se muitas combinações de pureza dos fluidos que variaram de 1 até 10% e de 90 a 100% com passos de 1% e de 10 a 90% com passos de

5% totalizando 37 padrões para cada combinação de dois fluidos investigados. Como neste trabalho quatro fluidos são usados, fazendo combinação de dois em dois tem-se seis possibilidades de investigação. Desta forma, tal procedimento possibilitou gerar um conjunto de simulações totalizando 222 (37×6) padrões para diferentes níveis de pureza dos fluidos para diferentes combinações de fluidos. O conjunto de padrões original foi dividido em três subconjuntos: TRT contendo 156 padrões (70%), TST consistindo de 44 padrões (20%) e VAL com 22 padrões (10%).

Cada um dos subconjuntos de padrões foi escolhido e distribuído aleatoriamente por todo campo de busca. A partir da simulação de cada um destes 222 padrões no código MCNP6 foram obtidos os espectros. Para o desenvolvimento da rede, utilizaram-se como padrões de entrada os espectros obtidos pelos detectores de transmissão (D1) e espalhamento (D2). Enquanto que, os dados de saída consistem de 2 neurônios, ou seja, a pureza de cada produto transportado e um indicador se o fluido é puro ou não, considerando uma pureza de 99%. Um esquema do modelo da rede proposto com os dados de entrada e de saída é apresentado esquematicamente na *Figura 17*.

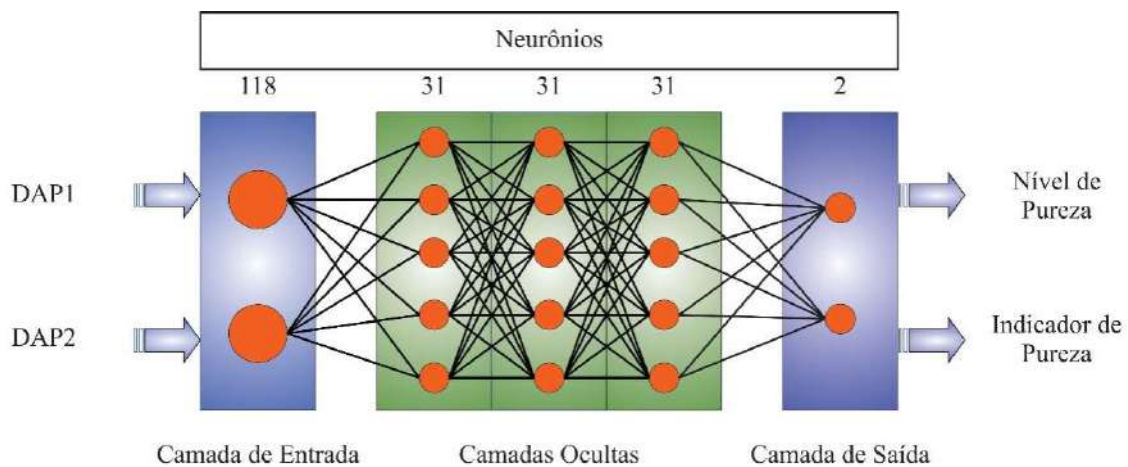


Figura 17: Configuração da RNA 2 desenvolvida neste estudo.

De forma simplificada, os padrões utilizados pela RNA são compostos pelas seguintes informações:

i) Entradas da RNA (118 neurônios):

Detector D1: contagens relativas às energias de 20 a 800 keV;

Detector D2: contagens relativas às energias de 20 a 300 keV.

ii) Saídas da RNA (2 neurônios):

Nível de Pureza dos fluidos;

Indicador de pureza do fluido.

Depois que a RNA é treinada e validada, ela pode ser usada para predição da pureza dos fluidos sem a necessidade de qualquer ajuste adicional para a realização de medições na fase *off-line*. Importante destacar que uma única rede neural foi treinada para predição destes parâmetros independentemente de qual combinação de fluidos está sendo transportada.

A resposta da rede para cada subconjunto de padrões TRT, TST e VAL foi avaliada usando diversas métricas matemáticas descritas no item 3.2.4.

3.2.6 – APERFEIÇOAMENTO DO SISTEMA PROPOSTO E IDENTIFICAÇÃO DO FLUIDO

Visando aperfeiçoar a medição da região de interface, nesta etapa buscou-se identificar os fluidos que são transportados em polidutos. Desta forma, é proposto desenvolver novas redes neurais para aumentar a precisão dos resultados preditos. Vale destacar que a geometria de medição (*Figura 14*) utilizada foi a mesma do item 3.2.3. Foi considerado o detector de transmissão (D1) localizado diametralmente à fonte de ^{137}Cs e o segundo detector (D2) de espalhamento posicionado em 15° em relação à fonte. O mesmo conjunto de dados utilizados no item 3.2.4 formado por 222 padrões representando seis regiões de interface são avaliados nesta investigação.

Para realizar estas etapas foram desenvolvidas duas redes neurais, a primeira (RNA 3) denominada como rede classificadora, onde se busca identificar os fluidos formadores de uma determinada região de interface e a segunda (RNA 4) denominada como rede preditora dos níveis de pureza dos fluidos. O desenvolvimento da rede classificadora (RNA 3) consistiu em utilizar os mesmos espectros de raios gama registradas nos detectores D1 e D2. Estes espectros foram considerados como dados de entrada da rede, enquanto que as saídas de RNA são dadas pela combinação de fluidos: Gas–Gly, Gas–Ker, Gas–Oil, Ker–Gly, Ker–Oil e Oil–Gas formando 6 neurônios, a fim de identificar automaticamente os fluidos presentes na região de interface.

O projeto da RNA 3 considerou o valor mais alto entre as saídas da rede para "1" correspondente a cada par de fluidos e para "0" os demais. Para ilustrar, suponha que os fluidos sejam Gas–Ker, então a rede deve ajustar a saída para Gas–Gly = 0, Gas–Ker = 1,

Gas–Oil=0, Ker–Gly=0, Ker–Oil=0 e Oil–Gas=0. Uma representação esquemática utilizada para a rede proposta é mostrada na *Figura 18*.

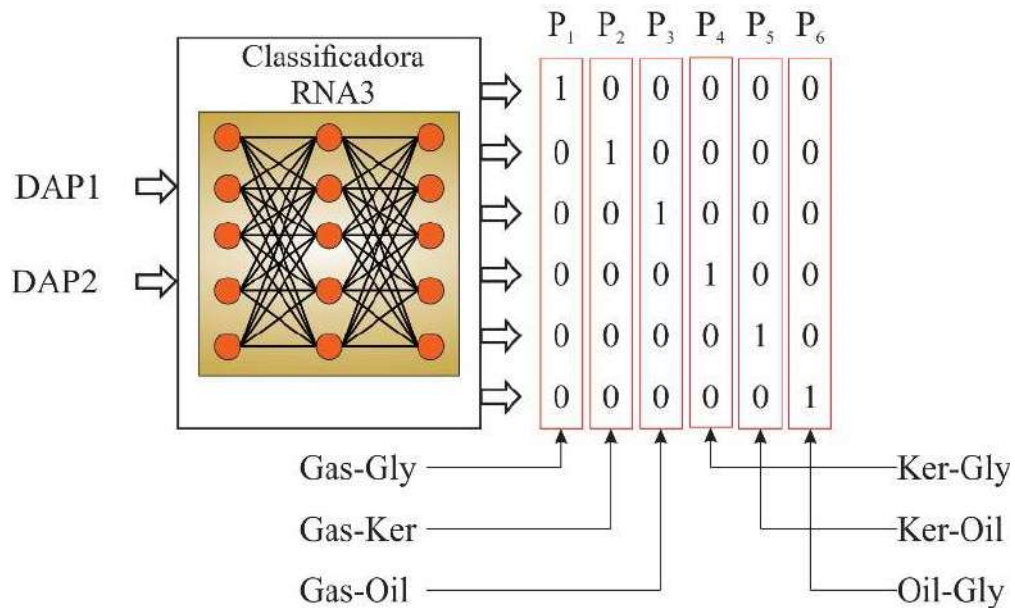


Figura 18: Rede classificadora dos fluidos presentes na região de interface.

A partir daí, visando aumentar a precisão na predição do nível de pureza dos fluidos, foi projetada uma quarta rede cujas as entradas são as saídas da RNA 4, ou seja, a identificação do par de fluidos em transporte. Um esquema representativo desta rede é mostrado na *Figura 19*. Vale destacar que os espectros também foram usados como dados de entrada.

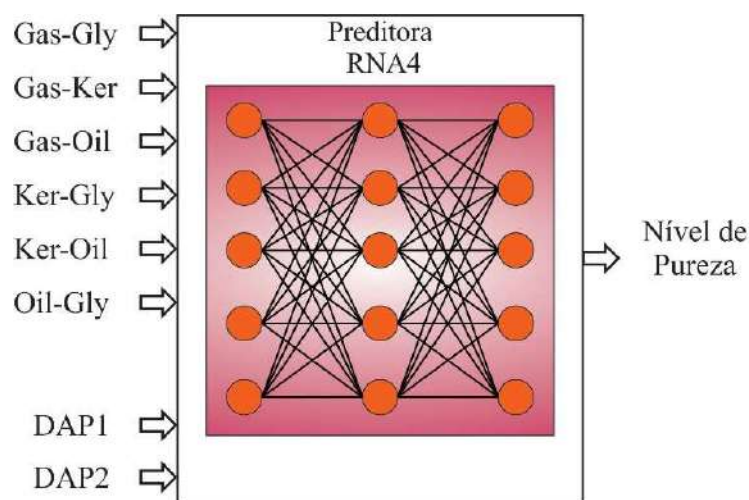


Figura 19: Rede preditiva desenvolvida para aumentar a precisão do cálculo da pureza dos fluidos.

CAPÍTULO 4

4 – RESULTADOS E DISCUSSÕES

Os métodos utilizados para a metodologia desenvolvida para a identificação da região de interface foram obtidos por meio da elaboração de modelos matemáticos representativos do regime de fluxo estratificado onde se variaram as quantidades dos fluidos a fim de criar um conjunto de padrões para treinamento de uma rede neural. Em outras palavras, diversos níveis de pureza dos fluidos, gasolina e óleo, foram simulados no código MCNP6 para criar um o conjunto de dados de treinamento e avaliação da rede para predição da pureza do fluido transportado.

Além disso, a geometria de medida proposta utiliza medição de feixes transmitido e espalhado e é também baseada na simulação matemática por meio do código MCNP6. Vale destacar, que um detector real foi modelado e validado experimentalmente por meio da curva de eficiência de fotopico e com a resolução em energia do detector real, tornando as respostas da geometria de medição mais realísticas.

4.1 – VALIDAÇÃO DA MODELAGEM DO DETECTOR DE NaI(Tl)

O modelo matemático utilizado para descrever o detector cintilador NaI(Tl) $1\frac{1}{4} \times \frac{3}{4}$ " real foi validado experimentalmente usando as fontes de calibração apresentados na Tabela 1, descrita na seção 3.1 – Materiais. O modelo matemático do detector foi elaborado no código MCNP6 e sua validação experimental baseou-se na curva de eficiência absoluta de fotopico. A resolução de energia foi utilizada para comparar qualitativamente as distribuições de altura de pulsos (DAPs), considerando a mesma geometria utilizada nos procedimentos experimentais.

No entanto, para realizar uma modelagem de forma precisa é necessário ter as dimensões do cristal e isso foi feito usando a técnica de gamagrafia que se mostrou uma ferramenta importante para estimar as dimensões reais do detector. O disco de alumínio na base do detector simulado leva em consideração o efeito de todas as peças que constituem o tubo fotomultiplicador localizado após o cristal (SHI *et al.*, 2002; SALGADO *et al.*, 2020). A partir destes valores, realizou o processo iterativo para comprovação da hipótese apresentada de que o volume sensível do detector poderia ser diferente. Após este procedimento, as dimensões do volume sensível do detector

NaI(Tl) que apresentaram melhor concordância com os valores experimentais foram 11,30 mm de espessura e 26,75 mm de diâmetro.

Os valores de eficiência absoluta de fotopico experimental e simulado são mostrados na *Figura 20*. Vale ressaltar que o sistema de espectrometria foi devidamente calibrado em energia e que a fotomultiplicadora do detector é operada em 750 Volts.

A incerteza da eficiência foi calculada usando a *Equação 7*, descrita na seção 2.2.4, e apresentou valores abaixo de 0,11% considerando a flutuação das contagens e a atividade da fonte.

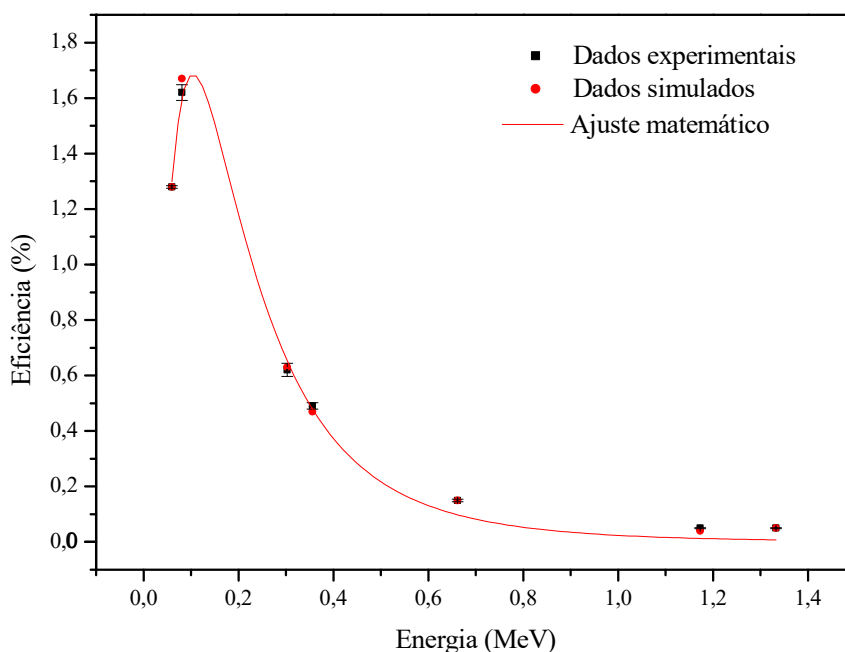


Figura 20: Curva de eficiência obtida por modelagem matemática e validada experimentalmente.

Os coeficientes da *Equação 24* foram obtidos pelo método dos mínimos quadrados e seus valores são apresentados na *Tabela 3*, sendo o coeficiente de regressão (R^2) igual a 0,997.

$$\varepsilon = x + y \cdot \ln(E) + z \cdot \ln(E)^2$$

Equação 24

Onde:

ε – eficiência (%);

E – energia (keV);

x, y, z – coeficientes de ajuste.

Tabela 3: Valores para os coeficientes de ajuste da curva de eficiência.

Coeficientes	Valores	Incerteza
x	-3,74	0,28
y	-3,76	0,33
z	-0,83	0,08

Os valores experimentais e os obtidos pela modelagem mostraram boa concordância e apresentaram erro relativo máximo de 5,64% para a energia de 80,998 keV do ^{133}Ba indicando que o modelo do detector foi bem desenvolvido.

A resolução de energia do detector foi determinada pela medida da largura total à meia altura (FWHM) na energia do fotopico de cada fonte de radiação apresentada na *Tabela 1*. Na *Figura 21* é apresentada a curva FWHM em função da energia que foi calculada pela *Equação 17*, descrita na seção 3.2.2, a fim de obter os parâmetros “a”, “b” e “c” a serem utilizados na função *Gaussian Energy Broadening* (GEB).

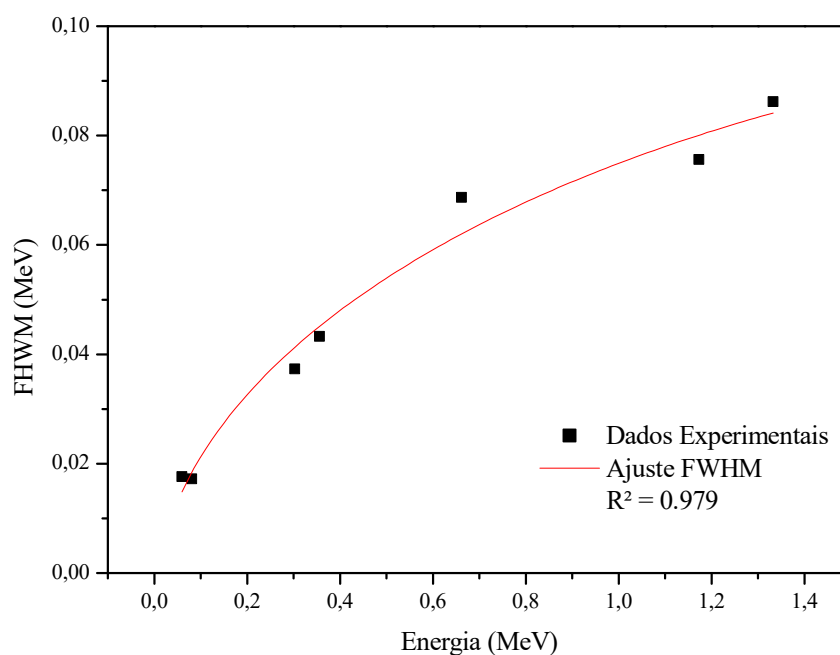


Figura 21: Curva de resposta FWHM em função da energia.

Com esses resultados, foi possível realizar o ajuste da função GEB, tornando o modelo matemático mais realista. Os valores dos coeficientes desta função são apresentados na *Tabela 4*.

Tabela 4: Valores dos coeficientes de ajuste da função GEB.

Coeficientes	Valores	Incerteza
a	-0,007	0,002
b	0,09	0,02
c	-0,18	0,04

A validação experimental quantitativa e qualitativa, após correção da eficiência e ajuste da resolução de energia do sistema de detecção simulado (cristal + fotomultiplicador) para as fontes de ^{241}Am e ^{137}Cs são mostradas na *Figura 22*.

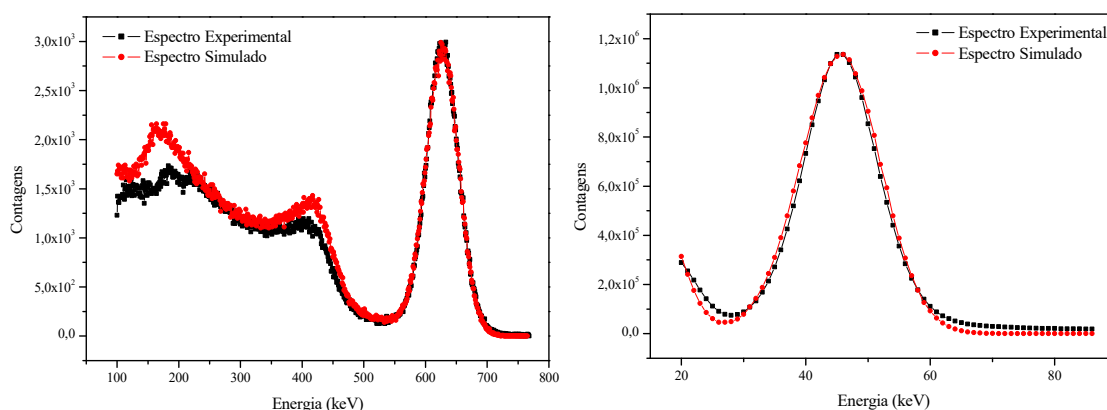


Figura 22: Comparação da forma dos espectros experimental e simulado no código para fonte de: a) Césio, b) Amerício.

Uma concordância aceitável pode ser observada na região do fotopico na DAP da fonte de amerício e de césio. No entanto, na faixa de baixa energia (região Compton) a DAP da fonte de césio apresenta alguma discrepância, o que é geralmente relatado na literatura como imprecisão na simulação de elétrons de baixa energia e pelo espalhamento dos fótons no suporte do detector que não foram considerados nas simulações (SALGADO *et al.*, 2012). É importante dizer que tanto o detector de transmissão, quanto o de espalhamento foram considerados iguais, logo esta modelagem foi usada para ambos.

4.2 – DESENVOLVIMENTO DOS MODELOS PARA RNA (FRAÇÃO DE VOLUME)

O estudo das frações de volume, descrito na seção 3.2.3, foi realizado para diferentes frações de volume de fluido de óleo iguais a 25, 50 e 75% em relação a

gasolina, as simulações foram feitas no sistema bifásico sob regime de fluxo estratificado. As DAPs obtidas pelo detector de transmissão (D1) são mostrados na *Figura 23*.

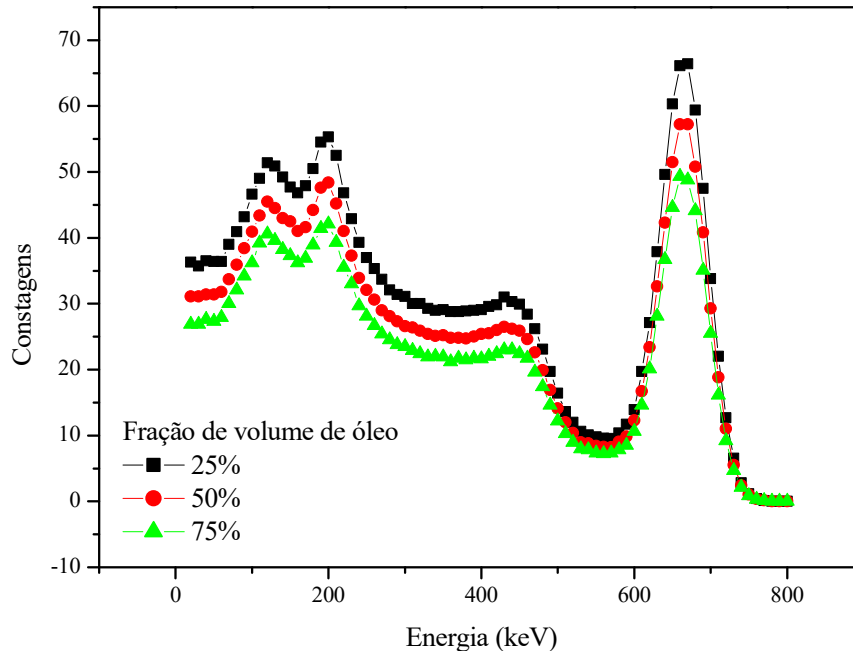


Figura 23: Espectros obtidos com a simulação de gasolina e óleo.

O cálculo da fração de volume, realizada pelas *Equações 12* e 19, foi realizado a partir da integral referente à área da região fotoelétrica obtida pelo detector de transmissão (D1) a partir dos modelos desenvolvidos no código MCNP6. Este procedimento foi adotado, visto que a região de absorção total de energia é bem caracterizada. Os resultados encontrados por ambas as equações foram comparados com os valores teóricos (reais) e podem ser visualizados na *Tabela 5*.

Tabela 5: Comparação dos resultados obtidos pela solução analítica e código MCNP6.

FVF Real de Gasolina (%)	Duto Quadrado		Duto Cilíndrico	
	FVF (%)	ER (%)	FVF (%)	ER (%)
25,00	29,70	18,80	24,87	0,52
50,00	49,92	0,16	49,87	0,26
75,00	69,85	6,86	74,56	0,59

O erro relativo (ER) máximo para cada uma das medidas quando se utiliza a equação proposta (*Equação 19*) neste estudo está abaixo de 0,60%. Diferentemente

disto, quando se considera a equação normalmente utilizada pela literatura (*Equações 12 e 13*) o ER máximo é de 18,80%. Pode-se notar, também, que os limites superior e inferior os erros absolutos são bem altos, enquanto que em 50% o erro é praticamente desprezível. Isso está concordante com a teoria, visto que neste caso o diâmetro de uma seção cilíndrica coincide exatamente com o lado de uma tubulação com uma seção reta quadrada. A partir destes resultados, foi possível gerar um conjunto de dados para treinamento da rede por meio da *Equação 19*.

Importante mencionar que o sistema de detecção simulado proposto neste estudo foi validado com uma configuração experimental para o feixe transmitido proposto em trabalho anterior (SALGADO *et al.*, 2020).

4.3 – PREDIÇÃO DO NÍVEL DE PUREZA

4.3.1 – POTENCIALIDADE DAS FERRAMENTAS UTILIZADAS

A primeira etapa neste estudo foi utilizar as simulações obtidas por meio do código MCNP6, que originou um total de 203 padrões, sendo escolhido aleatoriamente em subconjuntos de Treinamento com 143 padrões (70%), Teste com 40 padrões (20%) e Validação com 20 padrões (10%). Cada um dos subconjuntos de padrões foi escolhido e distribuído aleatoriamente por todo campo de busca, como pode ser observado na *Figura 24*.

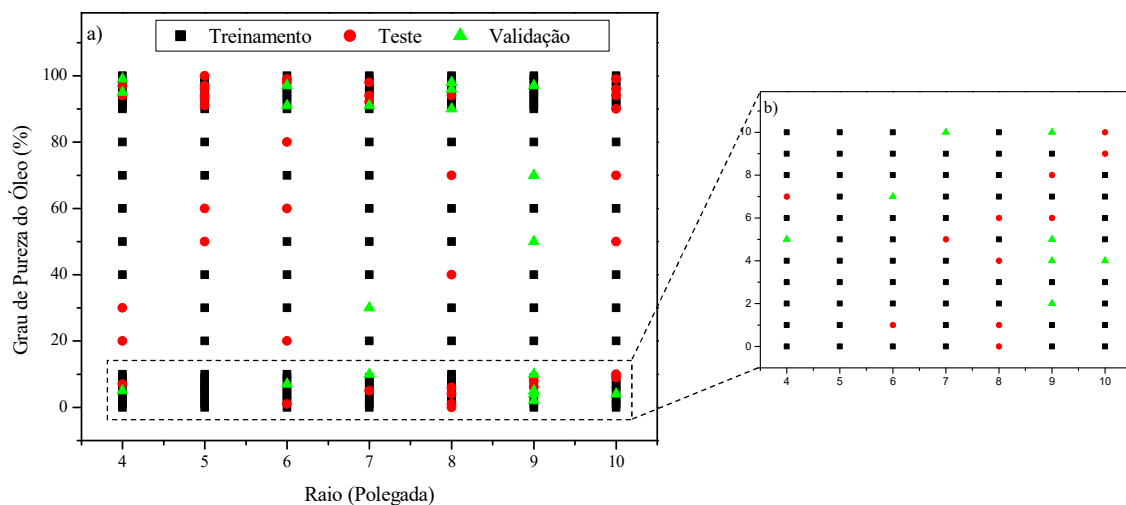


Figura 24: Conjunto de padrões: Treinamento, Teste e Produção: a) para todo os padrões; b) zoom na região de 0 a 10 %.

Por ilustração, os espectros transmitidos e espalhados obtidos pelos detectores de transmissão (D1) e de espalhamento (D2) para três distintos níveis de pureza de gasolina em uma tubulação de 8 polegadas de raio são apresentados na *Figura 25*. Os espectros foram classificados na faixa de energia de 20 a 800 keV, em canais de 10 keV cada.

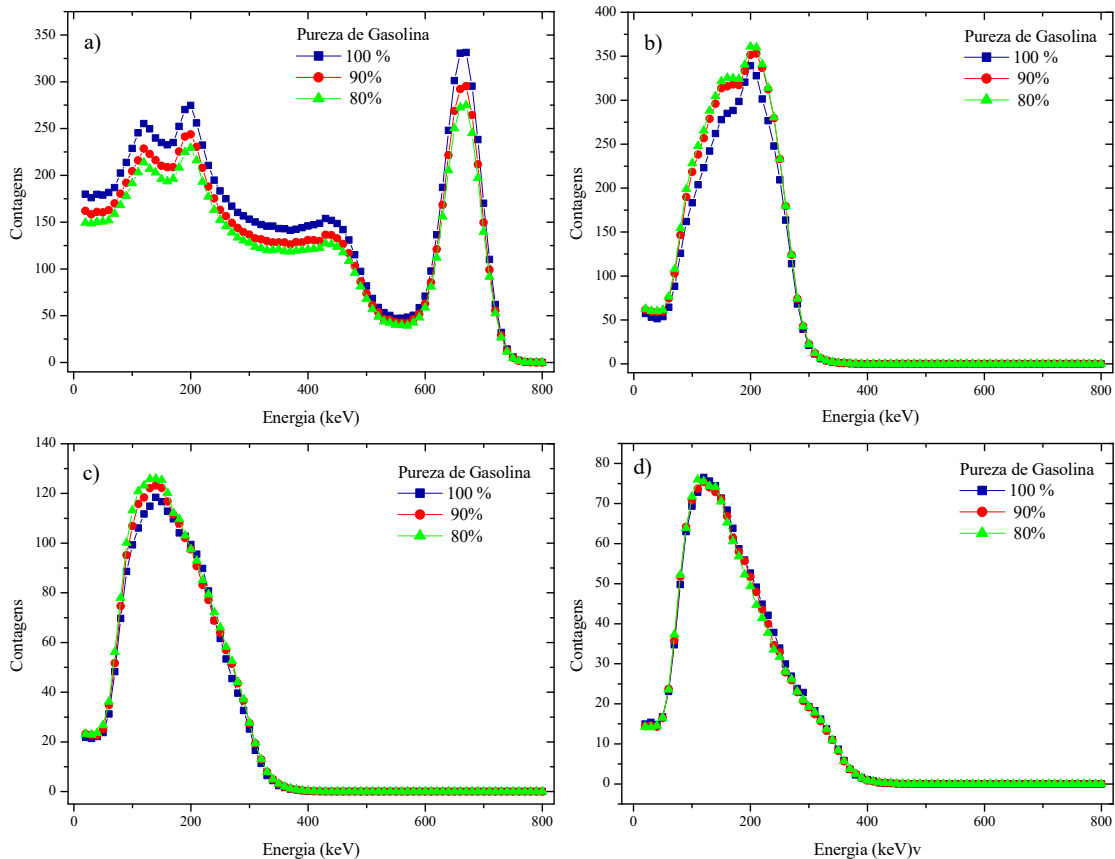


Figura 25: Espectros obtidos pelo código MCNP6 para o detector: a) de transmissão (D1) de espalhamento: b) D2 em 15°; c) D2 em 30° e d) D2 em 45°.

Os parâmetros de aprendizagem da rede neural artificial foram obtidos empiricamente observando-se o maior valor do coeficiente de regressão, o MRE e RMSE e o maior percentual de acertos numa faixa de erros de até 10% na resposta da RNA1. A posição do detector D2 que obteve a melhor resposta da RNA1 foi a 15° em relação a fonte. Os parâmetros que apresentaram a melhor resposta são apresentados na *Tabela 6*.

Tabela 6: Parâmetros de treinamento da RNA1.

Parâmetros	Entrada	Camadas Intermediárias			Saída
Função Ativação	Linear [-1,1]	Gaussiana	Gaussiana	Tan	Logística
Neurônios	119	24	24	24	1

As correlações entre os níveis de pureza reais e os preditos pela RNA1 para os padrões de Treinamento são apresentadas na *Figura 26*.

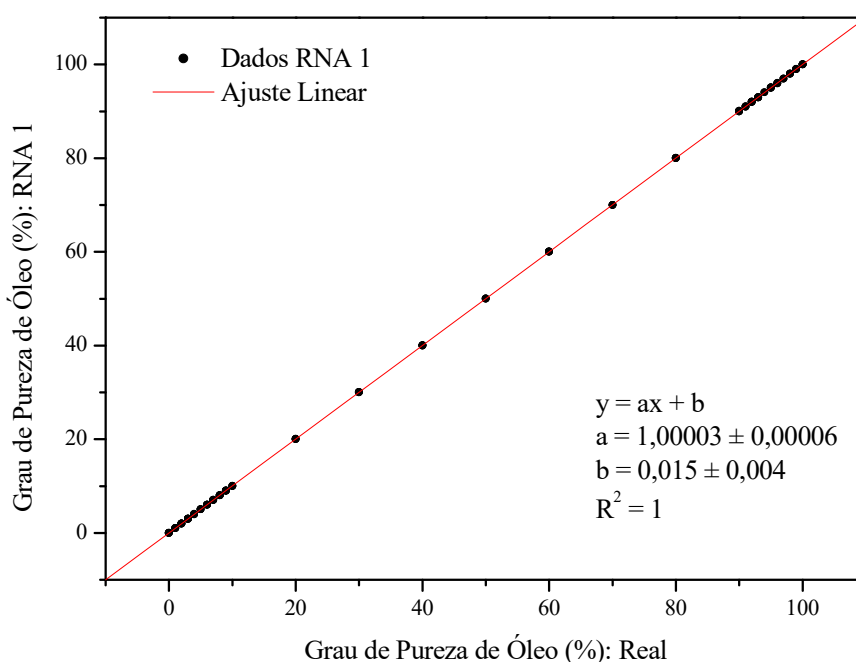


Figura 26: Correlação entre resultados da RNA1 e dados reais para os padrões de Treinamento.

Foi ajustada uma função polinomial de primeiro nível utilizando o método dos mínimos quadrados, que forneceu um coeficiente de regressão igual a 1. Os resultados indicam aceitável qualidade do treinamento da RNA1 e, por conseguinte a possibilidade de utilização desta técnica na predição do nível de pureza de produtos sob regime estratificado. A resposta da RNA1 para o subconjunto de Teste é mostrada na *Figura 27*.

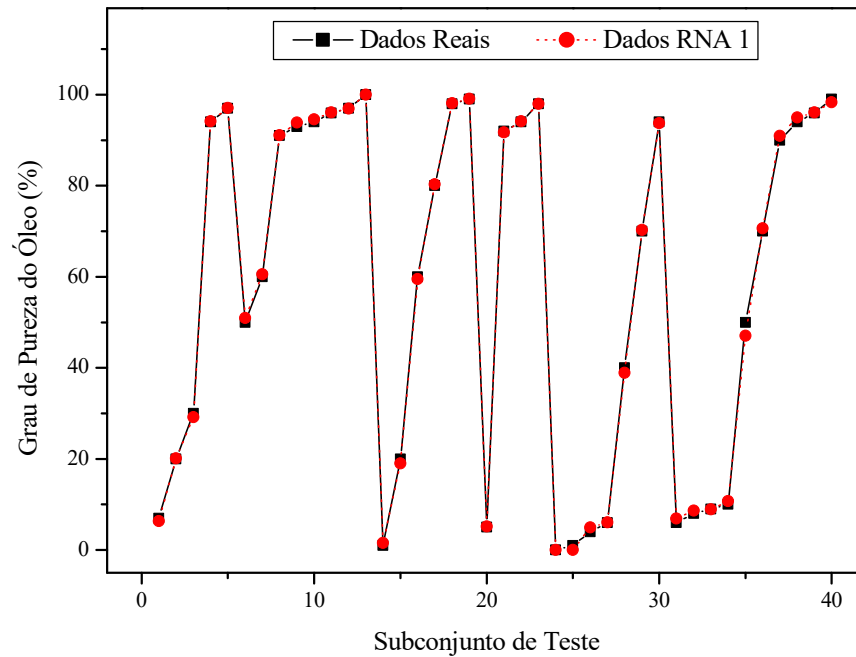


Figura 27: Resultados obtidos pela RNA1 para o nível de pureza do subconjunto de teste.

A partir deste resultado, foi possível inferir que os valores preditos pela RNA1 utilizando o modelo proposto apresentam uma excelente concordância com os valores reais, o que indica uma capacidade de generalização da rede.

Uma análise final foi realizada testando a rede com 20 dados não “vistos” pela rede na fase de treinamento. As respostas da RNA1 para o subconjunto de Validação são apresentadas na *Tabela 7*.

Tabela 7: Predição da RNA1 para o conjunto de Validação

Padrão	Pureza de Óleo (%)		Erro Relativo (%)	Padrão	Pureza de Óleo (%)		Erro Relativo (%)
	Real	RNA			Real	RNA	
1	5	5,19	-3,83	11	96	96,16	-0,17
2	95	95,31	-0,33	12	98	98,37	-0,38
3	99	99,49	-0,49	13	2	1,62	18,91
4	7	7,20	-2,82	14	4	4,48	-12,03
5	91	91,08	-0,09	15	5	4,86	2,78
6	97	96,38	0,64	16	10	9,98	0,19
7	10	9,93	0,67	17	50	50,14	-0,29
8	30	30,92	-3,06	18	70	71,10	-1,57
9	91	91,50	-0,55	19	97	96,56	0,45
10	90	89,84	0,18	20	4	4,13	-3,37

Diante destes resultados aceitáveis, exceto para o padrão 13, confirma-se a boa qualidade do treinamento realizado, especialmente para padrões não utilizados durante o processo de aprendizagem da RNA1. O alto valor do erro no padrão 13 pode ser causado pela métrica utilizada, pois o erro relativo é alto para medidas de baixo valor, mesmo com uma diferença absoluta pequena.

Por isso, foram utilizadas outras métricas de erro (MRE e RMSE) para cada subconjunto de dados (TRT, TST, VAL) utilizados na predição da RNA1 e seus resultados são apresentados na *Tabela 8*.

Tabela 8: Análise da predição da RNA1 usando parâmetros estatísticos.

Métricas	Padrões			
	Total	Treinamento	Teste	Validação
	203	143	40	20
MRE (%)	1,68	0,20	6,24	3,10
RMSE	0,367	0,035	0,733	0,535

Os resultados apresentados pela RNA1 foram classificados em faixas de erros e são apresentados na *Tabela 9*. Pode-se observar que erros menores que 5% e 10% foram obtidos para mais de 88% e 93% dos casos, respectivamente. O coeficiente regressão (R^2) apresenta um excelente valor indicando que dos dados preditos estão corretos.

Tabela 9: Classificação de faixa de erros para a predição da RNA1.

Faixa de Erro	Padrões (%)
< 5 %	90,64
5 – 10 %	2,96
10 – 20 %	1,48
20 – 30 %	0,49
> 30 %	0,98

É importante mencionar que estes resultados demonstram que a metodologia proposta é capaz de prever as quantidades de fluidos com 10% de erro para mais de 93% dos padrões utilizados nesta investigação. E que o valor do coeficiente de regressão obtido representa que a predição da rede tem resultados muito próximos aos dados reais, principalmente no início e no final da escala. Isso é muito importante pois são os limites que devem ser monitorados e que de fato representaria a presença de impurezas. A título de exemplo, a resposta da RNA 1 para uma tubulação de raio 8

polegadas é apresentada na *Figura 28*. É feita uma comparação entre os dados reais obtidos pelo MCNP6 e os dados obtidos pela predição da rede neural. Pode-se notar que esta curva possui dados de aprendizagem (pontos em verde e em vermelho) usados na fase de treinamento da rede e três padrões do subconjunto de Validação que compõem a curva com excelente concordância. Desta forma, a rede neural foi capaz de prever a pureza do fluido e identificar a região de interface de forma satisfatória.

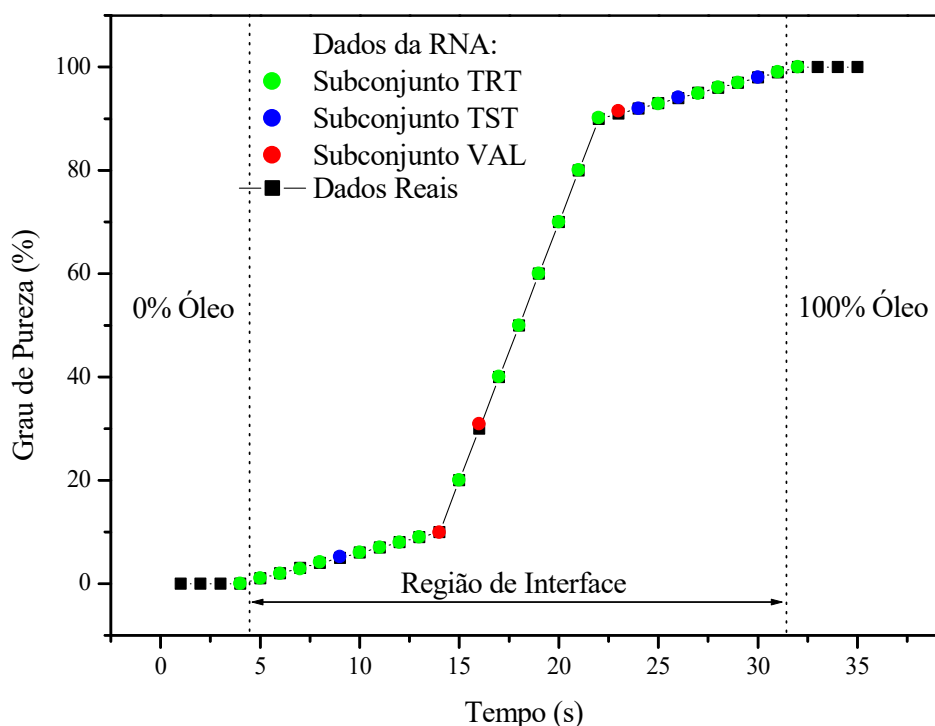


Figura 28: Curva representativa da região de interface.

Pode-se observar que a região da interface se inicia quando há uma variação na medição da densidade do primeiro fluido (óleo), obtida pelos detectores, e quando sua resposta tende a se tornar constante e igual à densidade do segundo fluido (gasolina), é atingido o fim da região da interface. Importante destacar que os valores repetidos de 0 e 100 % de pureza de óleo e gasolina foram inseridos no gráfico apenas para representar uma leitura constante dos detectores indicando que apenas determinado produto está sendo transportado. Observando estes resultados pode-se inferir que a rede conseguiu prever a curva da região de interface de forma satisfatória.

Cada ponto nesta curva representa diferentes níveis de pureza de óleo e observou-se que é possível determinar a região da interface com boa precisão por meio da RNA1, uma vez que a metodologia permite a identificar níveis de pureza de até 99%.

4.3.2 – RESULTADO PARA A GENERALIZAÇÃO DO MODELO

Para a obtenção do conjunto de dados para treinamento e avaliação da RNA 2 foram elaborados modelos representativos do regime de fluxo estratificado com as combinações de purezas entre os fluidos (Gas–Ker, Gas–Oil, Gas–Gly, Ker–Gly, Ker–Oil, Oil–Gly). Após isso, realizou-se a simulação matemática do transporte da radiação gama usando o código MCNP6.

Os parâmetros de aprendizagem da rede foram obtidos empiricamente observando-se o maior valor do coeficiente de regressão, MRE e o maior percentual de acertos numa faixa de erros relativos de até 5%. As funções de ativação que apresentaram a melhor resposta da rede foram: *Linear*, *Gaussian*, *Tanh*, *Gaussian Complementar* e *Logistic* para as camadas de entrada, as três ocultas e a de saída, respectivamente.

As correlações entre os níveis de pureza reais e os preditos pela RNA 2 para os padrões de Treinamento e Teste são apresentadas na [Figura 29](#).

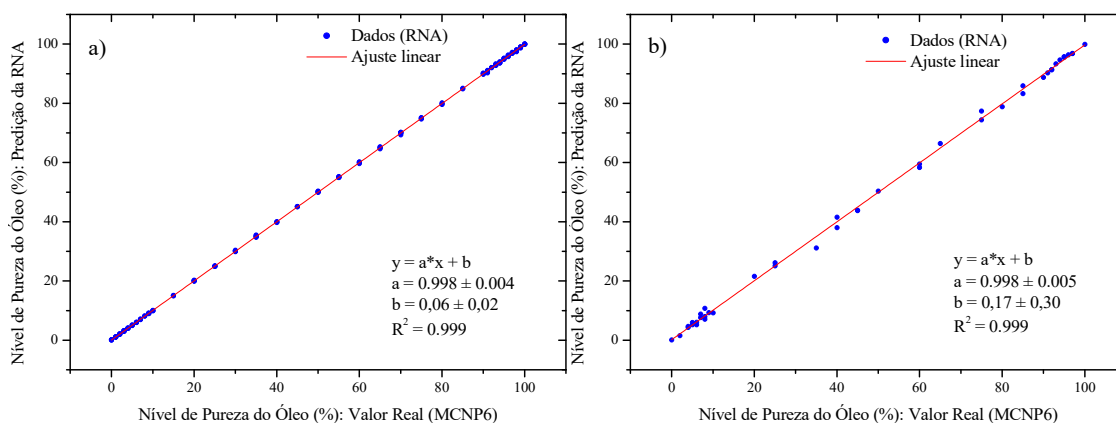


Figura 29: Correlação entre resultados da RNA 2 e padrões reais considerando os subconjuntos: a) Treinamento; b) Teste.

Foram ajustadas funções polinomiais de primeiro grau utilizando o método dos mínimos quadrados, que forneceu um coeficiente de regressão (R^2) igual a 0.9999 e 0.9989 para o subconjunto de Treinamento e Teste, respectivamente. A partir destes resultados, foi possível inferir que os valores preditos pela RNA 2 utilizando o modelo proposto apresentam uma boa concordância com os valores reais, o que indica uma capacidade de generalização da rede.

Uma avaliação do treinamento da rede foi realizada com o subconjunto de Validação que apresentou como respostas valores muito próximo aos reais, exceto o caso 3 que apresenta 2.97 de erro absoluto, conforme apresentado na *Tabela 10*.

Tabela 10: Predição da RNA 2 para o conjunto de Validação.

Padrões	Nível de Pureza (%)		Erro Absoluto
	Real	RNA 2	
1	0	0.10	-0.10
2	7	6.44	0.56
3	15	12.03	2.97
4	40	38.83	1.17
5	80	79.83	0.17
6	85	83.43	1.57
7	5	4.18	0.82
8	10	10.26	-0.26
9	15	16.54	-1.54
10	65	63.91	1.09
11	92	92.79	-0.79
12	93	93.71	-0.71
13	96	96.01	-0.01
14	8	8.18	-0.18
15	1	0.00	1.00
16	90	88.32	1.68
17	10	8.38	1.62
18	55	55.93	-0.93
19	85	85.64	-0.64
20	99	99.03	-0.03
21	80	80.42	-0.42
22	92	91.78	0.22

Os erros absolutos para todos os padrões presentes nos subconjuntos TRT, TST e VAL utilizados nesta investigação são apresentados na *Figura 30*. Pode se notar que a grande maioria dos padrões possuem valores de erro absoluto com uma margem de ± 1 , o que significa que os padrões foram preditos com boa precisão e se aproximam dos valores verdadeiros.

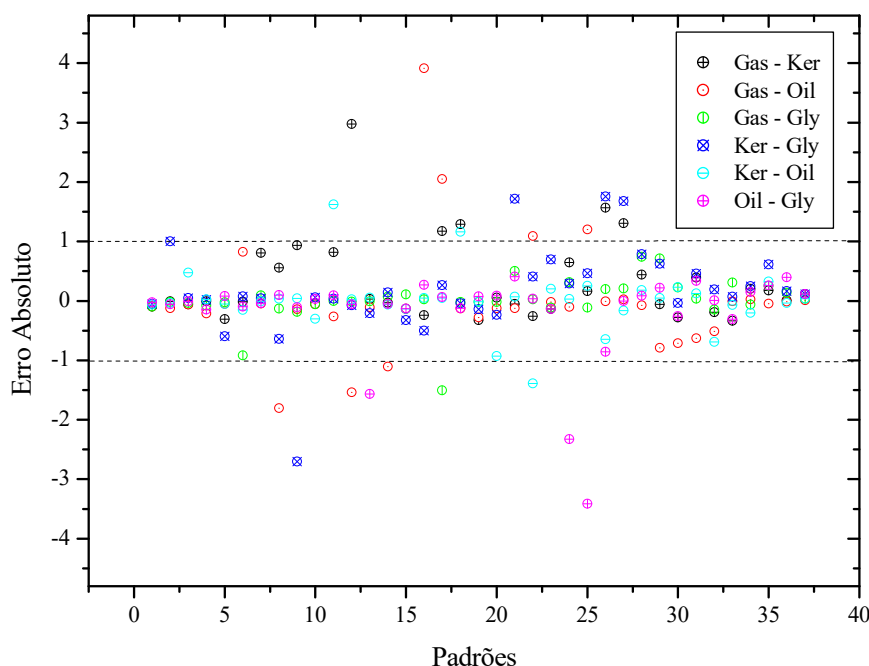


Figura 30: Erros absolutos de todos os padrões para cada par de fluidos.

Estes resultados indicam uma aceitável qualidade do treinamento da RNA 2 e, por conseguinte a possibilidade de utilização desta técnica na predição do nível de pureza de produtos de petróleo sob o regime estratificado.

Outras métricas de erro (MAE, MSE, RMSE e MRE) também foram usadas para avaliar o comportamento da resposta da rede para cada subconjunto de padrões utilizados (TRT, TST, VAL) e seus resultados são apresentados na *Tabela 11*.

Tabela 11: Análise da predição da RNA 2 usando parâmetros estatísticos.

	Total	TRT	TST	VAL
*n	222	156	44	22
MAE	0,371	0,132	0,915	0,977
MSE	0,485	0,036	1,458	1,725
RMSE	0,697	0,190	1,207	1,313
MRE (%)	2,40	0,68	5,32	8,77

*n: número de padrões

Pode-se notar que os valores de MAE, MSE e RMSE estão na mesma ordem de grandeza para todos os padrões e isso significa que a maioria dos padrões apresentam erros pequenos. Além disso, os resultados apresentados pela rede MLP foram classificados em faixas de erros e são apresentados na *Tabela 12*. Pode-se observar que erros relativos menores que 5% foram obtidos para mais de 87% dos padrões e coeficientes de regressão (R^2) de 0.9997 indicando excelente predição da rede.

Tabela 12: Classificação de faixa de erros para a predição da RNA 2.

Faixa de Erro Relativo	Padrões (%)
< 5 %	87,39
5 – 10 %	3,60
10 – 20 %	4,50
20 – 30 %	0,90
> 30 %	0,90

Em relação a segunda saída da RNA 2, vale destacar que a rede apresentou 100% de acertos na classificação do Indicador de pureza do fluido, indicando purezas de até 99%. Na *Figura 31*, é apresentada a resposta do indicador de pureza dos fluidos da RNA 2 para o subconjunto de Validação.

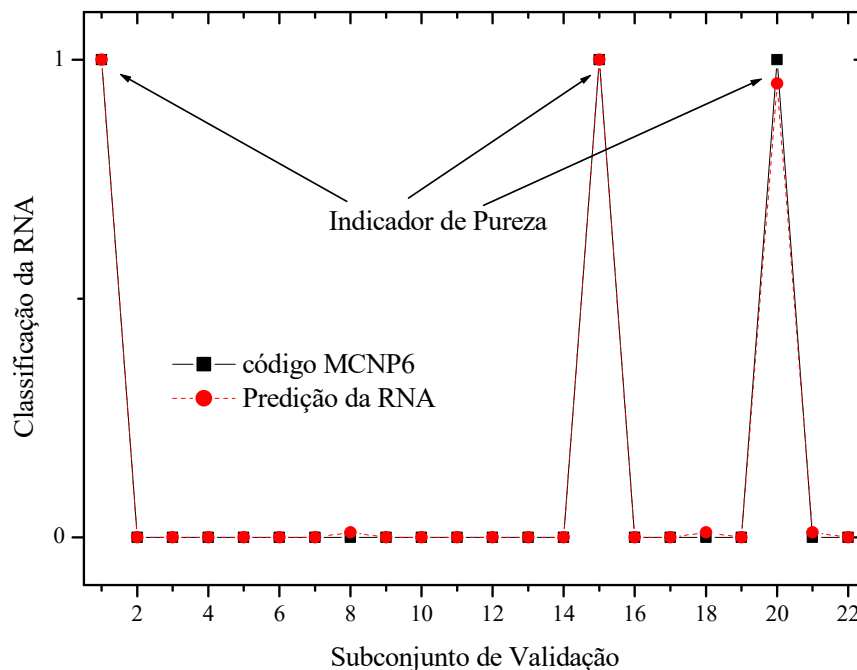


Figura 31: Resposta do indicador de pureza da RNA 2 para o subconjunto de Validação

Diante destes resultados aceitáveis confirma-se a boa qualidade do treinamento realizado, especialmente para os padrões não utilizados durante o processo de aprendizagem da RNA 2. Desta forma, é possível determinar a região da interface com boa precisão por meio de uma rede neural. Além disso, observando os resultados é possível inferir que o modelo proposto é capaz de operar com diversas combinações de fluido se aproximando às condições reais.

4.3.3 – RESULTADO DO APERFEIÇOAMENTO DO MODELO

De posse do conjunto de dados para treinamento e avaliação da rede. Foram testados diferentes números de camadas ocultas, diferentes números de neurônios em cada camada e diferentes funções de ativação. A melhor estrutura para a RNA 3 possui três camadas intermediárias todas com 58 neurônios. Na primeira camada foi utilizada a função de ativação “*Gaussian*”, na segunda “*Tanh15*” e na terceira camada oculta a função de ativação foi “*Gaussian Comp*”. Já a camada de entrada possui 118 neurônios a função de ativação foi “*Linear*” e a saída possui 6 neurônios e função “*Logistic*”.

A precisão média das predições da RNA 3 para os 6 conjuntos de dados é de 95,9%, de uma forma geral todos as combinações de fluidos parecem ser facilmente identificadas com destaque positivo para Gas-Ker que acertou todos os casos, como pode ser visualizado na *Figura 32*.

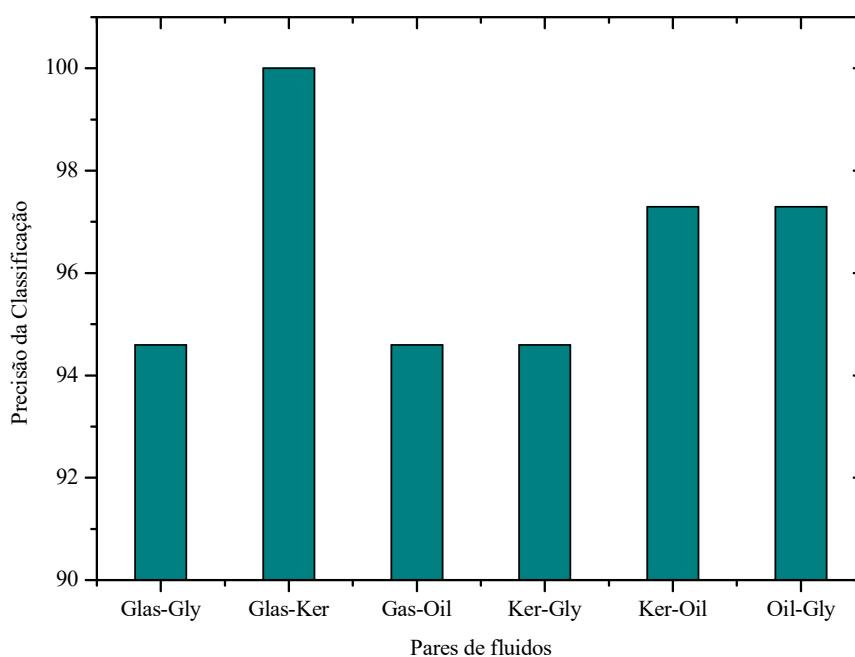


Figura 32: Precisão da predição para cada par de fluidos.

O desempenho da rede foi avaliado usando a precisão de identificação (*ACC*) que é definida pela *Equação 25*.

$$ACC = \frac{TP}{TP + FN}$$

Equação 25

Onde:

TP – número de identificação positiva;

FN – número de identificação negativa.

Vale notar que o valor de saída da RNA 3 é um vetor de 6 dimensões $\vec{P}(P_1, P_2, P_3, P_4, P_5, P_6)$. Cada elemento do vetor é um número real, variando entre 0-1, indicando a possibilidade de existência de cada par de fluidos presentes na região de interface. Os resultados da previsão qualitativa (que se prevê se os fluidos existem) são obtidos ao encontrar o índice do valor máximo deste vetor. A [Tabela 13](#) ilustra uma matriz de confusão de todos os 37 conjuntos de dados para cada par de fluidos.

Tabela 13: Matriz de Confusão para cada par de fluido.

Pares de fluidos		Predição da RNA 3					
		Gas–Gly	Gas–Ker	Gas–Oil	Ker–Gly	Ker–Oil	Oil–Gly
Real	Gas–Gly	33	1	0	2	0	1
	Gas–Ker	0	37	0	0	0	0
	Gas–Oil	0	1	35	0	1	0
	Ker–Gly	0	0	0	36	0	1
	Ker–Oil	0	0	0	1	36	0
	Oil–Gly	0	0	0	1	0	36

Neste momento, conforme mencionado no item 3.2.6 foi realizado uma conexão da rede RNA 3 com a RNA 4, onde resposta da RNA 3 foi inserida como dados de entrada na RNA 4. O diagrama de regressão de dados reais definidos nas simulações e dados estimados usando o modelo MLP proposto proporcionou os resultados descritos na [Tabela 14](#). Pode-se notar que os erros relativos menores que 5% foram obtidos para mais de 94% dos padrões investigados.

Tabela 14: Classificação de faixa de erros para a predição da RNA 4.

Faixa de Erro Relativo	Padrões (%)
< 5 %	94.60
5 – 10 %	2.25
10 – 20 %	0
20 – 30 %	0
> 30 %	0.45

Também foram utilizadas as métricas de erro MAE, MSE, RMSE e MRE para avaliar o desempenho do modelo desenvolvido e seus resultados estão indicados na *Tabela 15*. O coeficiente de regressão para todos os padrões apresentou valor máximo.

Tabela 15: Métricas matemáticas para avaliação da predição da rede RNA 4.

Saída da rede	MRE (%)				RMSE			
	Total	TRT	TST	VAL	Total	TRT	TST	VAL
Pureza do fluido	1,12	0,51	1,64	4,41	0,204	0,133	0,304	0,332

Pode se notar, de posse de todos os resultados que a predição apresenta resultados praticamente iguais aos pré-estabelecidos, ou seja, a rede se ajustou perfeitamente a função a ela fornecida e conseguiu predizer os percentuais dos fluidos com altíssima precisão. Além disso, este procedimento melhorou os resultados de 87,39% (pior caso) para 94,60%, representando uma melhora em 7,62%.

CAPÍTULO 5

5 – CONCLUSÕES

O código MCNP6 apresentou sua potencialidade e mostrou-se de grande importância na elaboração da geometria de medição, permitindo dar confiabilidade à metodologia de identificação da região de interface em sistemas bifásicos no regime de escoamento estratificado bifásico gasolina-óleo, tornando o modelo eficaz visto que os resultados apresentam erro relativo médio de 2,22% para todos os padrões utilizados na RNA. Além disso, a utilização do código evita a necessidade de construir modelos práticos representativos da geometria em estudo (secção de testes) na fase inicial de um projeto.

O modelo matemático do detector de NaI(Tl) desenvolvido no código considerou as curvas-resposta de um detector de cintilação real (eficiência de contagem e resolução em energia), o que torna o modelo bem mais realístico. É importante mencionar que este procedimento de caracterização deve ser realizado para cada detector a ser utilizado.

Os resultados das frações de volume do regime de fluxo estratificado obtidos pela equação desenvolvida neste trabalho apresentaram erro relativo máximo de 0,59% para as três frações de volume analisadas (25%, 50% e 75%) demonstrando boa convergência com os valores teóricos. A partir disto, foi possível gerar 203 padrões para treinamento e validação da rede neural artificial.

A utilização das técnicas de atenuação e espalhamento de radiação gama, por meio do método de Monte Carlo e redes neurais artificiais permitiu o desenvolvimento de uma metodologia capaz de identificar a região de interface no transporte de produtos em polidutos com pureza de até 99% demonstrando convergência expressiva da RNA1. Além disso, o modelo possui boa capacidade de generalização, visto que os dados do subconjunto de Teste foram também preditos de forma satisfatória apresentando RME e RMSE iguais a 7,27% e 0,999, respectivamente. Confirmando que o treinamento foi adequado e que a rede pode ser utilizada no modo de operação, visto que o RME para o subconjunto de Validação apresentou um valor de 2,64%. Mais de 88% de todos os padrões investigados apresentaram erros relativos de até 5%.

Os resultados para a RNA 2 mostraram que mais de 87% de todos os padrões investigados apresentaram erros relativos de até 5%. Além disso, o MRE apresenta

valores de 5,32% e RMSE 1,207 para os padrões do subconjunto de Testes, enquanto para o conjunto de Validação o erro foi de 8,77%. Os valores de MAD, MSE e RMSE estão na mesma ordem de grandeza para todos os padrões o que demonstra que a grande maioria dos padrões apresentaram erros pequenos. Vale destacar que a rede neural proposta foi capaz de prever o nível de pureza independentemente das diversas combinações de fluidos transportados.

O sistema de monitoramento inteligente proposto formado pelas RNA 3 e RNA 4 foi capaz de medir e aumentar a precisão dos níveis de pureza dos fluidos investigados a partir da identificação dos fluidos. Considerando a classificação dos fluidos (RNA 3) a precisão média na identificação dos pares de fluidos foi maior que 96,4%. Com base neste índice de acertos, a RNA 4 alcançou uma melhoria nos resultados de 7,62% em relação metodologia utilizando a RNA 2, demonstrando que o procedimento de identificação dos fluidos para posterior previsão do nível de pureza foi a melhor escolha.

De forma geral, os resultados são encorajadores e indicam que a metodologia proposta é promissora e adequada para a solução do transporte de fluidos em polidutos, normalmente, encontrados na indústria petrolífera. É possível desenvolver um dispositivo real compacto com alta velocidade e precisão no tratamento das informações. A partir destes resultados, é possível continuar os estudos e como etapas restantes para continuação deste trabalho ficam as seguintes propostas a se destacar:

- Estudar outros regimes de fluxo;
- Validar experimentalmente a metodologia em seções de teste reais estáticas;
- Desenvolver uma rede neural artificial profunda (*Deep Learning*).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABDULRAHMAN, A.A., SHOKIR, E.M., 2011. “Artificial neural networks modeling for hydrocarbon gas viscosity and density estimation”, *Journal of King Saud University - Engineering Sciences*, Vol. 23, pp. 123-129.

ABOUELWABA, M.S.A., KENDALL, E.J.M., 1980. “The measurement of component ratios in multiphase systems using gamma-ray attenuation”, *Journal of Physics E: Scientific Instruments*, Vol. 13, pp. 341-345.

HASSAN, A.M., ALRASHDAN, A., HAYAJNEH, M.T., MAYYAS, A.T., 2009. “Prediction of density, porosity and hardness in aluminum–copper-based composite materials using artificial neural network”, *Journal of materials processing technology*, Vol. 209, pp. 894-899.

AFFONSO, R.R.W., DAM R.S.F., SALGADO, W.L., SILVA, A.X., SALGADO C.M., 2020. “Flow regime and volume fraction identification using nuclear techniques, artificial neural networks and computational fluid dynamics”, *Applied Radiation and Isotopes*, Vol 159, 109103.

AUSTIN, J.E., PALFREY, J.R., 1964. “Mixing of miscible but dissimilar liquids in serial flow in pipelines”, *Proceeding of Institution of Mechanical Engineers*, Vol. 178, pp. 377-395.

BEALE, R., JACKSON T., 1990. *Neural Computing: an introduction*. York, UK. Institute of Physics Publishing.

BERGER, M.J. e SELTZER, S.M., 1972. “Response functions for sodium iodide scintillation detectors”, *Nuclear Instruments. Methods*, Vol. 104, pp. 317-332.

BIRGE, E.A., 1947. “Contamination control in products pipelines”, *Oil and Gas Journal*, Vol. 46, pp. 176.

BISHOP, C.M., JAMES, G.D., 1993. “Analysis of multiphase flows using dual-energy gamma densitometry and neural networks”, *Nuclear Instruments and Methods, A*, Vol. 327, pp. 580-593.

- CAFARO, D.C., CERDÁ, J., 2007. “Dynamic scheduling of multiproduct pipelines with multiple delivery due dates”, *Computers and Chemical Engineering*, pp. 728-753.
- CARVALHO, H.P., MEDEIROS, J.L., ARAÚJO, O.D., 2003. “Modelagem Maxwell-Stefan para Predição de Propriedades e Volume de Mistura na Região de Interface de Bateladas em Sistemas Polidutos”, *Boletim Técnico da Petrobras*, pp. 78-133
- CHIKWENDU, S.C., OJIAKOR, G.U., 1985. “Slow-zone model for longitudinal dispersion in two-dimensional shear flows”, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 152, pp. 15-38
- CHUONG, H.D., HAI YEN, N.T., MY LE, N.T. TAM, H.D., 2020. “Determining the density of liquid using gamma scattering method”, *Applied Radiation and Isotopes*, Vol. 163, 109197.
- CONTI, C.C., SACHET, I.A., BERTELLI, L., LOPES, R.T., 1999. “Ge detectors calibration procedure at IRD/CNEN for in situ measurements”, in *II International symposium on technologically enhanced natural radiation*, Rio de Janeiro.
- CYBENKO, G., 1989. “Approximation by Superposition of a Sigmoidal Function”, *Mathematics of Control Signals and Systems*, Vol. 2, pp. 303-314.
- DANCKWERTS, P.V., 1953. “Continuous flow systems - distribution of residence times”, *Chemical Engineering Science*, pp. 1-13.
- DEBERTIN, K., HELMER, R.G., 1988. “Gamma- and X-ray Spectrometry with Semiconductor Detectors”. North-Holland, Amsterdam.
- EL ABD, A., 2014. “Intercomparison of gamma ray scattering and transmission techniques for gas volume fraction measurements in two phase pipe flow”, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, Vol. 735, pp. 260-266.
- EWA, I.O.B., BODIZS, D., CZIFRUS, S.Z., MOLNAR, Z.S., 2001, “Monte Carlo determination of full energy peak efficiency for a HPGe detector”, *Nuclear Instruments and methods in Physics Research*, Vol. 479, pp. 618-630.

- FARIAS, M.S., LACERDA, F., PINHEIRO, M.A.A., SALGADO, C.M., CARVALHO, P.V.R., 2019. "Increase of the data acquisition system resolution based on implementation of multi-rate interpolating algorithm", *International Nuclear Atlantic Conference - INAC 2019*, Santos, SP, Brazil, October 21-25.
- FOWLER F.C, BROWN G.G., 1943. "Contamination by successive flow in pipe lines", *Am. Inst. Chem. Eng.*, Vol. 39, pp.491-516.
- FREIRE, J.L.F., 2009. Engenharia de dutos. Rio de Janeiro: BMC.
- ROSHANI, G.H., FEGHHI, S.A.H., ADINEH-VAND, A., KHORSANDI, M., 2013. "Application of adaptive neuro-fuzzy inference system in prediction of fluid density for a gamma ray densitometer in petroleum products monitoring", *Measurement*, Vol. 46 pp. 3276-3281.
- GOMES, A.A., RACHID, F.B., ARAUJO, J.H., 2002. "Modeling of contamination in pipeline batch transfers", *Proceedings of the ENCIT*
- GOORLEY, T., JAMES, M., BOOTH, T., BROWN, F., BULL, J., COX, L.J., DURKEE, J., ELSON, J., FENSIN, M., FORSTER, R.A., HENDRICKS, J., HUGHES, H.G., JOHNS, R., KIEDROWSKI, B., MARTZ, R., MASHNIK, S., MCKINNEY, G., PELOWITZ, D., PRAEL, R., SWEEZY, J., WATERS, L., WILCOX, T., ZUKAITIS, T., 2016." Features of MCNP6", *Annals of Nuclear Energy*, Vol.87, pp. 772-783.
- HANUS R., ZYCH M., KUSY M., JASZCZUR M., PETRYKA L., 2018. "Identification of liquid-gas flow regime in a pipeline using gamma-ray absorption technique and computational intelligence methods", *Flow Measurement and Instrumentation*, Vol. 60, pp. 17-23.
- HAYKIN, S., 1994. "Neural Networks – A Comprehensive Foundation", *Macmillan College Publishing Company*.
- IAEA, 2017. "Data from the gamma calibrated radioactive sources were obtained on Isotope Browser app", version 5.15.74 Android, IAEA, Nuclear Data Section.
- JONES, W.M., PADDOCK, K.F., 1982. "Transport by pipeline", In: *Hobson, G.D., editor, Modern petroleum technology*, Nova Jersey: John Wiley & Sons.

KLEIN, O., AND NISHINA, Y., 1929. On the scattering of radiation by free electrons according to Dirac's new relativistic quantum dynamics*. “*Original in Z. Phys.”, Vol. 52, reproduced here with permission from Springer-Verlag. Translated from the German by Dr. Lars Bergström.

KOTCHETKOFF, A.P., 2009. “Estudo de tratamento de interface proveniente de polidutos”, *Dissertação de Mestrado (Dissertação em Engenharia Química) - UFU*, Uberlândia.

LANL, 2003, “MCNP - A general Monte Carlo n-particle transport code”, *Los Alamos National Laboratory*, version 5, I: Overview and theory, U.S.A.

LEIPUNSKI, O., NOVOZHILOV B., SAKHAROV V., 1965. “The propagation of gamma quanta in matter”. Vol. 6 (Oxford: Pergamon)

LEVENSPIEL, O., SMITH, W. K., 1957. “Notes on the diffusion-type model for the longitudinal mixing of fluids in flow”, *Chemical Engineering Science*, Vol. 50, pp. 3891-3896

KHORSANDI, M., FEGHHI, S.A.H., 2011. “Design and construction of a prototype gamma-ray densitometer for petroleum products monitoring applications”, *Measurement* Vol. 44, pp. 1512-1515.

KHORSANDI, M., FEGHHI, S.A.H., SALEHIZADEH, A., ROSHANI, G.H., 2013. “Developing a gamma ray fluid densitometer in petroleum products monitoring applications using Artificial Neural Network”, *Radiation Measurements*, Vol. 59, pp. 183-187.

MOOSAVI, M., SOLTANI, N., 2013. “Prediction of hydrocarbon densities using an artificial neural network-group contribution method up to high temperatures and pressures”, *Thermochimica Acta*, Vol. 556, pp. 89-96.

MAUCEC, M., DENIJS, I., 2009. “Development and calibration of a gamma-ray density meter for sediment-like materials”, *Applied Radiation and Isotopes*, Vol. 67, pp. 1829-1836.

- MCCONN JR., R.J., GESH, C.J., PAGH, R.T., RUCKER, R.A., WILLIAMS, R.G., 2011. “Compendium of Material Composition Data for Radiation Transport Modeling”, *Radiation portal monitor project*, Pacific Northwest, National Laboratory. PIET-43741-TM-963 PNNL-15870 Rev. 1.
- MI, Y., ISHII, M., TSOUKALAS, L. H., 1998. “Vertical two-phase flow identification using advanced instrumentation and neural networks”, *Nuclear Engineering and Design*, Vol. 184, pp. 409-420.
- MI, Y., TSOUKALAS, L. H. ISHII, M., 1997. “Application of multiple self-organizing neural networks: flow pattern classification”, *Trans. Am. Nucl. Soc.*, Vol. 77, pp. 114-116.
- MOHITPOUR M., SZABO J., HARADEVELD T. V., 2005. “Pipeline operations and maintenance”, *American Society of Mechanical Engineers*, New York.
- NAKAMURA, T., 1983, “Monte Carlo Calculation of Peak Efficiencies of Ge(Li) and Pure Ge Detectors to Volumial Sources and Comparison with Environmental Radioactivity Measurement”, *Nuclear Instruments and Methods*, Vol. 205, pp. 211-218.
- NAZEMI, E., ROSHANI, G.H., FEGHHI, S.A.H, GHOLIPOUR PEYVANDI, R., SETAYESHI, S., 2016. “Precise Void Fraction Measurement in Two-Phase Flows Independent of the Flow Regime using gamma-ray attenuation”, *Nuclear Engineering and Technology*, Vol. 48, pp. 64-71.
- ORION, I., WIELOPOLSKI, L., 2002. “Limitations in the PHOTON Monte Carlo gamma transport code”. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*. Vol. 480, pp. 729-733.
- PANI, R., LAITANO, R.F. PELLEGRINI, R., 1987. “Diagnostic X-ray Spectra Measurements Using a Silicon Surface Barrier Detector”, *Phys. Med. Biol.* Vol. 32, pp. 1135-1149.
- PATRACHARI, A.R., 2012. “Deterministic models to explain the phenomenon of interfacial mixing in refined products pipelines”, *Tese de Doutorado – Oklahoma State University*, Oklahoma.

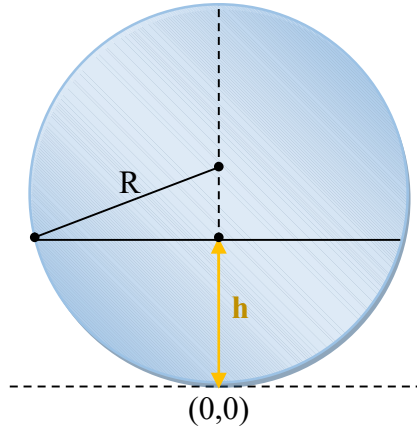
- PELOWITZ, D.B., 2005. "MCNP-X TM User's Manual, Version 2.5.0.", *Los Alamos National Laboratory report LA-CP-05-0369*, Apr. 2005.
- REBGETZ, M.D., WATT, J.S., ZASTAWNY, H.W., 1991. "Determination of the volume fractions of oil, water, gas by dual energy gamma-ray transmission", *Nuclear Geophysics – International Journal Radiation Applied Instruments*, Vol. 5, pp. 479-490.
- ROSHANI, G.H., NAZEMI, E., SHAMA, F., IMANI, M.A., MOHAMMADI, S., 2018. "Designing a simple radiometric system to predict void fraction percentage independent of flow pattern using radial basis function", *Metrology and Measurement Systems*, Vol. 25, pp. 347-358.
- RUMELHART, D.E., HINTON, G.E., WILLIAMS, R.J., 1986. "Learning internal representations by error propagation", In: *D. E. Rumelhart and J. L. McClelland, editors, Parallel Distributed Processing*, Vol. 1, MIT Press, Cambridge, MA.
- SAITO, K., MORIUCHI, S., 1981. "Monte Carlo Calculation of accurate response functions for a NaI(Tl) detector for gamma rays", *Nuclear Instruments and Methods*, Vol. 185, pp. 299-308.
- SALGADO, C.M., BRANDÃO, L.E.B., CONTI, C.C. e SALGADO, W.L., 2016. "Density prediction for petroleum and derivatives by gamma-ray attenuation and artificial neural networks", *Applied Radiation and Isotopes*, Vol. 116, pp.143-149.
- SALGADO, C.M., BRANDÃO, L.E., PEREIRA, C.M.N.A., RAMOS, R., SILVA, A.X., SCHIRRU, R., 2009. "Prediction of volume fractions in three-phase flows using nuclear technique and artificial neural network", *Applied Radiation and Isotopes*, Vol. 67, pp. 1812-1818.
- SALGADO, C.M., BRANDÃO, L.E., SCHIRRU, R., PEREIRA, C.M.N.A., CONTI, C. C., 2012. "Validation of a NaI(Tl) detector's model developed with MCNP-X code", *Progress in Nuclear Energy*, Vol. 59, pp. 19-25.
- SALGADO, C.M., PEREIRA, C.M.N.A., SHIRRU, R., BRANDÃO, L. E., 2010. "Flow regime identification and volume fraction prediction in multiphase flows by means of gamma-ray attenuation and artificial neural networks", *Progress in Nuclear Energy*, Vol. 52, pp. 555-562.

- SALGADO, C.M., DAM, R.S.F., SALGADO, W.L., WERNECK, R.R.A., PEREIRA, C.M.N.A., SCHIRRU, R., 2020b. “The comparison of different multilayer perceptron and General Regression Neural Networks for volume fraction prediction using MCNPX code”, *Applied Radiation and Isotopes*, Vol. 162, 109170.
- SALGADO, W.L., DAM, R.S.F., BARBOSA, C.M., SILVA, A.X., SALGADO, C.M., 2020a, “Monitoring system of oil by-products interface in pipelines using the gamma radiation attenuation”, *Applied Radiation and Isotopes*, Vol. 160, 109125.
- SEELENTAG, W.W., PANZER, W., 1979, “Stripping of X Ray Bremsstrahlung spectra up to 300 kVp on desk type computer”, *Phys. Med. Biol.*, Vol. 24, pp. 767-780.
- SHI, HU-XIA, CHEN, BO-XIAN, LI TI-ZHU e YUN, D. I., 2002. “Precise Monte Carlo simulation of gamma-ray response functions for an NaI(Tl) detector”, *Applied Radiation and Isotopes*, Vol. 57, pp. 517-524.
- SABZEVARI, S., MOOSAVI, M., 2014. “Density prediction of liquid alkali metals and their mixtures using an artificial neural network method over the whole liquid range”, *Fluid Phase Equilibria*, Vol. 361, pp. 135-142.
- SIMA, O., 1990, “Monte Carlo Simulation Versus Semiempirical Calculation of Autoabsorption Factors for Semiconductor Detector Calibration in Complex Geometries”; *Progress in Nuclear Energy*, Vol. 24, pp. 327-336.
- SMITH, S.S., e SULZE, R.K., 1948. “Interfacial mixing characteristics of products in products pipeline - part 1”, *The Petroleum Engineer*, Vol. 19, pp. 94-104.
- SMITH, S.S., e SULZE, R.K., 1948. “Interfacial mixing characteristics of products in products pipeline - part 2”, *The Petroleum Engineer*, Vol. 20, pp. 330-337.
- SOUZA, T.C., 2015. “Distribuição de derivados de petróleo por redes de polidutos: uma abordagem através de algoritmos evolucionários híbridos para um problema triobjetivo”, *Tese Doutorado (Tese em Ciência da Computação) - UFRN*, Rio Grande do Norte.

- TAUHATA, L., SALATI, I.P.A., DI PRINZIO, R., DI RINZIO, M.A.R.R., 2013. “Radioproteção e Dosimetria: Fundamentos - 9ª revisão novembro/2013” - Rio de Janeiro - IRD/CNEN. 345p.
- TAYLOR, G.I., 1954. “The dispersion of matter in turbulent flow through a pipe. Proceedings of the Royal Society of London”, *Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, Vol. 223, pp. 446-468.
- TECHO, R., HOLBROOK, D.L., 1974. “Computer scheduling the world’s biggest product pipeline”, *Pipeline Gas Journal*, pp. 4-27.
- TOMADA, T., KOMARU, M., BADONO, S. TSUMAGARI, K., EXALL, D., 1987. “Development of gamma-ray oil/water/gas fraction meter for crude oil production system”. *Proc. Int. Conf. Industrial Flow Measurement On-shore and Off-shore*, London.
- TRANSPETRO. (s.d.). Acesso em 27 de 01 de 2018, disponível em TRANSPETRO: http://www.transpetro.com.br/pt_br/fale-conosco/canal-do-cliente/informacoes-em-atendimento-a-anp/terminais-e-oleodutos.html
- TSOULFANIDIS, N., 1995. “Measurement and Detection of Radiation”, Washington: Taylor e Francis Group
- VICENT-GENOD, J., 1984. “Fundamentals of pipeline engineering”. [S.I]: Technip.
- YANG, A.S., KUO, T.C., LING, P.H, 2003. “Application of neural networks to prediction of phase transport characteristics in high-pressure two-phase turbulent bubbly flows”, *Nuclear Engineering and Design*, Vol. 223, pp. 295–313.
- ZADEH E.E., FEGHHI S.A.H., ROSHANI G.H. AND REZAEI A., 2016. “Application of artificial neural network in precise prediction of cement elements percentages based on the neutron activation analysis” *The European Physical Journal Plus*, Vol. 131, pp. 167.
- ZHANG, Y., RONG, X.L., 1996. “Hybrid Training of RBF Networks with Application to Nonlinear Systems Identification”, In: *Proceedings of the 35th Conference on Decision and Control*, Kobe, Japan.

APÊNDICE A

CÁLCULO FRAÇÃO DE VOLUME REGIME ESTRATIFICADO



$$x^2 + (y - R)^2 = R^2 \therefore x(y) = \sqrt{R^2 - (y - R)^2}$$

Equação 26

A área desejada é dada por:

$$S(h) = 2 \cdot \int_0^h x(y) dy$$

Equação 27

Substituindo a Equação 26 na Equação 27, tem-se:

$$S(h) = 2 \cdot \int_0^h \sqrt{R^2 - (y - R)^2} dy$$

Equação 28

Utilizando a técnica de integração por substituição trigonométrica, tem-se:

$$\text{sen}(\alpha) = \frac{y - R}{R} \quad \therefore \quad y = R + R \text{sen}(\alpha)$$

Equação 29

Sabendo-se que:

$$\operatorname{sen}^2(x) + \cos^2(x) = 1$$

Equação 30

E aplicando na Equação 29:

$$\left(\frac{y-R}{R}\right)^2 + \cos^2(\alpha) = 1$$

$$\cos^2(\alpha) = \frac{R^2 - (y-R)^2}{R^2}$$

$$\cos(\alpha) = \frac{\sqrt{R^2 - (y-R)^2}}{R}$$

Equação 31

Derivando a Equação 29:

$$dy = R + R\cos(\alpha)d\alpha$$

Equação 32

Substituindo a Equação 31 e Equação 32 na Equação 28, tem-se:

$$S(h) = 2 \cdot \int_0^h R\cos(\alpha) \cdot R\cos(\alpha)d\alpha \rightarrow S(h) = 2R^2 \int_0^h \cos^2(\alpha)d\alpha$$

Equação 33

Integrando:

$$S(h) = 2R^2 \left[\frac{1}{2} (\alpha + \operatorname{sen}(\alpha) \cdot \cos(\alpha)) \right] \Big|_0^h$$

Equação 34

Após substituições matemáticas:

$$S(h) = R^2 \left[\arcsen\left(\frac{y-R}{R}\right) + \frac{y-R}{R} \cdot \frac{\sqrt{R^2 - (y-R)^2}}{R} \right] \Big|_0^h$$

$$S(h) = R^2 \arcsen\left(\frac{y-R}{R}\right) + (y-R) \cdot \sqrt{R^2 - (y-R)^2} \Big|_0^h$$

$$\begin{aligned} S(h) &= R^2 \arcsen\left(\frac{h-R}{R}\right) + (h-R) \cdot \sqrt{R^2 - (h-R)^2} - R^2 \arcsen(-1) \\ &\quad + (-R) \cdot \sqrt{R^2 - (-R)^2} \end{aligned}$$

Como:

$$R^2 \arcsen(-1) = \frac{3\pi}{2} e(-R) \cdot \sqrt{R^2 - (-R)^2} = 0$$

Logo, é possível calcular a fração de volume em um regime de fluxo estratificado utilizando a Equação 35:

$$S(h) = \frac{\pi R^2}{2} \left[R^2 \arcsen\left(\frac{h-R}{R}\right) + (h-R) \cdot \sqrt{R^2 - (h-R)^2} \right]$$

Equação 35

ARTIGOS PUBLICADOS EM REVISTAS INTERNACIONAIS



Applied Radiation and Isotopes

Volume 160, June 2020, 109125



Monitoring system of oil by-products interface in pipelines using the gamma radiation attenuation

William L. Salgado ^a , Roos S.F. Dam ^a , Caroline M. Barbosa ^a , Ademir X. da Silva ^a , César M. Salgado ^b [Show more](#) [+ Add to Mendeley](#) [Share](#) [Cite](#)<https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2020.109125>[Get rights and content](#)

Abstract

This paper presents a methodology to precise identify the interface region, which is formed in the transport of petroleum by-products in polyducts, using gamma densitometry. The simulated geometry is compose for a collimated ^{137}Cs source and a NaI(Tl) detector to measure the transmitted beam. The modeling was validated experimentally on stratified flow regime using water and oil. The different volume fractions were calculated using the MCNPX code in order to determine the region interface with an accuracy of 1%.



System to detect the interface region and identify products transported by polyducts using artificial intelligence and gamma radiation through MCNP6 code

W.L. Salgado ^{a, b} , R.S.F. Dam ^{a, b} , C.M. Salgado ^b , E.J.A. Puertas ^a, A.X. Silva ^a

Show more

+ Add to Mendeley Share Cite

<https://doi.org/10.1016/j.measurement.2021.110093>

Get rights and content

Highlights

- A methodology to identify the interface region of petroleum by-products transportation in polyducts.
- The identification of the interface region was performed for several petroleum by-products.
- This study has been used the MCNP6 code and artificial neural network.
- The geometry consists of a gamma-ray source and uses dual-modality measurements.
- The static models used for a stratified flow regime on the biphasic system were developed using the MCNP6.



BRAZILIAN JOURNAL
OF
RADIATION SCIENCES
07-02B (2019) 01-14



Study of volume fractions on biphasic stratified regime using gamma ray

W. L. Salgado^a; L. E. B. Brandão^a

^a Instituto de Engenharia Nuclear, 21.941-972, Cidade Universitária, Brasil
william.otero@hotmail.com

ABSTRACT

In the oil industries, interconnected pipelines are used to carry large quantities of petroleum and its byproducts. This modal has an advantage because they are more economical, eliminate a need for stocks and, in addition, great safety in operation minimizing a possibility of loss or theft when transported another way. In many cases, especially in the petrochemical industry, the same pipeline is used to carry more than one type of product. They are called poliduct. In the operation of a poliduct there is a sequence of products to be transported and during the exchange of the product, there are still fractions of the previous product and this generates contaminations. It is therefore important to identify precisely this region in order to reduce the costs of reprocessing and treatment of discarded products. In this way, this work presents a methodology to evaluate the sensitivity of the gamma densitometry technique in a study of the calculation of volume fractions in biphasic systems, submitted to the stratified flow regime. Using computational simulations using the Monte Carlo Method with the MCNP-X code, measurement geometry was proposed that presented a higher sensitivity for the calculation of volume fractions. The relevant technical data to perform a simulation of the scintillator detectors were based on information obtained from the gammagraphy technique. The study had a theoretical validation through analytical equations, and the results show that it is possible to identify volume fractions equivalent to 3%.

Keywords: volume fraction, gamma radiation, code MCNP-X



BRAZILIAN JOURNAL
OF
RADIATION SCIENCES
XX (XXXX) XX-XX



Volume fractions calculation of a biphasic system on cylindrical tube using gamma ray and MCNP6 code

Salgado^{a,b} W. L., Dam^{a,b} R. S. F., Miranda^{a,b}, R. O.,
Salgado^b C. M. and Silva^a A. X.

^a Programa de Engenharia Nuclear – (PEN/COPPE)
Universidade Federal do Rio de Janeiro – (UFRJ)
Avenida Horácio de Macedo 2030, G – 206
21941-914 Cidade Universitária, RJ, Brazil
wlsalgado@con.ufrj.br; rdam@con.ufrj.br; seto_ricm@hotmail.com; Ademir@con.ufrj.br

^b Instituto de Engenharia Nuclear – (IEN)
Rua Hélio de Almeida 75
21941-906 Cidade Universitária, RJ, Brazil
otero@ien.gov.br

ABSTRACT

Be determined which is the volumetric fraction. This paper presents a methodology to calculate volumetric fractions on the stratified flow regime, considering a cylindrical tube. A mathematical model of a measurement system was developed using the MCNP6 code. The mathematical equation was developed to calculate the volume fractions using the pulse height distributions obtained by a radiation detector. The stratified flow regime model considers air-oil, air-gasoline and oil-gasoline biphasic flow, in order to evaluate the performance of the proposed equation in fluid combinations with different densities. A comparative study with equations developed for square-section tubes from literature was performed. The study considered geometry of a source of ^{137}Cs , an acrylic tubing measuring 8.0 cm in diameter and a $1\frac{1}{4} \times \frac{3}{4}$ " NaI(Tl) detector placed at a position diametrically opposed to a radiation source to measure the transmitted beam. The dimensions and materials to perform the simulation of the detectors were based on information obtained from the gammagraphy technique and the detector was experimentally validated. The volume fractions of each of the fluids were 0 up to 100% with variations of 25%.

Keywords: volume fraction, MCNP6 code, ray gamma.

ARTIGO ACEITO EM REVISTA INTERNACIONAL



Contents lists available at ScienceDirect

Radiation Physics and Chemistry

journal homepage: www.elsevier.com/locate/radphyschem

IDENTIFICATION OF THE INTERFACE REGION IN TRANSPORT OF PETROLEUM BY-PRODUCTS IN POLYDUCTS USING ARTIFICIAL NEURAL NETWORK AND GAMMA DENSITOMETRY BY THE MCNPX CODE

Salgado^{a,b,*} W. L., Dam^{a,b} R. S. F., Salgado^b C. M. and Silva^a A. X.

^a Programa de Engenharia Nuclear – (PEN/COPPE)

Universidade Federal do Rio de Janeiro – (UFRJ)

Avenida Horácio de Macedo 2030, G – 206

21941-914 Cidade Universitária, RJ, Brazil

william.otero@coppe.ufrj.br; rdam@coppe.ufrj.br; ademir@con.ufrj.br

^b Divisão de Radiofármacos – (DIRA)

Instituto de Engenharia Nuclear – (IEN)

Rua Hélio de Almeida 75

21941-906 Cidade Universitária, RJ, Brazil

otero@ien.gov.br

ABSTRACT

This paper presents a methodology to identify the interface region of petroleum by-products transportation in polyducts using an artificial neural network (ANN) in order to increase the accuracy of the purity level of the materials. The measurement geometry consists of a 662 keV gamma-ray source and uses two NaI(Tl) detectors, one to measure the transmitted beam and the other to measure the scattered beam. The source is collimated to obtain a narrow and appropriate radiation beam. A steel tube with 0.3 cm of thickness with several radius values was investigated: from 4 to 10 inches. The data recorded in the two detectors are used for ANN training without any normalization methods. The entire spectrum was used as input data. The static models used for a stratified flow regime composed of oil-gasoline biphasic system were developed using the MCNPX code. Different purity levels of these fluids were generated to provide training, test, and validation data for the ANN. The response function of the detectors used on the simulation has been validated experimentally. The results for all patterns were evaluated by the Mean Relative Error and Root Mean Square Error 0.47109 and 2.22% respectively. These results showed that the proposed ANN is capable of predicting purity levels in the range of 99% for the fluids used in this investigation.

Keywords: Interface region; gamma radiation; MCNPX code; artificial neural network; polyducts.