

INSTITUTO DE ENGENHARIA NUCLEAR

ANA CAROLINA LIMA CARVALHO

**PREDIÇÃO DE ESPESSURA DE INCRUSTAÇÕES CONCÊNTRICAS E
EXCÊNTRICAS DE CARBONATO DE CÁLCIO UTILIZANDO REDES
NEURAS ARTIFICIAIS**

Rio de Janeiro

2021

ANA CAROLINA LIMA CARVALHO

**PREDIÇÃO DE ESPESSURA DE INCRUSTAÇÕES CONCÊNTRICAS E
EXCÊNTRICAS DE CARBONATO DE CÁLCIO UTILIZANDO REDES
NEURAIS ARTIFICIAIS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Ciência e Tecnologia Nucleares do Instituto de Engenharia Nuclear da Comissão Nacional de Energia Nuclear como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Grau de Mestre em Ciências e Tecnologias Nucleares.

Orientador: Prof. Dr. César Marques Salgado.

Rio de Janeiro
2021

PREDIÇÃO DE ESPESSURA DE INCRUSTAÇÕES CONCÊNTRICAS E
EXCÊNTRICAS DE CARBONATO DE CÁLCIO UTILIZANDO REDES NEURAIAS
ARTIFICIAIS

Ana Carolina Lima Carvalho

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA E TECNOLOGIA NUCLEARES DO INSTITUTO DE ENGENHARIA NUCLEAR COMO REQUISITO PARCIAL NECESSÁRIO PARA OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIA E TECNOLOGIA NUCLEARES.

Aprovada por:

Prof. César Marques Salgado, D. Sc.

Prof. Claudio Márcio Abreu do Nascimento, D. Sc.

Prof. Claudio de Carvalho Conti, D. Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL
DEZEMBRO, 2021

FICHA CATALOGRÁFICA

CARVA Carvalho, Ana Carolina Lima

Predição de espessura de incrustações concêntricas e excêntricas de carbonato de cálcio utilizando redes neurais artificiais /Ana Carolina Lima Carvalho– Rio de Janeiro: CNEN/IEN,2021.

93 f. il; 31 cm.

Orientador: César Marques Salgado

Dissertação (Mestrado) – Instituto de Engenharia Nuclear, PPGIEN, 2021.

1. Espessura de incrustações. 2. Redes neurais artificiais. 3. MCNP. 4. Detectores NaI(Tl). 5. Densitometria gama.

DEDICATÓRIA

Esta dissertação é dedicada à minha amiga Carolina Pacheco Pati Magalhães Santos, pelo companheirismo no dia-a-dia no trabalho e, principalmente, por todo apoio para concluir esta jornada.

AGRADECIMENTOS

Ao meu orientador, Prof. D. Sc. César Marques Salgado, por todos os conhecimentos transmitidos em sala de aula, durante o curso e por toda ajuda e apoio durante a realização da dissertação.

A meus pais por todo incentivo e meus irmãos, pela ajuda.

Aos meus amigos, Daniel, Anderson e Phelipe que me acolheram em suas casas, durante o curso.

A minha amiga Julia, por todo carinho e amizade durante as aulas.

RESUMO

As incrustações de carbonato de cálcio (CaCO_3) são produtos de variações termodinâmicas e reações químicas que ocorrem durante os processos de formação e exploração do petróleo e gás, seu acúmulo em tubulações e outros equipamentos pode causar danos e interrupção da produção. Os métodos tradicionais de predição de incrustações são baseados em modelos termodinâmicos que necessitam de dados específicos. Portanto, o objetivo desse trabalho é apresentar uma metodologia para predição de espessura de incrustações de CaCO_3 com deposição concêntrica e excêntrica, baseado na técnica de densitometria de raios gama. O código MCNP6 foi utilizado para contornar obstáculos, como a geometria de medição e regime de fluxos específicos e obter os dados necessários para treinamento supervisionado das redes neurais artificiais (RNAs), que foram utilizadas para predição das espessuras das incrustações de CaCO_3 . Logo, foi simulado um escoamento trifásico anular formado por óleo, água salgada e gás em uma tubulação de aço inoxidável AISI 316L com 252 mm de diâmetro externo e 2 mm de espessura. A espessura das incrustações de CaCO_3 variou de 2 mm a 124 mm para os casos de deposição concêntrica e de 2 a 164 mm para deposição excêntrica. Três detectores de NaI(Tl) foram dispostos a 120° ao redor do sistema duto-incrustação-fluido para considerar o feixe e espalhado de uma fonte de Cs-137 colimada em um ângulo de 8° . Os resultados foram satisfatórios, onde mais de 86% dos resultados para as espessuras concêntricas e 92% das espessuras excêntricas apresentaram um erro relativo menor que 5%, sendo possível a predição das espessuras das incrustações nos casos concêntricos e excêntricos, independentemente de sua posição.

Palavras-chave: Espessura de incrustações de CaCO_3 , redes neurais artificiais, MCNP6, detectores NaI(Tl), densitometria gama.

ABSTRACT

Calcium carbonate (CaCO_3) scales are consequence from thermodynamics variations and chemical reactions which occur during the formation and exploration process of oil and gas, their deposition in pipes and equipment can cause damages and interruption of production. The traditional methods to predict scales formation are based on thermodynamic models, which require specific data. Thus, this study presents a methodology to predict CaCO_3 scale thickness with concentric and eccentric deposition, based on gamma ray densitometry. The MCNP6 code was apply to bypass obstacles, as detection geometry and flow regime, and obtain the necessary data for the supervised training of Artificial Neural Networks (ANNs), used to predict the CaCO_3 scales. Then, an annular three-phase flow, formed by oil, seawater and gas in a AISI 316L pipe with an outer diameter of 252 mm and 2 mm wall thickness. The CaCO_3 scale thicknesses varied from 2 mm to 124 mm for the concentric depositions and 2 mm to 164 mm for the eccentric depositions. Three NaI(Tl) detectors were positioned around the pipe-scale-fluids system, spaced 120° apart to obtain the scattered beam from a collimated Cs-137 source with a divergence angle of 8° . The results were satisfactory, where the relative error was within 5% in more than 86% for the concentric thicknesses and 92% for the eccentric cases. Thus, it was possible to predict the scales' thickness for concentric and eccentric cases, regardless their position inside the pipe.

Key-words: CaCO_3 scale thickness, artificial neural networks, MCNP6 code, NaI(Tl) detectors, gamma ray densitometry.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Ilustração dos padrões de escoamento horizontal	27
Figura 2: Ilustração dos padrões de escoamento vertical	28
Figura 3: Tubulação com incrustação de CaCO_3 : (a) Concêntrica e (b) Excêntrica	29
Figura 4: Variação do produto de solubilidade constante de diferentes tipos de incrustações carbonáticas com a temperatura da solução.....	30
Figura 5: Incrustações em trocadores de calor	34
Figura 6: Geometria de medição para cálculo do caminho da radiação na incrustação .	36
Figura 7: Relações trigonométricas para o cálculo do caminho da radiação no: (a) fluído e incrustação e (b) duto.....	37
Figura 8: Espessura da definida pelo segmento de reta AB: (a) concêntrica e (b) excêntrica.....	38
Figura 9: Representação do Efeito Fotoelétrico	40
Figura 10: Representação do Efeito Compton.....	40
Figura 11: Atenuação de um feixe de radiação gama por um absorvedor de espessura x	42
Figura 12: Níveis de energia de um cristal puro com ativador.....	44
Figura 13: Ilustração do neurônio biológico.....	49
Figura 14: Modelo não linear de um neurônio	49
Figura 15: Arquitetura de uma RNA multicamadas.....	51
Figura 16: Modelo utilizado para obtenção dos coeficientes de atenuação linear dos materiais usados na validação das equações analíticas para cálculo de espessuras de incrustações	56
Figura 17: Modelo matemático proposto para validação das equações analíticas	57
Figura 18: Modelo matemático proposto para obtenção do conjunto de dados para treinamento supervisionado das RNAs.....	59
Figura 19: Detector de NaI(Tl) usado nas simulações com o código MCNP6	59
Figura 20: Modelo utilizado para o estudo do ângulo de colimação para a geometria de medição proposta para predição de espessuras de incrustações de CaCO_3	60
Figura 21: Simulações realizadas para a incrustação concêntrica de: (a) 2 mm e (b) 60 mm.....	61
Figura 22: Distribuição aleatória dos dados nos conjuntos de Treinamento, Teste e Validação para o treinamento supervisionado da RNA.....	62
Figura 23: Arquitetura da RNA concêntrica.....	62
Figura 24: Simulações realizadas para a incrustação excêntrica para o escoamento bifásico na posição: (a) 0° e (b) 120°	63
Figura 25: Curvas $\text{Ln}(I_0/I) \times X$ para obtenção do coeficiente de atenuação linear do: (a) aço AISI316L, (b) óleo bruto mexicano, (c) CaCO_3 , (d) água salgada e (e) ar atmosférico.	70
Figura 26: Erro relativo versus espessuras de CaCO_3 para as espessuras de 1 a 5 mm. 72	
Figura 27: DAPs obtidas com os detectores D1, D2 e D3 para as espessuras de CaCO_3 de 60 mm.	77
Figura 28: Correlação entre as espessuras concêntricas reais e preditas pela RNA.....	78

Figura 29 (a) Resultados obtidos pela RNA para o conjunto de treinamento e (b) seu respectivo ajuste linear	78
Figura 30 (a) Resultados obtidos pela RNA para o conjunto de teste e (b) seu respectivo ajuste linear.....	79
Figura 31(a) Resultados obtidos pela RNA para o conjunto de validação e (b) seu respectivo ajuste linear.	79
Figura 32: DAPs obtidas com os detectores D1, D2 e D3, para a espessura excêntrica de CaCO_3 de 84 mm para a posição de 120°	81
Figura 33: Correlação entre os valores das espessuras excêntricas reais e previstas pela RNA.....	82
Figura 34: Ajuste Linear do conjunto de treinamento da RNA.....	82
Figura 35: (a) Resultados obtidos pela RNA para o conjunto de Teste (b) seu respectivo ajuste linear.....	83
Figura 36 (a) Resultados obtidos pela RNA para o conjunto de Validação (b) seu respectivo ajuste linear.	83
Figura 37: Curvas $\text{Ln}(I_0/I) \times X$ para obtenção do coeficiente de atenuação linear dos aços AISI 316L, HT9, AISI 304L e AISI 440.....	85
Figura 38: Curvas $\text{Ln}(I_0/I) \times X$ para obtenção do coeficiente de atenuação linear dos óleos brutos brasileiros.	86
Figura 39: Curvas $\text{Ln}(I_0/I) \times X$ para obtenção do coeficiente de atenuação linear dos gases estudados.....	88
Figura 40: Curvas $\text{Ln}(I_0/I) \times X$ para obtenção do coeficiente de atenuação linear das incrustações de CaCO_3 considerando a presença de: (a) MgCO_3 , (b) SrCO_3 e (c) BaCO_3	89
Figura A1: Processos termoquímicos que compreendem a formação do petróleo e gás natural	100
Figura B1: Representação da produção de pares.....	102
Figura C1: Ilustração de uma válvula fotomultiplicadora	104
Figura C2: Representação esquemática de um sistema de medição utilizado com detectores de radiação.....	106

LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Classificação da Grandeza em função do erro relativo	47
Tabela 2: Fração mássica dos materiais empregados na simulação com o MCNPX.	55
Tabela 3: Fração mássica dos aços inoxidáveis avaliados	65
Tabela 4: Fração mássica e densidade dos óleos brutos avaliados	66
Tabela 5: Fração mássica dos gases naturais avaliados.....	67
Tabela 6: Fração mássica das incrustações analisadas	68
Tabela 7: Coeficiente de atenuação do aço, óleo, incrustação, água salgada e ar atmosférico.	71
Tabela 8: Espessura da Incrustação de 5 mm com variação dos fluidos no interior do duto e altura de detecção.	73
Tabela 9: Classificação dos erros relativos.....	74
Tabela 10: Espessura da Incrustação de 25 mm com variação dos fluidos no interior do duto e altura de detecção.	74
Tabela 11: Espessura da Incrustação de 50 mm com variação dos fluidos no interior do duto e altura de detecção.	74
Tabela 12: Coeficiente de atenuação linear do aço AISI 316L para os diferentes ângulos de colimação.	75
Tabela 13: Coeficiente de atenuação linear do óleo bruto mexicano para os diferentes ângulos de colimação.....	76
Tabela 14: Coeficiente de atenuação linear do CaCO_3 para os diferentes ângulos de colimação.....	76
Tabela 15: Coeficiente de atenuação linear da água salgada para os diferentes ângulos de colimação.....	76
Tabela 16: Parâmetros de treinamento da RNA para predição de espessuras concêntricas.	77
Tabela 17: Dados processados pela RNA para o caso concêntrico.	79
Tabela 18: Análise da RNA através de parâmetros estatísticos.	80
Tabela 19: Parâmetros de treinamento da RNA para predição de espessuras excêntricas	81
Tabela 20: Dados processados pela RNA para o caso excêntrico.	84
Tabela 21: Análise da RNA através de parâmetros estatísticos.	84
Tabela 22: Coeficiente de atenuação linear dos aços estudados e seus respectivos.....	85
Tabela 23: Coeficiente de atenuação linear dos óleos brasileiros estudados e seus respectivos erros relativos.	87
Tabela 24: Coeficiente de atenuação linear dos gases estudados e seus respectivos erros relativos.	88
Tabela 25: Coeficiente de atenuação linear das incrustações estudados e seus respectivos erros	90
Tabela D1: Exemplo de tallies do MCNP	108

LISTA DE SIGLAS E ABREVIACOES

ANP: Agncia Nacional de Petrleo e Gs

DAP: Distribuio de altura de pulsos

MCNP: Monte Carlo *N-Particle*

MPL: Rede *Feedforward Multilayer Perceptron*

NaI(Tl): Detector cintilador de iodeto de sdio dopado com tlio

OPEC: *Organization of the Petroleum Exporting Countries*

RNA: Rede Neural Artificial

SUMÁRIO

CAPÍTULO 1	16
1. INTRODUÇÃO	16
1.1 Relevância	19
1.2 Objetivo	19
1.3 Revisão Bibliográfica	19
CAPÍTULO 2	25
2. FUNDAMENTOS TEORICOS	25
2.1 FUNDAMENTOS DO ESCOAMENTO MULTIFÁSICO	25
2.1.1 Padrões de escoamento horizontal	25
2.1.2 Padrões de escoamento vertical	27
2.2 INCRUSTAÇÕES	28
2.2.1 Incrustações carbonáticas	29
2.2.1.1 Mecanismo de formação das incrustações	30
2.2.1.2 Previsão da ocorrência das incrustações	31
2.2.1.3 Prevenção e remoção das incrustações	32
2.2.1.4 Impacto econômico e socioambiental das incrustações	34
2.2.1.5 Cálculo da espessura das incrustações	35
2.3 FUNDAMENTOS DA RADIAÇÃO	39
2.3.1 Interação da radiação gama com a matéria	39
2.3.1.1 Efeito Fotoelétrico	39
2.3.1.2 Efeito Compton	40
2.3.2 Atenuação da radiação gama	41
2.3.3 Coeficiente de atenuação linear	42
2.3.4.3 Detectores de NaI(Tl)	43
2.4 O MÉTODO DE MONTE CARLO	44
2.4.1 O código de transporte da Radiação MCNP	45
2.4.2 Estrutura dos dados de entrada do MCNP	45
2.4.3 Estrutura dos dados de saída do MCNP	46
2.4.4 Erro relativo estimado	46
2.4.5 Vantagens e desvantagens do MCNP	47
2.5 REDES NEURAIS ARTIFICIAIS	47

2.5.1 Neurônio biológico e artificial	48
2.5.2 Redes neurais artificiais multicamadas	50
2.5.3 Algoritmo de treinamento <i>backpropagation</i>	51
2.5.4 Validação Cruzada.....	52
CAPÍTULO III	54
3 METODOLOGIA.....	54
3.1 VALIDAÇÃO DAS EQUAÇÕES ANALÍTICAS	54
3.1.1 Coeficiente de atenuação linear dos materiais	54
3.1.2 Cálculo da espessura das incrustações	56
3.2 GEOMETRIA PROPOSTA PARA A PREDIÇÃO DA ESPESSURA	58
3.2.1 Modelo Proposto	58
3.2.2 Estudo do ângulo de colimação	60
3.3 PREDIÇÃO DAS ESPESSURAS POR RNA	60
3.3.1 Espessura das incrustações concêntricas	61
3.3.2 Espessura das incrustações excêntricas	63
3.4 ADEQUABILIDADE DO MODELO PROPOSTO	64
3.4.1 Análise da influência da composição química do duto	64
3.4.2 Análise da influência da composição química do óleo	65
3.4.3 Análise da influência da composição química do gás	66
3.4.4 Análise da influência da composição química da incrustação	67
CAPÍTULO 4.....	69
4 RESULTADOS	69
4.1 VALIDAÇÃO DAS EQUAÇÕES ANALÍTICAS	69
4.1.1 Coeficiente de atenuação linear dos materiais	69
4.1.2 Cálculo das espessuras por equações analíticas	71
4.2 ESTUDO DO ÂNGULO DE COLIMAÇÃO	75
4.3 PREDIÇÃO DAS ESPESSURAS DAS INCRUSTAÇÕES CONCÊNTRICAS ...	76
4.4 PREDIÇÃO DAS ESPESSURAS DAS INCRUSTAÇÕES EXCÊNTRICAS	80
4.5 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA COMPOSIÇÃO QUÍMICA DO DUTO.....	85
4.6 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA COMPOSIÇÃO QUÍMICA DO ÓLEO	86
4.7 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA COMPOSIÇÃO QUÍMICA DO GÁS	87
4.8 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA COMPOSIÇÃO QUÍMICA DA INCRUSTAÇÃO	89
CAPÍTULO V	91

5 CONCLUSÃO	91
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	94
ANEXO A	100
ANEXO B	102
ANEXO C.....	103
ANEXO D.....	107

CAPÍTULO I

1 INTRODUÇÃO

A Teoria Orgânica do petróleo resume seu processo de geração como a transformação da matéria orgânica através da luz solar e do calor oriundo do interior da terra. A incorporação desta matéria orgânica aos sedimentos marca o início deste processo, formado pelas etapas de diagênese, catagênese, metagênese e metamorfismo. Para acumulação de petróleo e gás é necessária sua migração após o processo de geração e, que esta migração seja interrompida por algum tipo de armadilha geológica, como dobras e falhas, respostas da rocha aos esforços e deformações as quais são submetidas. Além disso, é bastante comum a presença de água, proveniente de aquíferos, cuja migração para o reservatório depende da porosidade da rocha. (TRIGGIA *et al.*, 2004).

A extração deste fluido trifásico é marcada pelo surgimento de precipitados insolúveis, denominados incrustações, produtos das variações termodinâmicas, reações químicas, evaporação da água e reações químicas microbiológicas (KAMAL *et al.*, 2018).

As incrustações mais encontradas na indústria petrolífera são as de sulfato de bário (BaSO_4), sulfato de estrôncio (SrSO_4), sulfato de cálcio (CaSO_4) e carbonato de cálcio (CaCO_3). O surgimento das incrustações de sulfato está relacionado à reinjeção da água de formação – rica em bário, estrôncio e cálcio - nos poços para manutenção da pressão, a fim de auxiliar a extração. A incompatibilidade entre estas águas causa cristalização e consequente formação de incrustações (CASTRO, 2015; CARVALHO, 2019). Por sua vez, a formação de incrustações carbonáticas ocorre através da combinação da ação de bactérias sobre a matéria orgânica presente nos reservatórios, que produzem ácido carbônico dissolvendo o carbonato de cálcio das rochas e formando bicarbonato de cálcio solúvel. A combinação dos íons de cálcio e bicarbonato para formar precipitados de carbonato de cálcio ocorre com o aumento da temperatura e pH da solução e diminuição pressão. A deposição das incrustações é definida pelo equilíbrio químico entre os precipitados e o dióxido de carbono (CO_2) dissolvido na água (KAMAL *et al.*, 2018).

Incrustações podem causar uma redução significativa do diâmetro das tubulações e consequente redução de fluxo do escoamento, aumento da taxa de corrosão, além da

diminuição ou interrupção da produção de petróleo. Ademais, os métodos aplicados para remoção das incrustações são trabalhosos, caros e podem representar um risco aos trabalhadores, devido à presença de materiais radioativos de ocorrência natural (NORM's – *Naturally Occurring Radioactive Materials*) que são encontrados, principalmente, nas incrustações de sulfato de bário e carbonato de estrôncio (CARVALHO, 2019).

Os métodos mais utilizados para remoção de incrustações são os manuais, mecânicos, abrasivos, químicos e fusão. A eficiência da técnica associada irá depender da composição da incrustação, material da tubulação, do acesso à incrustação e a relação entre a área da superfície e volume. Assim, a espessura da incrustação se torna um fator decisivo na escolha da técnica utilizada, por exemplo, a remoção química de incrustações de carbonato de cálcio é bastante eficaz, porém para grandes espessuras, é necessária aplicação de técnicas mecânicas ou abrasivas, que são mais caras (KAMAL *et al.*, 2018). Além disso, precisam de planejamento e medidas específicas de proteção radiológica nos casos de incrustações que contenham NORM's em sua composição (CARVALHO, 2019).

Por se tratar de um problema extremamente frequente e dispendioso para a indústria petrolífera, o estudo de novas técnicas de medição de espessura torna possível a monitoração da ocorrência para a melhor tomada de decisão nas intervenções em tubulações e equipamentos, do ponto de vista econômico, ambiental, além dos riscos ocupacionais para os envolvidos nestas atividades, e, também, para possibilitar a avaliação da eficiência dos inibidores de incrustações.

Métodos tradicionais de predição de formação de incrustações são baseados em modelos termodinâmicos que consideram a solubilidade em sistemas com temperatura e pressão específica ou na cinética química, através da determinação da saturação da solução e monitorações do pH da solução (OLAJIRE, 2015).

Dentre as técnicas nucleares, a densitometria de raios gamas vem apresentando resultados satisfatórios quando aplicada em vários estudos na indústria petrolífera, como predição de densidades (SALGADO *et al.*, 2009), identificação de padrões de escoamento (SALGADO *et al.*, 2010) e determinação de espessuras em escoamentos verticais (SALGADO *et al.*, 2019; TEIXEIRA *et al.*, 2020). A técnica consiste na transmissão/espalhamento de um feixe de raios gama, objetivando a determinação da

densidade e a espessura do material, utilizando-se um ou mais detectores de radiação que registram o fluxo de raios gama através da tubulação, incrustação e escoamento, permitindo a monitoração on-line e não invasiva, ou seja, não se faz necessário contato do detector com os fluidos do escoamento (TEIXEIRA *et al.*, 2020).

Para contornar obstáculos, como geometria de medição e determinação do regime de fluxo específico para obtenção de resultados confiáveis com as equações analíticas, pode ser usadas Redes Neurais Artificiais (RNAs) que apresentam resultados eficientes para problemas de padrões de reconhecimento, minimizando a quantidade de informações específicas do escoamento, especialmente nos casos onde a deposição da incrustação ocorre de maneira excêntrica, onde a não uniformidade da deposição implica em maiores dificuldades de determinação da espessura máxima da incrustação.

As RNAs são sistemas de aprendizado que simulam o mecanismo de aprendizagem em organismos biológicos. São constituídas de unidades de processamento simples (neurônios), com capacidade de armazenar conhecimento obtido experimentalmente. A motivação para os trabalhos com RNAs tem sido o cérebro humano. Considerado um sistema de processamento de informação complexo, não-linear e paralelo, cuja capacidade de organização dos constituintes estruturais – neurônios – na formação de padrões de processamento é mais rápida que os computadores digitais atuais (HAYKIN, 2005).

Os dados necessários para o treinamento da RNA são obtidos com o código MCNP6 baseado no método de Monte de Carlo (MC), que consiste de método numérico de simulação estatística. A partir do conhecimento das funções de distribuição de probabilidade são realizadas amostragens aleatórias. O objetivo é reproduzir em um ambiente controlado, o que se passa em uma situação real, que não pode ser obtida facilmente de maneira experimental. Logo, é vastamente aplicado na área de transporte da radiação (SHTEJER-DIAZ *et al.*, 2003; SALGADO *et al.*, 2009; ZEROVNIK *et al.*, 2014; SINGH *et al.*, 2015; SOUZA *et al.*, 2019). Através de um código computacional que simula as trajetórias das partículas individuais e os processos pelos quais a radiação interage com a matéria pela geração de número pseudoaleatórios, a partir da distribuição de probabilidade que rege os fenômenos físicos envolvidos (SALGADO, 2010).

1.1 RELEVÂNCIA

O petróleo possui um papel importante na economia brasileira, apenas no mês de junho de 2021 foram extraídos 2,90 milhões de barris de petróleo por dia, correspondendo a quase metade da extração de toda a América Latina (OPEC, 2021). A presença das incrustações é um dos problemas mais dispendioso da indústria petrolífera. Embora não possa ser completamente evitada, é possível estabelecer uma monitoração e acompanhamento da deposição das incrustações em dutos, válvulas, bombas, trocadores de calor e outros equipamentos, a fim de evitar uma parada brusca da produção.

Em todo o mundo, as técnicas nucleares vêm sendo aplicadas na indústria em geral, apresentando soluções paralelas para uma gama de problemas. Não obstante, a predição de espessura de incrustações na indústria petrolífera tem sido estudada através da aplicação destas técnicas.

A aplicação de técnicas nucleares não invasivas apresenta vantagens pela capacidade de realização on-line, além disso, o uso de fontes seladas não implica em grandes problemas de proteção radiológica, tanto do ponto de vista ocupacional, quanto ambiental. Além disso, apresentam confiabilidade nos resultados.

1.2 OBJETIVO

Desenvolver uma metodologia para predição da incrustação de carbonato de cálcio (CaCO_3) tanto para os casos de deposição concêntrica, quanto excêntrica, em dutos de aço inoxidável com escoamento trifásico, formado por óleo, água e gás, fazendo uso de redes neurais artificiais (RNAs).

1.3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Stiff *et al.*, (1952) utilizaram a equação de Langelier (IL) para desenvolver uma metodologia para indicar a tendência de deposição de incrustações de carbonato de cálcio em campos de petróleo. Por meio de medidas experimentais do pH e da

concentração de cálcio na água, o IL foi calculado. Os resultados positivos do IL indicavam a tendência de deposição de carbonato de cálcio.

Sippel e Glover (1964) demonstraram através de uma seção de teste, construída para alterar a pressão e temperatura de soluções ácidas e básicas, a alta dependência do produto de solubilidade do carbonato de cálcio com a temperatura e pH da solução.

Diebes e Jessen (1967) estudaram a deposição de incrustações de carbonato de cálcio na superfície de aços, recriando em laboratório as condições encontradas em campo, como a variação da temperatura da salmoura. A composição da incrustação foi analisada por microscopia de raios X, a fim de avaliar a influência de elementos químicos, como sulfatos de cálcio e magnésio presentes na água do mar, na deposição do carbonato de cálcio e o impacto na eficiência de treze tipos diferentes de inibidores de incrustação, como lignosulfonato de ferro-cromo, fosfato orgânico e ácido sulfâmico.

Watkinson e Martinez (1975) estudaram os efeitos na deposição da incrustação, da variação de velocidade, temperatura e diâmetro de um escoamento formado por água e carbonato de cálcio em suspensão em um trocador de calor.

Mitchell *et al.*, (1980) analisaram os efeitos da injeção da água do mar para manutenção da pressão dos poços de petróleo na formação de incrustações de carbonato de cálcio e sulfato de bário, propondo uma metodologia para monitorar o efeito dos inibidores de incrustação e a influência no padrão do escoamento e formação das incrustações.

Read e Ringen (1982) utilizaram as técnicas de microscopia e difração de raios X para analisar a composição química das incrustações de carbonato de cálcio, carbonato de estrôncio e sulfato de cálcio e a extensão dos danos causados por sua deposição.

Lindlof e Stoffer (1983) analisaram amostras de água produzida de diferentes poços e alimentaram um banco de dados de um *software* que por meio de técnicas de programação linear, comparava o resultado das amostras com dados previamente conhecidos para indicar a deposição de incrustações de sulfato de cálcio e estrôncio. Os resultados foram posteriormente comparados com inspeções nos poços estudados.

Bezerra *et al.*, (1990) utilizaram a microscopia de varredura eletrônica para analisar a deposição de incrustações de sulfato de bário e estrôncio e assim avaliar a eficiência de inibidores de incrustação injetados pelo método *squeeze*.

Wat *et al.*, (1992) determinaram a taxa de crescimento de cristais de sulfato de bário em uma solução supersaturada de ácido sulfúrico e cloreto de bário. O processo de deposição da incrustação foi monitorado por espectroscopia de absorção atômica, através da análise da concentração de cátions (Ba^{2+}).

Allaga *et al.*, (1992) utilizaram a tomografia computadorizada para rastrear os precipitados de sulfato de bário e cálcio, na forma de soluções supersaturadas, ao longo de uma seção de teste composta por um duto de alumínio, com o objetivo de avaliar sua precipitação/dissolução mediante o aumento da pressão do escoamento no duto.

Astuto (1995) aplicou a técnica de transmissão de raios gama à inspeção de dutos de pequenos diâmetros com objetivo de avaliar a integridade das paredes dos dutos em relação à espessura e presença de corrosão. Embora não considerasse condições mais realísticas em relação à presença dos fluidos (óleo, água e gás) o resultado demonstrou a eficiência da técnica e serviu como base para desenvolvimento de novos estudos das incrustações, por meio de técnicas nucleares.

Gouveia (2000)a, baseando-se no estudo de Astuto (1995), realiza um estudo de inspeção de dutos aplicando a técnica de transmissão gama, substituindo os detectores de NaI(Tl) por um conjunto de mini detectores de CsI(Tl) com fotodiodos, resultando em maior praticidade, consequência da menor dimensão do detector aplicado e facilidade operacional.

Gouveia (2000)b, aplicou a técnica do espalhamento Compton para caracterização de materiais transportados em dutos através de uma seção de teste. A técnica mostrou-se eficiente na identificação de materiais e, embora o autor não mencione a inclusão de incrustações presentes na indústria petrolífera nas simulações realizadas no estudo.

McElhiney *et al.*, (2001) estudaram a precipitação do sulfato de bário em reservatórios com inundação de água do mar com altas e baixas concentrações de íons de bário, por meio de experimentos com um sistema de *coreflooding*, evidenciando a ocorrência da precipitação deste tipo de incrustação mesmo nos casos em que o teor de Ba^{2+} na água do mar era relativamente baixo. O estudo representou o primeiro passo para geração de dados experimentais para suprir um simulador matemático para prever a taxa de propagação do sulfato de bário e tempo de ruptura do reservatório.

Moghadasi *et al.*, (2002) desenvolveram um modelo matemático para descrever o movimento e deposição de particulados na formação das incrustações de sulfato de cálcio, bário e estrôncio. A validação do modelo foi feita pela obtenção de dados experimentais através de uma seção de teste constituída basicamente de uma bomba, um tanque e uma tubulação de aço inoxidável, onde o sistema de aquisição de dados consistiu de duas placas conversoras conectadas a um computador, que registrava as variações de temperatura e pressão de um termopar e um transdutor de pressão, respectivamente.

Abu-Khamsin *et al.*, (2005) desenvolveram uma equação geral da taxa de reação para a formação de incrustações de CaSO_4 , onde um sistema de *coreflooding* foi utilizado para obtenção dos dados experimentais através da variação de pressão, temperatura, velocidade e concentração dos íons da solução. A análise da deposição dos cristais de CaSO_4 foram realizadas com a técnica de microscopia de varredura eletrônica.

Carneiro (2006) realiza um estudo aplicando a técnica de transmissão gama na inspeção de dutos e colunas industriais, utilizando uma fonte de Cs-137 e um detector cintilador NaI(Tl). Os resultados mostram a eficiência da metodologia proposta em determinar grandes obstruções de areia em dutos flexíveis. Embora o autor apresente em sua conclusão, dificuldades relativas à discriminação entre a água e óleo transportados, devido a pequena diferença entre as contagens e incertezas estatísticas obtidas, o resultado que apresenta dos testes em condições subaquáticas revela que a adequabilidade da técnica em condições industriais relativas à extração de petróleo.

Garcia (2010) apresenta um estudo de caracterização de incrustações encontradas na indústria petrolífera utilizando técnicas atômicas e nucleares, pela obtenção de perfis e imagens bidimensionais, representando a distribuição elementar em seções de amostras das incrustações. A qualificação das incrustações foi realizada por microfluorescência de raios X e a quantificação através de radiografia computadorizada e transmissão da radiação gama. O resultado evidencia a presença de estrôncio, bário, cálcio e ferro em todas as amostras de incrustações analisadas.

Beserra *et al.*, (2012) realizaram um estudo com o objetivo de determinar diversos perfis de incrustação de BaSO_4 em dutos de transporte de petróleo, com diferentes condições de deposição e diferentes fluidos transportados, que foram simulados com o código MCNP5. As simulações foram validadas utilizando um sistema de perfilagem

por transmissão gama. O estudo gerou um extenso banco de dados de perfis de transmissão gama para dutos de ferro, contendo incrustações com deposição concêntricas e excêntricas com diversos valores de espessura e diferentes fluidos (gás, óleo e água) no interior do duto.

Oliveira *et al.*, (2014) aplicaram a técnica de transmissão gama para determinação da espessura de incrustações de BaSO₄ em dutos utilizados na indústria petrolífera, com uma fonte de Cs-137 e um detector cintilador NaI(Tl). Os resultados mostram adequabilidade da técnica na determinação das espessuras. Os autores destacam ainda o baixo impacto da técnica, em comparação com a radiografia industrial, pois todos os testes foram realizados em uma área controlada de 1 metro de diâmetro, não impactando em outras atividades da planta. Além disso, ressalta-se a possibilidade do uso da técnica para avaliar a eficiência de inibidores de incrustações utilizados.

Soares (2014) baseando-se na técnica de transmissão gama propôs um sistema de inspeção em dutos de saída de poços de petróleo, utilizando robôs submarinos. A realização das medidas contou com um detector cintilador CsI com fotodiodo PIN (junção p-i-n) e um sistema de eletrônico composto de uma fonte de alimentação, amplificador, analisador monocanal e contador. A seção de teste era composta por um duto de aço carbono, retirado do campo, com deposições de BaSO₄ excêntricas.

Teixeira *et al.*, (2018) desenvolveram uma metodologia para predição de espessura de incrustações de BaSO₄ em dutos de transporte de petróleo utilizando redes neurais artificiais (RNAs). Os dados para treinamento da RNA foram obtidos por meio de simulações com o código MCNPX, onde três detectores NaI(Tl) registravam as contagens de uma fonte Cs-137 nos casos de deposição concêntrica e excêntrica das incrustações. Os resultados confirmam a viabilidade da metodologia proposta, descartando a necessidade de obtenção de informações internas do sistema duto-fluido-incrustação.

Salgado *et al.*, (2021) desenvolveram uma metodologia para predição das espessuras máximas de incrustações excêntricas de BaSO₄ presentes em um escoamento anular trifásico (óleo, água e gás) com o uso de uma rede neural artificial multicamadas (MLP). Os dados para Treinamento, Teste e Validação da MLP foram obtidos por meio de simulações com o código MCNP6, onde três detectores NaI(Tl) de espalhamento posicionados a 120°, ao longo do duto que registravam as contagens de uma fonte de

Cs-137. Os resultados mostram que em mais de 90% dos casos simulados, a RNA foi capaz de prever a espessura máxima das incrustações excêntricas com erros relativos menores que 10%, sem a necessidade de informações específicas do escoamento trifásico. Este estudo serviu de base para o desenvolvimento deste trabalho.

CAPÍTULO II

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Neste capítulo estão descritos os conceitos teóricos necessários para um melhor entendimento deste trabalho. Abordando os seguintes temas: fundamentos do escoamento multifásico, incrustações de carbonato de cálcio, fundamentos da radiação, modelagem matemática por meio do código de MCNP e Redes Neurais Artificiais.

2.1 FUNDAMENTOS DO ESCOAMENTO MULTIFÁSICO

A diferença fundamental entre escoamentos monofásicos e multifásicos é a existência de um padrão de escoamento para este último. Tal termo refere-se à configuração geométrica do líquido e do gás dentro do tubo, cuja diferença na distribuição espacial da interface líquido - gás, resulta em diferentes características, como a distribuição da velocidade. Ademais, o padrão existente está condicionado a diversas variáveis (SHOHAM, 2006), a saber:

- i) Parâmetros operacionais, como os fluxos de líquido e gás no sistema.
- ii) Variáveis geométricas, incluindo o diâmetro da tubulação e seu ângulo de inclinação.
- iii) As propriedades físicas das duas fases, como densidade, viscosidade e tensão superficial.

Embora tenham sido caracterizados por vários pesquisadores, existem divergências quanto a terminologia empregada para os padrões de escoamentos bifásicos. (TODREAS; KAZIMI, 1993). Sendo as mais comumente aceitas descritas nas seções de 2.1.1 e 2.1.2.

2.1.1 Padrões de escoamento horizontal

Na configuração horizontal, os padrões de escoamento são classificados em estratificado, intermitente, anular e bolhas dispersas (SHOHAM, 2006). Conforme ilustrado na [figura 1](#).

i) Estratificado: ocorre quando as vazões são relativamente baixas, para ambas as fases, que são separadas pela ação da gravidade. Assim, a fase líquida escoar na parte inferior da tubulação e a fase gasosa na parte superior. Este padrão de escoamento subdivide-se ainda em estratificado liso (*Stratified-Smooth*) e estratificado ondulado (*Stratified-Smooth*). O estratificado liso é caracterizado por uma interface lisa enquanto o ondulado, associado às vazões relativamente mais altas da fase gasosa, é definido por uma interface que apresenta ondas.

ii) Intermitente: caracterizado pela alternância entre as duas fases. A fase líquida que preenche toda a área de seção transversal da tubulação, em forma de bolhas alongadas ou pistões - que nomeiam os padrões em que se divide o padrão intermitente - separadas por pequenas áreas preenchidas pela fase gasosa. Ainda na fase líquida evidencia-se uma camada estratificada que escoar na parte inferior da tubulação, a uma velocidade inferior à velocidade da fase líquida formada pelas bolhas alongadas ou pistões. Tanto o padrão pistonado quanto o tamponado apresentam o mesmo comportamento quanto ao mecanismo de fluxo. O padrão tamponado é considerado o caso limite do padrão pistonado, pois a fase líquida é livre de bolhas do gás, quando a velocidade da fase gasosa é relativamente baixa. Com aumento desta velocidade e a presença de bolhas da fase gasosa no vórtice formado na fase líquida ocorre a transição para o padrão pistonado.

iii) Anular: padrão de escoamento caracterizado por altas velocidades da fase gasosa em relação à fase líquida. O gás preenche grande parte da área de seção transversal da tubulação, podendo arrastar gotículas da fase líquida, que forma um pequeno filme nas paredes da tubulação. A interface é altamente ondular, resultando em grandes tensões de cisalhamento. O filme líquido na parte inferior da tubulação é, geralmente, mais espesso que na parte superior, a depender das velocidades relativas entre as fases. O escoamento anular possui uma subdivisão: o anular alongado. Sua característica principal são ondas sobrepostas ao filme líquido, que se movem com velocidade menor que a fase gasosa.

iv) Bolhas dispersas: para altas velocidades da fase líquida em relação à fase gasosa, a fase líquida representa a maior parte do escoamento, no qual estão dispersas pequenas bolhas do gás. A transição para este padrão é definida pela condição onde bolhas estão suspensas no líquido. E também, quando bolsões de gás que ao chocar-se contra a parede superior da tubulação são destruídos, resultando em uma concentração maior de bolhas nas proximidades da parte superior da tubulação. A dispersão uniforme das bolhas em toda área de seção transversal da tubulação está relacionada à altas

velocidades de escoamento da fase líquida. Neste padrão, as velocidades das duas fases são iguais, logo o escoamento é considerado homogêneo, ou seja, o escorregamento entre as fases é nulo.

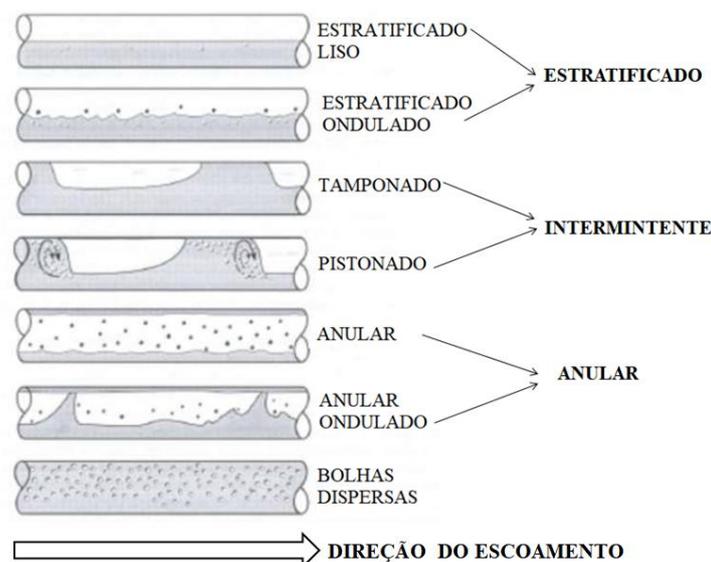


Figura 1 - Ilustração dos padrões de escoamento horizontal (SHOHAM, 2006) (Adaptado).

2.1.2 Padrões de escoamento vertical

No escoamento vertical o padrão estratificado não está presente e um novo padrão é observado, o agitado. Então, nesta classe são observados os padrões mostrados na figura 2, denominados: bolhas dispersas, pistonado, agitado e anular (SHOHAM, 2006).

i) Bolhas dispersas: similar ao escoamento horizontal, ocorre para maiores velocidades relativas da fase líquida, na qual estão dispersas bolhas da fase gasosa. As bolhas escoam junto com o líquido e não ocorre escorregamento entre as fases, assim o escoamento é considerado homogêneo.

ii) Pistonado: caracterizado por possuir simetria axial. Grande parte da fase gasosa possui a forma de bolhas alongadas, denominadas “Bolhas de Taylor” cujos diâmetros aproximam-se do diâmetro da tubulação. Logo, o escoamento pistonado consiste de sucessivas bolhas de Taylor e pistões de líquido, além de um pequeno filme líquido entre as bolhas e a parede da tubulação. O filme líquido é caracterizado por escoar em sentido contrário ao escoamento. Esta pequena camada, ao penetrar no pistão líquido cria uma zona aerada por pequenas bolhas.

iii) Agitado: particularizado pelo movimento oscilatório das fases líquida e gasosa. O padrão agitado se assemelha ao pistonado, porém com uma aparência mais caótica, onde

não estão definidos limites precisos entre as duas fases. Este padrão ocorre para altas velocidades relativas da fase gasosa. Os pistões de líquido se tornam menores, quando empurrados pela fase gasosa na direção contrária ao escoamento, onde se fundem com outros pistões líquidos.

iv) Anular: semelhante ao escoamento anular horizontal, neste escoamento a fase gasosa escoar em alta velocidade no centro da tubulação com pequenas gotículas de líquido que são arrastadas da fina camada que ocupa as paredes da tubulação. A estrutura da interface é ondulada e a fase líquida nas paredes da tubulação considerada uniforme.

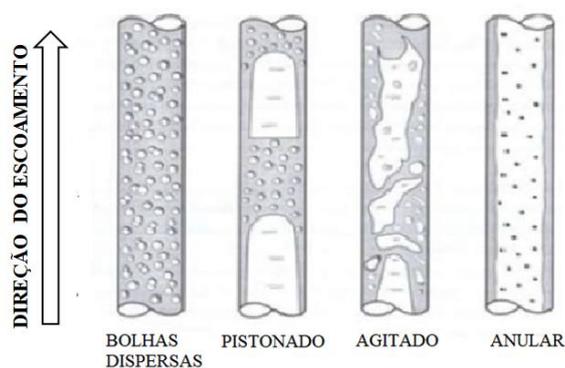


Figura 2 - Ilustração dos padrões de escoamento vertical (SHOHAM, 2006) (Adaptado).

Na indústria petrolífera, o padrão esperado para um reservatório típico é a presença de uma vazão de produção de óleo, gás e água. Assim, os padrões listados acima são encontrados em várias etapas do processo. Padrões verticais são encontrados desde a extração dos fluidos da rocha reservatório, enquanto os horizontais correspondem ao escoamento na superfície, que compreende o deslocamento da cabeça do poço até o vaso separador (TRIGGIA *et al.*, 2004).

2.2 INCRUSTAÇÕES

Incrustações são precipitados formados por composto inorgânicos, orgânicos e água, que ocorrem devido à saturação desta solução em decorrência, principalmente, das mudanças termodinâmicas e reações químicas (KAMAL *et al.*, 2018). Sendo consequência direta dos processos de formação e extração do petróleo e gás natural, que estão descritos no ANEXO A. A figura 3 mostram tubulações com incrustação

concêntrica e uma com deposição excêntrica, onde é possível verificar uma significativa redução no diâmetro do escoamento.

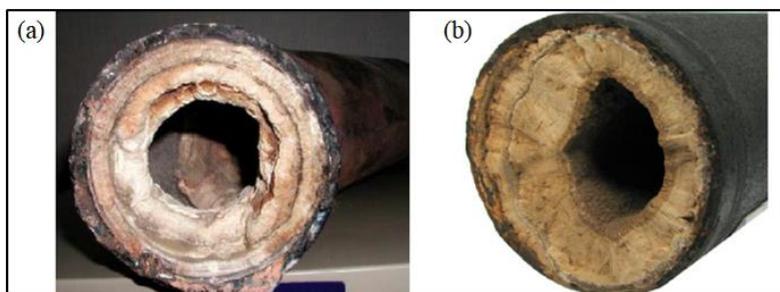


Figura 3 - Tubulação com incrustação de CaCO_3 : (a) Concêntrica (CASTRO, 2015) e (b) Excêntrica (AQUATEKPRO, 2021).

2.2.1 Incrustações Carbonáticas

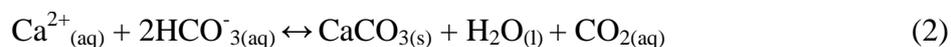
A deposição de incrustações depende de fatores como temperatura, pressão, equilíbrio da reação química, evaporação, pH, forças iônicas. Nos campos de extração de petróleo e gás, incrustações de carbonatos, sulfatos, sulfetos e óxidos são mais comuns (KAMAL *et al.*, 2018). No entanto, neste trabalho apenas a incrustação de carbonato de cálcio é investigada. Considerada o tipo mais frequentemente encontrado neste grupo, pode surgir na forma de calcita – mais recorrente – vaterita e aragonita, em comparação com as incrustações de carbonato de magnésio (MgCO_3), bário (BaCO_3), estrôncio (SrCO_3) (KAMAL *et al.*, 2018).

A presença do carbonato de cálcio nas rochas reservatório de petróleo e gás é resultado de um processo de cimentação, ou seja, precipitação química de várias substâncias (sílicas, carbonatos, óxidos e sulfetos) preenchendo os poros das rochas (TEIXEIRA, 2016). Dentro do reservatório, bactérias que agem nas fontes de matéria orgânica formando ácido carbônico, responsável pela dissolução do carbonato de cálcio. O produto dessa reação, mostrada pela equação 1 é o bicarbonato de cálcio solúvel (KUMAR *et al.*, 2018).



A deposição do carbonato de cálcio é determinada pelo equilíbrio químico entre o CO_2 presente na água e os íons de cálcio e bicarbonato de cálcio. Durante o processo de

extração do petróleo, a redução da pressão, com conseqüente aumento da temperatura, desloca o CO_2 dissolvida na água para as fases de óleo e gás, alterando o pH da solução. Esse conjunto de fatores reduz a solubilidade em relação ao carbonato, causando sua precipitação (KUMAR *et al.*, 2018). A equação 2 explicita a reação de formação do carbonato de cálcio.



2.2.1.1 Mecanismos de Formação de Incrustações

A formação de incrustações é um fenômeno complexo. Inicialmente, a precipitação depende da saturação da solução, ocorrendo assim que a concentração de cátions e ânions excede seu limite de saturação e a solução se torna supersaturada (KUMAR *et al.*, 2018). A saturação pode ser medida pela solubilidade, que determina a quantidade máxima em que um soluto pode ser dissolvido em um solvente, dependendo de condições como pressão, temperatura e pH. A figura 4 mostra como a solubilidade de diversos tipos de incrustações carbonáticas é inversamente proporcional ao aumento da temperatura da solução.

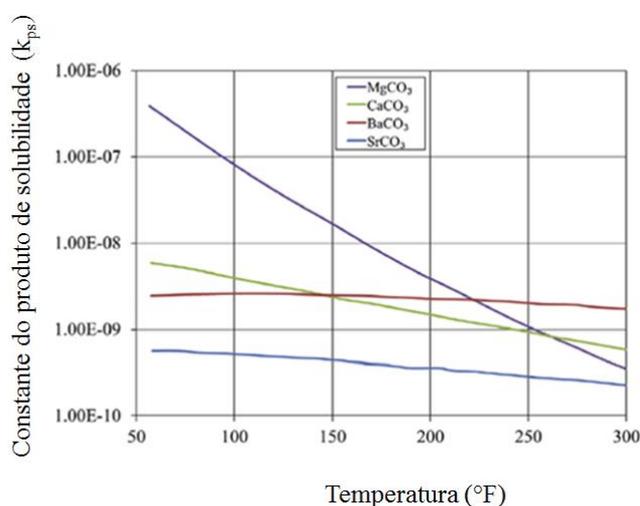


Figura 4 - Variação do produto de solubilidade constante de diferentes tipos de incrustações carbonáticas com a temperatura da solução (KAMAL *et al.*, 2018) (Adaptado).

Seguida da supersaturação da solução, pares de íons são formados na fase de agregação, pela colisão de cátions Ca^{2+} e ânions CO_3^{2-} , que atuam como centros de nucleação, formando micro cristais. Existem dois tipos de nucleação, a homogênea, na qual a nucleação ocorre no fluido dentro da tubulação e pode ser transportada por este, sem

que haja sua deposição em equipamentos e superfícies. Por outro lado, a nucleação heterogênea ocorre na presença de substâncias que acabam sendo fatores determinantes para sua deposição, como partículas em suspensão provenientes de corrosão, juntas e soldas favorecendo a formação dos cristais e sua adesão à superfície (KUMAR *et al.*, 2018).

A partir da nucleação ocorre o crescimento de cristais que posteriormente irão se fundir. O crescimento contínuo através da adsorção de íons de incrustação adicionais na solução define esta última etapa, a aglomeração, onde as incrustações começam a se formar nas superfícies de tubulações e equipamentos (KUMAR *et al.*, 2018).

2.2.1.2 Previsão da Ocorrência Incrustações

Os modelos matemáticos para previsão da ocorrência de incrustações mais encontrados na literatura baseiam-se na termodinâmica e cinética da reação (KUMAR *et al.*, 2018). Nos modelos termodinâmicos, o princípio da energia livre de Gibbs é a base para afirmar se a reação é viável ao correlacionar a transformação de energia entre reagentes e produtos dadas pelas equações 3a e 3b (OLAJIRE, 2015).

$$K_{sp}^0(MX_{(s)}) = m_{MX}^2 \cdot \gamma_{M^+} \gamma_{M^-} \quad (3a)$$

$$\ln K_{sp}^0 = \frac{-\Delta G^0}{RT} \quad (3b)$$

Onde:

K_{sp}^0 - produto de solubilidade do cristal MX ;
 m - concentração do soluto ($\text{mol} \cdot \text{Kg}^{-1}$);
 γ - concentração de atividade do soluto ($\text{mol} \cdot \text{Kg}^{-1}$);
 M^+ , M^- - íons do cristal;
 ΔG^0 - variação da energia livre de Gibbs (J);
 T - temperatura (K);
 R - constante universal dos gases ($\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$).

Modelos cinéticos baseiam na reação de saturação da solução, através da qual é definido o índice de saturação (IS), grandeza que determina a força da precipitação, e está explicitado pela equação 4.

$$IS = \log_{10} \frac{(a_i^{v+})(a_j^{v-})}{K_{psij}} = \log_{10} \frac{([m_i]^{v+}[m_i]^{v-})(y_i^{v+}y_j^{v-})}{K_{psij}} \quad (4)$$

Onde:

v^+ , v^- - carga dos íons;
 a_i – atividade química do cátion i (mol.L^{-1});
 a_j – atividade química do ânion j (mol.L^{-1});
 y_i – coeficiente de atividade química do cátion i;
 y_j – coeficiente de atividade química do ânion j;
 m_i – molaridade do cátion i (10^{-3}mol.L^{-1});
 m_j – molaridade do ânion j (10^{-3}mol.L^{-1});
 K_{psij} – produto de solubilidade do composto ij.

O resultado do IS determina três possibilidades:

- i) $IS > 0$, a solução é supersaturada e poderá ocorrer precipitação;
- ii) $IS = 0$, solução saturada ou em equilíbrio, onde haverá precipitação da solução, caso não ocorram mudanças que acarretem na mudança de equilíbrio.
- iii) $IS < 0$, solução subsaturada. A precipitação é improvável e pode ocorrer dissolução.

Ambos os modelos matemáticos têm sido usados para o desenvolvimento de diversos softwares para a determinar a previsão de ocorrência de incrustações, como MULTISCALE, OKSCALE e SCALEGUARD-I (CASTRO, 2015; OLAJIRE; 2015). No entanto, as equações 3 e 4 evidenciam a dependência desses modelos com diversas variáveis específicas do escoamento, como temperatura e pressão, pH da solução, concentração de íons. Assim, a previsão da ocorrência da incrustação depende da determinação específica de vários parâmetros que acabam sendo específicos para cada campo petrolífero e pode variar de acordo com os tipos de operação realizados durante a extração do petróleo e gás natural.

2.2.1.3 Prevenção e Remoção das Incrustações

O mecanismo de prevenção de incrustações é feito através da injeção de inibidores, produtos químicos utilizados para prevenir sua nucleação, crescimento de cristais e deposição. Podem ser injetados continuamente, em superfície ou subsuperfície, a depender do local a ser protegido (KUMAR *et al.*, 2018).

A eficiência dos inibidores é afetada por diversos fatores como pH, temperatura, presença de cátions divalentes e outras características químicas do campo de petróleo, portanto para o resultado esperado seja atingido são necessárias análises específicas, principalmente da água. O método mais utilizado nas instalações petrolíferas é o chamado *squeeze*, onde o fluido é injetado por meio de várias linhas, diretamente no

poço. E, as classes químicas mais empregadas são os policarboxilatos, fosfanatos e sulfanatos (KUMAR *et al.*,2018).

Embora bastante eficazes, nem sempre a injeção de inibidores é capaz de garantir que formação e deposição da incrustação não ocorram. Assim, entram em cena os métodos de remoção.

Tais métodos, classificados como métodos manuais, mecânicos, abrasivos, fusão e químicos. No entanto, devido à alta solubilidade das incrustações carbonáticas em ácidos, o último grupo é normalmente aplicado a estas. A seleção do produto adequado é função da determinação exata da incrustação, suas propriedades físicas e químicas, acessibilidade e relação entre a área da superfície e volume da incrustação. Uma menor espessura acarreta em uma alta taxa de remoção. Os principais produtos utilizados na remoção química estão listados abaixo (KAMAL *et al.*, 2018):

- i) Ácido clorídrico (HCl): muito usado na descalcificação e considerado um dos removedores mais eficientes, pois as incrustações carbonáticas são altamente solúveis em HCl. No entanto, seu uso é limitado por ser altamente corrosivo para aços em geral, além da geração de sulfeto de hidrogênio (H₂S) durante a descalcificação.
- ii) Ácidos orgânicos: uma tentativa de superar as restrições impostas na utilização do HCl, é o emprego dos ácidos orgânicos, dentre eles, ácido acético (CH₃COOH), maleico (C₄H₄O₄), fórmico (CH₂O₂) e cítrico (C₆H₈O₇). As desvantagens encontradas são o custo desses produtos e sua eficiência na dissolução das incrustações carbonáticas em comparação ao HCl, necessitando de operações com um tempo de reação muito maior. Atualmente, para equilibrar as limitações impostas no uso de ambos, uma mistura formada pelos dois tipos de removedores vem sendo proposta.
- iii) Agentes Quelantes: formados por moléculas que possuem grupos de elétrons que realizam ligações covalentes com íons metálicos. Por estas ligações são formadas estruturas estáveis que impedem a interação dos íons metálicos com outros íons da solução. Assim, quelatos estáveis são formados por cátions de metais alcalinos terrosos e as incrustações são removidas. Os agentes quelantes mais utilizados são ácido etilenodiamino tetra-acético (EDTA), ácido N-(hidroxietil) etileno diamina tetra-acético, ácido dietilenotriamina pentacético (DTPA), ácido hidroxietiliminodiacético (HEIDA), entre outros. Embora possuam alto poder de dissolução, alta

biodegradabilidade e baixa taxa de corrosão em aços, possuem uma grande desvantagem ligada a seu custo em relação aos ácidos inorgânicos e orgânicos citados.

2.2.1.4 Impacto econômico e socioambiental das incrustações

A formação de incrustações é considerada o maior problema operacional e causador de danos nos campos de petróleo e gás (OLAJIRE, 2015). A queda da pressão durante extração do petróleo e gás inicia uma sequência de eventos que culmina na formação dos precipitados, podendo ocorrer sua deposição nas tubulações ou podem escoar com o fluxo extraído.

Portanto, além da obstrução nestas tubulações, pode transcorrer a deposição em outras zonas de baixa pressão do escoamento, como válvulas, curvas. Ademais, o acúmulo de incrustações em trocadores de calor reduz a área de troca térmica dos mesmos, reduzindo a eficiência de sistemas de refrigeração e aquecimento. A figura 5 evidencia o problema das incrustações em trocadores de calor, revelando a redução significativa do diâmetro dos tubos.

Incrustações em bombas e compressores podem acarretar na perda desses equipamentos, normalmente caros e de extrema importância operacional, visto que a eficiência do método químico de remoção da incrustação apresenta dependência com acessibilidade à mesma.

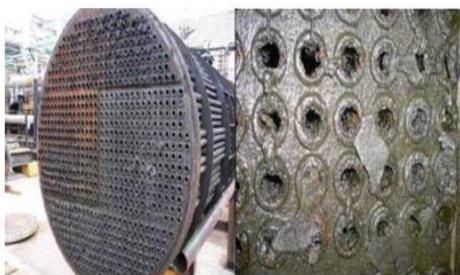


Figura 5 - Incrustações em trocadores de calor (CASTRO, 2015).

Todos esses problemas podem levar a paradas não programadas na produção de petróleo e gás (OLAJIRE, 2015), logo, a monitoração não apenas do surgimento e evolução da deposição da incrustação, mas também da eficiência do uso dos inibidores é uma tarefa de extrema importância.

Do ponto de vista socioambiental, operações para remoção da incrustação com produtos químicos necessitam de cuidados sob o ponto de vista de segurança e saúde ocupacional, além dos impactos no tratamento e descarte principalmente dos ácidos.

Não obstante, algumas incrustações que embora não são objeto de estudo desse trabalho, como carbonato de estrôncio e sulfato de bário podem conter elementos radioativos, como rádio e polônio, necessitando de medidas específicas de proteção radiológica, tanto nas operações de remoção quanto no gerenciamento dos rejeitos gerados (CARVALHO, 2019).

2.2.1.5 Cálculo da espessura das incrustações

Para o cálculo de espessura de incrustações é utilizada a técnica de transmissão gama, considerado o sistema duto-fluido-incrustação como um absorvedor de n camadas. Neste contexto, um detector e uma fonte, posicionados diametralmente opostos, são utilizados para registrar as contagens relativas à radiação gama que atravessa o sistema duto-incrustação-fluido.

A atenuação do feixe incidente I_0 da fonte radioativa será diferente para cada material dentro do duto, assim ao variar a posição do conjunto fonte-detector, conforme indicado na [figura 6](#), executando uma varredura de seu diâmetro, é possível obter um perfil de densidades do duto. Ademais, é possível observar que para cada posição, o caminho da radiação na incrustação é diferente, aumentando com a altura do passo de varredura do sistema fonte-detector, em contrapartida, o caminho da radiação no fluido diminui até que a intensidade final do feixe seja influenciada apenas pelas interações com a incrustação e o duto.

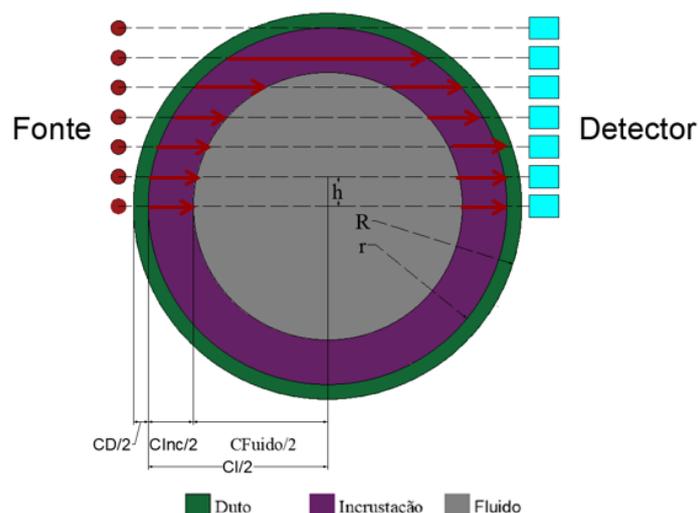


Figura 6 - Geometria de medição para o cálculo do caminho da radiação na incrustação (CARVALHO, 2021).

Onde:

R – raio externo do duto;

r – raio interno do duto;

h – altura do passo de varredura do sistema fonte-detector, definido pelo raio de colimação da fonte;

C_D – caminho da radiação na parede do duto para a posição i da fonte;

C_{INC} – caminho da radiação na incrustação para a posição i da fonte;

C_{FLUIDO} – caminho da radiação no fluido para a posição i da fonte;

C_I – caminho da radiação na incrustação e fluido para a posição i da fonte;

Desse modo, a equação de Beer-Lambert pode ser reescrita, conforme mostra a equação

5.

$$I = I_0 \cdot e^{-[(\mu_D C_D) + (\mu_F C_F) + (\mu_I C_I)]} \quad (5)$$

Onde:

I- intensidade do feixe emergente (fótons. $\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$);

I_0 - intensidade do feixe incidente (fótons. $\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$);

μ - coeficiente de atenuação linear dos materiais absorvedores (D - duto, F - fluido e I- incrustação) (cm^{-1});

C – caminho atravessado pela radiação nos materiais absorvedores (D - duto, F - fluido e I - incrustação) (cm).

O cálculo do caminho da radiação através de cada material absorvedor para cada posição i do conjunto fonte detector é realizado por meio de relações trigonométricas, estabelecidas a partir da figura 6. Tais relações são estão demonstradas nos triângulos retângulos na figura 7.

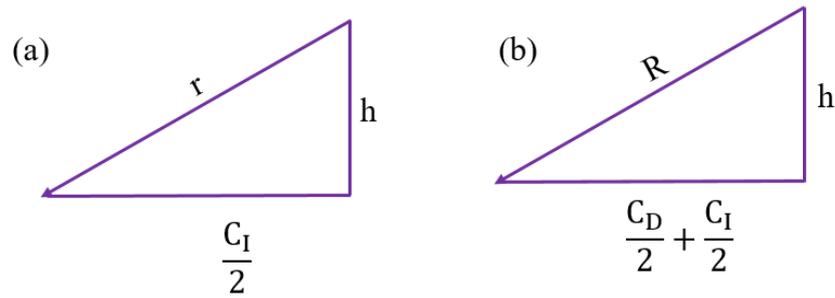


Figura 7 - Relações trigonométricas para o cálculo do caminho da radiação no: (a) fluido e incrustação e (b) duto.

Através da aplicação do Teorema de Pitágoras no triângulo da figura 7 (a) é possível obter o caminho percorrido pela radiação através do fluido e na incrustação é dado pela equação (6).

$$C_{Ii} = 2 \left[\sqrt{(r^2 - h^2)} \right] \quad (6)$$

O caminho da radiação na parede do duto é dado pela equação 7, utilizando-se novamente o Teorema de Pitágoras, no triângulo da figura 7 (b).

$$C_{Di} = 2 \left[\sqrt{(R^2 - h^2)} \right] - \left[\sqrt{(r^2 - h^2)} \right] \quad (7)$$

Assim, o caminho da radiação através do fluido pode ser obtido com a equação 8.

$$C_{Fi} = C_{Ii} - C_{INci} \quad (8)$$

Realizando a substituição das equações 6 e 7 na equação 8, tem-se o caminho percorrido na radiação na incrustação, de acordo com a equação 9.

$$C_{INi} = \frac{\ln(k) + \mu_D C_D + \mu_F C_I}{-\mu_{INC} + \mu_F} \quad (9)$$

Onde:

K – razão entre as intensidades I e I_0 do feixe transmitido;

$\mu_{D,F,INC}$ – coeficiente de atenuação linear do duto, fluido e incrustação, respectivamente (cm^{-1});

Com o resultado obtido pela equação (9), é possível iniciar o cálculo do segmento AB, que representa, na figura 8 a espessura da incrustação concêntrica e excêntrica, com as seguintes equações:

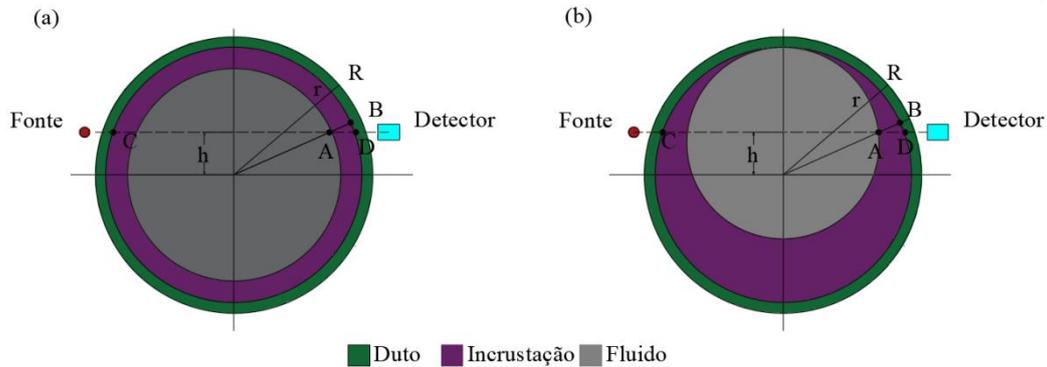


Figura 8- Espessura da definida pelo segmento de reta AB: (a) concêntrica e (b) excêntrica (CARVALHO, 2021).

Onde:

CD - segmento de reta equivalente ao caminho da radiação no fluido e incrustação (cm);
AD - segmento de reta equivalente à metade do caminho da radiação na incrustação (cm).

AB - segmento de reta correspondente à espessura da incrustação (cm);

r - raio interno do duto (cm);

h - altura do passo de varredura do sistema fonte-detector, definido pelo raio de colimação da fonte;

Para o ponto A, dado pelas coordenadas x_a que é calculada através das equações 10a e 10b e y_a que é dado diretamente pela altura h.

$$x_a = \frac{CD}{2} - \frac{AD}{2} \quad (10a)$$

$$x_a = \left[\sqrt{r^2 - h^2} \right] - \frac{C_{INC}}{2} \quad (10b)$$

O ponto B pode ser calculado através de um sistema consistindo das equações 11 e 12.

$$r^2 = x_b^2 + y_b^2 \quad (11)$$

$$y_b = mx_b \quad (12)$$

Logo, a espessura da incrustação concêntrica é dada pela equação 13.

$$AB = \sqrt{(x_a - x_b)^2 + (y_a - y_b)^2} \quad (13)$$

2.3 FUNDAMENTOS DA RADIAÇÃO

A maneira como a radiação gama interage e é atenuada por diversos materiais permite que seja utilizada em várias aplicações. Neste trabalho, o uso de uma fonte de raios gama e detectores cintiladores de NaI(Tl) são usados na determinação de espessuras de incrustações de carbonato de cálcio na indústria petrolífera, logo os conceitos importantes acerca da radiação gama e sua detecção estão descritos a seguir.

2.3.1 Interação da radiação gama com a matéria

As características da radiação gama que influenciam em suas interações são, principalmente, ausência de carga e massa de repouso. As interações de interesse da radiação gama com a matéria para este estudo, descritas nessa seção são o efeito fotoelétrico e o efeito Compton. A produção de pares está descrita no Anexo B.

2.3.1.1 Efeito Fotoelétrico

Consiste na interação na qual o fóton incidente transmite toda a energia a um elétron que é expelido da camada eletrônica, como mostrado na [figura 9](#), com uma energia cinética dada pela energia do fóton incidente menos a energia de ligação do elétron com sua camada original (KNOLL, 2000), conforme a equação 14.

$$E_e = h\nu - E_b \quad (14)$$

Onde:

E_e - energia cinética do elétron (eV);

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

E_b - energia de ligação do elétron ao orbital (eV).

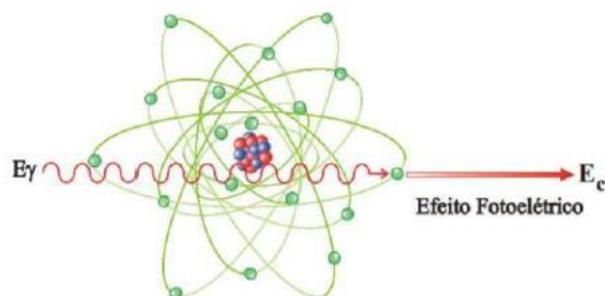


Figura 9 - Representação do Efeito Fotoelétrico (TAUHATA *et al.*, 2003).

A vacância criada pela emissão do elétron é preenchida após um rearranjo dos elétrons. Com o deslocamento de um elétron de uma camada mais externa para uma camada mais interna a energia de ligação excedente é liberada na forma de um raio X característico ou elétron Auger (TAUHATA *et al.*, 2014).

O efeito fotoelétrico é predominante para raios gama de baixas energias e elementos de elevado número atômico. E sua probabilidade máxima de interação acontece quando a energia do fóton é igual à energia de ligação do elétron. As interações ocorrem com maior frequência na camada eletrônica K – acima de 80% (TAUHATA *et al.*, 2014).

2.3.1.2 Efeito Compton

Definido pela transferência parcial de energia entre um fóton e um elétron do meio absorvedor. O fóton é desviado em relação à direção original do fóton incidente, de acordo com a figura 10. O elétron considerado inicialmente em repouso é conhecido como elétron de recuo (KNOLL, 2000).

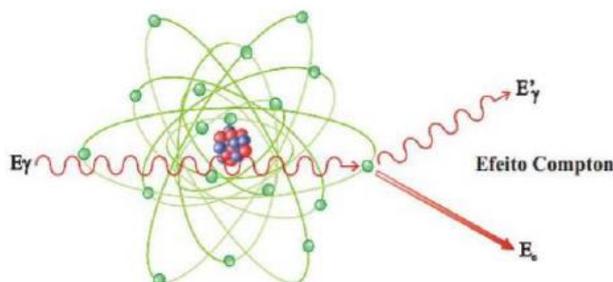


Figura 10 - Representação do Efeito Compton (TAUHATA *et al.*, 2003).

A existência de diversas possibilidades de ângulos de espalhamento estabelece uma ampla faixa de valores para a energia transferida, variando de zero a uma grande fração da energia do fóton incidente. A relação entre a energia transferida e o ângulo de

espalhamento é descrita pela equação 15 e deriva das equações de conservação da energia e do momento (KNOLL, 2000).

$$h\nu' = \frac{h\nu}{1 + \frac{h\nu}{m_0c^2}(1 - \cos\theta)} \quad (15)$$

Onde:

$h\nu'$ – energia do fóton espalhado (keV);

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

m_0c^2 – energia de repouso do elétron (511 keV);

θ – ângulo de espalhamento em relação à direção inicial.

A probabilidade de ocorrência do efeito Compton depende da quantidade de elétrons disponíveis como alvo de espalhamento, aumentando linearmente com o número atômico do material absorvedor. Além disso, nos casos em que a energia de ligação do elétron se torna desprezível em relação à energia do fóton incidente, a probabilidade de ocorrência aumenta significativamente (KNOLL, 2000; TAUHATA *et al.*, 2014).

Um caso particular do espalhamento Compton é denominado efeito Rayleigh. Neste, fótons de baixa energia interagem com elétrons cuja energia de ligação é relativamente alta. Então, o átomo absorve todo o recuo e o fóton incidente praticamente não perde energia, e apenas sua direção é alterada. A probabilidade de ocorrência do efeito Rayleigh aumenta para fótons de baixa energia e altos números atômicos do material absorvedor (TAUHATA *et al.*, 2014).

2.3.2 Atenuação da radiação gama

A relação entre um feixe de radiação γ que incide sobre um material de espessura x e o feixe emergente é exponencial, conforme ilustrado na [figura 11](#). A atenuação do feixe incidente ocorre pelos processos descritos anteriormente, ou seja, parte da radiação gama é absorvida, espalhada ou atenuada. A intensidade do feixe emergente compreende a fração que atravessa o material sem interagir com o mesmo (KNOLL, 2000; TAUHATA *et al.*, 2014).

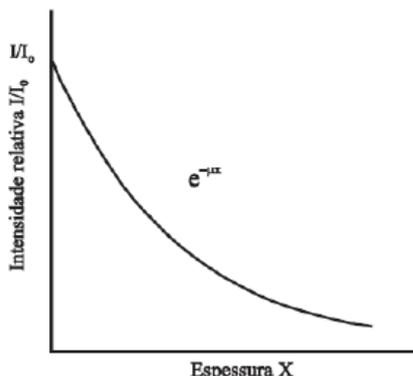


Figura 11 - Atenuação de um feixe de radiação gama por um absorvedor de espessura x (TAUHATA *et al.*, 2014).

Matematicamente, a atenuação da radiação γ é descrita pela equação 16, denominada Lei de Beer-Lambert.

$$I = I_0 e^{-\mu x} \quad (16)$$

Onde:

I - intensidade do feixe emergente (fótons. $\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$);

I_0 - intensidade do feixe incidente (fótons. $\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$);

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

x - espessura do material absorvedor (cm).

2.3.3 Coeficiente de atenuação linear

O coeficiente de atenuação linear exprime a probabilidade de o feixe incidente ser atenuado devido ao efeito fotoelétrico, espalhamento Compton e formação de pares. Logo, é descrito conforme a equação 17, onde são desprezadas as reações fotonucleares e o efeito Rayleigh (TAUHATA *et al.*, 2014).

$$\mu = \sigma + \kappa + \tau \quad (17)$$

Onde:

σ – coeficiente de atenuação linear Compton total (espalhamento e absorção);

κ – coeficiente de atenuação linear do efeito fotoelétrico;

τ – coeficiente de atenuação linear da formação de pares.

A aplicação do coeficiente de atenuação linear é restrita ao fato de que o mesmo varia com a densidade do absorvedor. Então, o coeficiente de atenuação linear em massa, dado pela equação 18, é mais utilizado (KNOLL, 2000).

$$\text{coeficiente de atenuação linear em massa} = \frac{\mu}{\rho} \quad (18)$$

Onde:

ρ - densidade do absorvedor (g.cm^{-3}).

Portanto, é possível reescrever a equação 16 nos termos do coeficiente de atenuação linear em massa, explicitada pela equação 19.

$$I = I_0 e^{-\left(\frac{\mu}{\rho}\right)\rho x} \quad (19)$$

Assim, o produto ρx , conhecido como a espessura da massa do absorvedor se torna um parâmetro importante na determinação de seu grau de atenuação (KNOLL, 2000).

2.3.4 Detectores de NaI (Tl)

Nos materiais inorgânicos, o mecanismo de cintilação depende dos estados de energia determinados pela estrutura cristalina do material. Assim, para um cristal puro de iodeto de sódio, existem níveis de energia onde os elétrons podem circular, a banda de valência, na qual os elétrons estão substancialmente ligados à rede cristalina e a banda de condução, onde os elétrons têm energia suficiente para migrar pelo cristal (TAUHATA *et al.*, 2014).

No momento em que um elétron da banda de valência recebe a energia da radiação γ incidente, ele é excitado e desloca-se para a banda de condução. Nesta banda, desexcita-se, emitindo um fóton de luz visível cuja energia equivale à energia de desexcitação do elétron. Logo, existe a probabilidade de o fóton ser absorvido por um elétron na banda de valência (THAUATA *et al.*, 2014; KNOLL, 2000).

Para gerar fótons de comprimento de onda compatível com a fotomultiplicadora, o material ativador, nesse caso o tálio é inserido no volume ativo do detector criando níveis de energia na banda proibida, denominadas lacunas. Deste modo, o elétron na banda de valência, ao receber a energia do fóton incidente, poderá se desexcitar nestes níveis, emitindo fótons com energia menor, que não serão absorvidos por outros elétrons, permitindo que cruzem o cristal, chegando ao fotomultiplicador (KNOLL,

2000). A figura 12 resume o processo de cintilação para o material inorgânico com ativador.

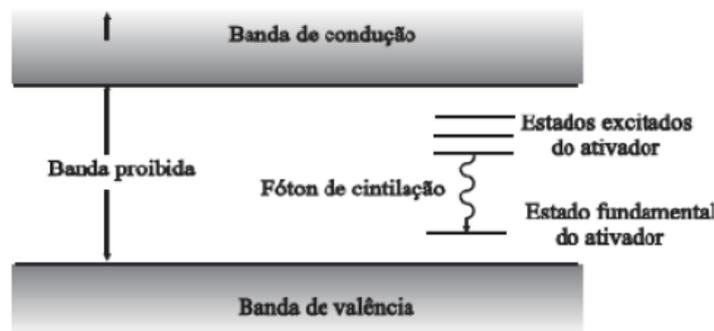


Figura 12 - Níveis de energia de um cristal puro com ativador (TAUHATA *et al.*, 2014)

A característica principal dos detectores de iodeto de sódio é a produção de sinais luminosos de alta intensidade, em comparação com materiais orgânicos. Sendo considerado o material padrão para espectroscopia de raios gama (KNOLL, 2000). O número atômico do iodo ($Z= 53$) relativamente alto garante a absorção fotoelétrica, assegurando alta eficiência de absorção. Além disso, é um material que pode ser facilmente usinado, permitindo a construção de detectores com geometrias específicas (KNOLL, 2000). Ademais, detectores de iodeto de sódio não necessitam de refrigeração. No entanto, suas desvantagens ficam por conta da baixa resolução em energia em comparação com outros detectores, como HPGe, por exemplo. E, também por ser um ser um material higroscópico, o que pode levar a diminuição de sua vida útil, embora seja encapsulado por um invólucro de alumínio que minimiza a probabilidade de absorção de água pelo cristal (KNOLL, 2000). Mais detalhes sobre o processo de detecção nos cintiladores está descrito no ANEXO C.

2.4 O MÉTODO DE MONTE CARLO

O Método de Monte Carlo é um método numérico de simulação estatística. A partir do conhecimento das funções de distribuição de probabilidade são realizadas amostragens aleatórias (BOTELHO, 2018).

O objetivo é reproduzir em um ambiente controlado, o que se passa em uma situação real, que não pode ser obtida facilmente de maneira experimental. Logo, vem sendo vastamente aplicado na área de transporte da radiação. Através de um código

computacional que simula as trajetórias das partículas individuais e os processos pelos quais a radiação interage com a matéria pela geração de número pseudoaleatórios, a partir da distribuição de probabilidade que rege os fenômenos físicos envolvidos (SALGADO, 2010; LANL, 2003).

2.4.1 O Código de Transporte da Radiação MCNP

O MCNP (Monte Carlo N – *Particle*) é um código baseado no Método de Monte Carlo, vastamente utilizado na área do transporte da radiação, que inclui geometria 3D e transporte de energia contínua. Além disso, o código considera o efeito da radiação com a matéria para trinta e quatro tipos diferentes de partículas e uma variedade de fontes radioativas. As aplicações para o código são muitas e estão em constante desenvolvimento, incluindo projeto e blindagem de aceleradores de partículas, reatores nucleares e equipamentos médicos, dosimetria, radiação espacial, transporte de plasma, projeto de detectores e física nuclear (LANL, 2003).

No transporte da radiação podem ser usadas combinações de nêutron-fóton-elétron, nos seguintes modos: somente nêutrons, somente fótons, somente elétrons, nêutron-fóton, fóton-elétron e nêutron-fóton-elétron. Cada partícula é seguida desde sua geração. As distribuições de probabilidade são amostradas aleatoriamente usando dados do transporte para determinar o resultado em cada etapa da “vida” da partícula (LANL, 2003).

Assim, no MCNP quanto maior o número de histórias, maior o conhecimento acerca dos nêutrons, fótons e elétrons. As quantidades de interesse, solicitadas pelo usuário são registradas juntamente com as estimativas da incerteza dos resultados (LANL, 2003).

2.4.2 Estrutura dos Dados de Entrada do MCNP

O arquivo de entrada de dados, *input file*, criado pelo usuário, para posterior leitura pelo MCNP, contém informações sobre o problema a ser tratado, como: especificação da geometria, descrição dos materiais, características da fonte, tipos de respostas desejadas (LANL, 2003). O arquivo de entrada de dados é dividido da seguinte forma:

- i) Cartão de Células (*Cell Card*): abrange a construção da geometria do problema.
- ii) Cartão de superfícies (*Surface Card*): nesta etapa são descritas as formas geométricas que compõem cada célula.
- iii) Cartão de Dados (*Data Card*): contém a descrição dos dados físicos do problema, incluindo cartão de material, cartão MODE, cartão de importância, especificação da fonte, especificação de *Tally* e Cartão de histórias.

No anexo D estão descritos mais detalhadamente os cartões do arquivo de entrada MCNP.

2.4.3 Estrutura dos Dados de Saída do MCNP

O MCNP produz um arquivo de saída com os resultados solicitados pelo usuário no arquivo de entrada. Esse arquivo é denominado *output file*.

2.4.4 Erro Relativo Estimado

Definido como o desvio padrão estimado da média ($s_{\bar{x}}$) dividido pela média estimada (\bar{x}), o erro relativo estimado (R) pode ser utilizado para formar intervalos de confiança sobre a média estimada, permitindo que se faça uma avaliação sobre o resultado verdadeiro. Para um registro bem comportado, o erro relativo estimado será proporcional ao número de histórias (N) (LANL, 2003), de acordo com a equação 20.

$$R \approx \frac{\sqrt{N}}{N} \quad (20)$$

Onde:

R – erro relativo;

N - número de histórias.

Analisando a equação 20 é possível afirmar que para reduzir o erro relativo estimado é necessário aumentar o número de histórias em quatro vezes. A [tabela 1](#) mostra a relação entre os valores de R e a classificação da grandeza.

Tabela 1 - Classificação da Grandeza em função do erro relativo (LANL, 2003).

Valores de R	Classificação da Grandeza
0,5 a 1	Descartável
0,2 a 0,5	Pouco confiável
0,1 a 0,2	Questionável
<0,10	Geralmente digna de confiança, exceto para detectores pontuais
<0,05	Geralmente digna de confiança

2.4.5 Vantagens e desvantagens do MCNP

As principais vantagens do MCNP são (LANL, 2003):

- i) O usuário não necessita de conhecimento prévio de linguagens de programação como FORTRAN, C++, etc. As informações necessárias para estudo do problema, como células, superfícies, informações sobre a fonte, são definidas no arquivo de entrada.
- ii) A maneira como as histórias são analisadas podem ser modificadas pelo usuário de acordo com os comandos que fornecem os *tallies*.
- iii) O arquivo de saída contém um resumo do problema em estudo, permitindo a compreensão da física do transporte de partículas no código e a localização de erros que porventura possam ocorrer.

Como desvantagem pode-se considerar tempo computacional. Uma vez que o número de histórias influencia diretamente no valor do erro relativo estimado, normalmente é necessário um grande número de histórias para que os resultados obtidos sejam confiáveis, resultando em um maior tempo computacional.

2.5 REDES NEURAIAS ARTIFICIAIS

As redes neurais artificiais (RNAs) são máquinas de aprendizado que tentam simular o mecanismo de aprendizagem em organismos biológicos (AGGARWAL, 2018). São constituídas de unidades de processamento simples, com capacidade de armazenar conhecimento obtido experimentalmente (HAYKIN, 2005).

A motivação para os trabalhos com RNAs tem sido o cérebro humano. Considerado um sistema de processamento de informação complexo, não-linear e paralelo, cuja capacidade de organização dos constituintes estruturais – neurônios – na formação de padrões de processamento é mais rápida que os computadores digitais atuais. Assim, as semelhanças entre ambos são (HAYKIN, 2005):

- i) A RNA adquire seu conhecimento ao passar por um processo de aprendizagem. Este procedimento, denominado algoritmo de aprendizagem, tem como função alterar os pesos sinápticos da rede de maneira ordenada para alcançar o objetivo desejado.
- ii) Pesos sinápticos, ou forças de conexão entre neurônios, são usados para armazenamento do conhecimento adquirido.

2.5.1 Neurônio Biológico e Artificial

Com a evolução dos seres vivos e conseqüentemente a multicelularidade, tecidos orgânicos tiveram suas funções aprimoradas. Em paralelo, o sistema nervoso surge como coordenador das atividades dos tecidos e órgãos, apresentando dois componentes principais: os neurônios e as células da neuroglia, sendo esta última formada por diversos tipos celulares que ocupam espaços entre os neurônios, cuja função é atuar na sustentação, nutrição e defesa destes (FURTADO, 2019).

Os neurônios possuem a propriedade de responder prontamente a estímulos através da diferença de potencial elétrico entre as superfícies interna e externa da membrana celular, que se propaga a outros neurônios. Assim, são receptores e integradores de estímulos. São formados por um corpo celular, que contém o núcleo, de onde parte os dendritos – receptores de estímulos – que aumentam a superfície celular, possibilitando receber os impulsos transportados pelos terminais axônicos - emissores de impulsos (FURTADO, 2019).

A transmissão do impulso nervoso entre neurônios ocorre por estruturas denominadas sinapses, que podem ser descritas como locais de contato entre axônio e dendritos ou axônio e o corpo celular de outro neurônio (FURTADO, 2019). O neurônio biológico é mostrado esquematicamente na [figura 13](#).

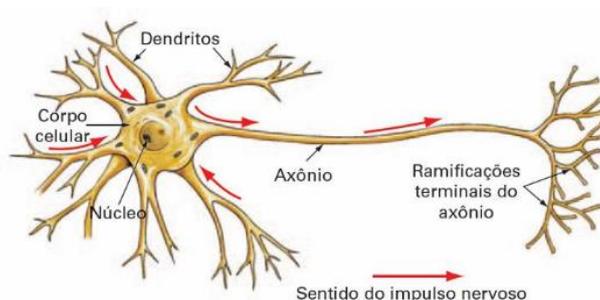


Figura 13 - Ilustração do neurônio biológico (DEEPLARNINGBOOK, 2021).

Do ponto de vista computacional, o neurônio artificial é uma estrutura lógico-matemática que simula a forma, o comportamento e as funções do neurônio biológico. Assim, é possível relacionar, os dendritos às entradas, suas ligações com o corpo artificial estão associadas a um determinado peso, que simula as sinapses. Enquanto o axônio pode ser vinculado à saída (FURTADO, 2019). Os neurônios artificiais são unidade de processamento fundamental para a operação de uma RNA (HAYKIN, 2007).

A figura 14, mostra um modelo não-linear de neurônio. A partir desta, é possível identificar três elementos básicos do modelo neuronal (HAYKIN, 2007):

- i) Conjunto de Sinapses ou elos de conexão: sua principal característica é possuir um peso ou força própria, que pode estar incluso em intervalos que contém valores positivos ou negativos. Um sinal x_1 na entrada da sinapse 1, que está conectada ao neurônio k é multiplicado pelo peso sináptico w_{k1} .
- ii) Somador: realiza a soma dos sinais de entrada, ponderados por suas respectivas sinapses.
- ii) Função de ativação: realiza a restrição da amplitude de saída do neurônio, limitando o intervalo permissível de amplitude do sinal de saída a um valor finito.

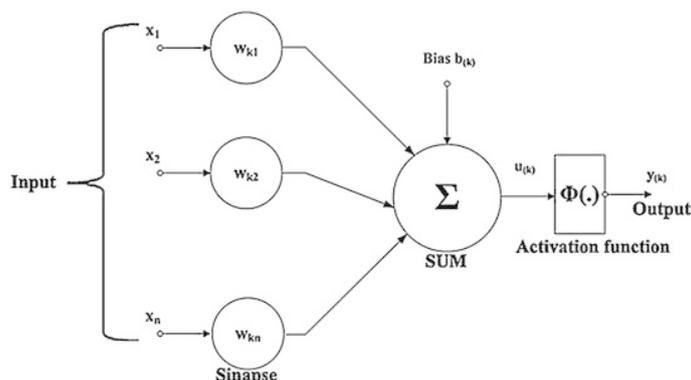


Figura 14 - Modelo não linear de um neurônio (DEEPLARNINGBOOK, 2021).

O modelo da [figura 14](#) também apresenta o bias, cuja função é aumentar ou diminuir a entrada líquida da função de ativação. Sendo considerado um parâmetro externo do neurônio (HAYKIN, 2005). Matematicamente, o neurônio k pode ser descrito pelas equações 21a e 21b.

$$u_k = \sum_{j=i}^m w_{kj}x_j \quad (21a)$$

$$y_k = \varphi(u_k) \quad (21b)$$

Onde:

x_j - sinais de entrada;

w_{kj} - pesos sinápticos do neurônio;

u_k - saída do combinador linear devido aos sinais de entrada;

$\varphi()$ - função de ativação.

y_k - sinal de saída do neurônio.

2.5.2 Redes Neurais Artificiais Multicamadas

Nas RNAs multicamadas (MLPs – *Multi Layer Perceptron*), os neurônios estão organizados em várias camadas, classificadas em camada de entrada, que contém os padrões apresentados à rede; camadas intermediárias, onde grande parte do processamento é realizada e a camada de saída, na qual o resultado do processamento é revelado (ARGGAWAL, 2018). Uma exemplificação da estrutura de uma RNA multicamadas é mostrada na [figura 15](#).

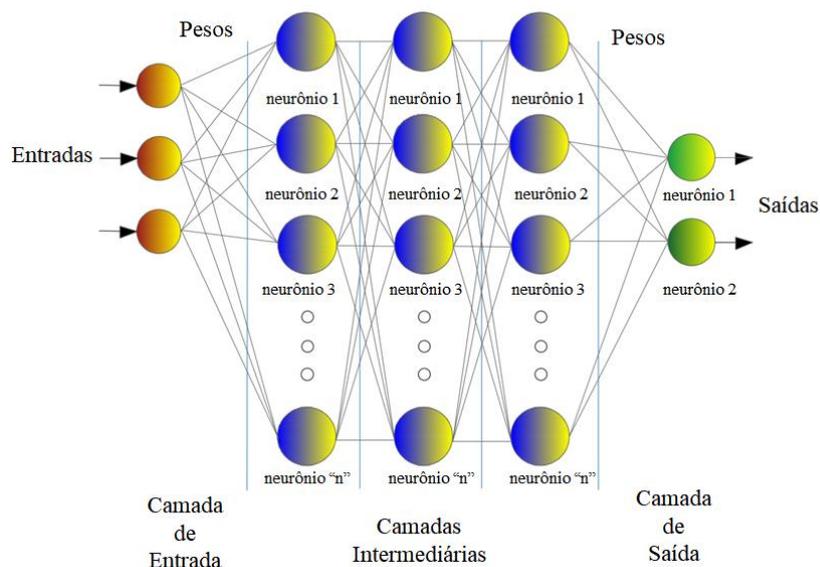


Figura 15 - Arquitetura de uma RNA multicamadas (CARVALHO, 2021).

Este tipo de arquitetura é conhecido como *feedforward*, pois as camadas alimentam umas às outras, na direção da camada de entrada para a saída, assumindo que todos os nós de uma camada estão conectados aos da camada seguinte (ARGGAWAL, 2018).

Embora arquitetura da rede seja fundamental, é através do processo de treinamento a que a mesma estará capacitada para resolver o problema proposto. Os algoritmos de treinamento podem ser divididos em duas classes (FURTADO, 2019):

- i) Treinamento supervisionado: indica à rede a resposta pretendida, a partir de um padrão de entrada. Assim, o erro é ajustado até não existir mais ou ao atingir um valor satisfatório. Normalmente, o algoritmo usado para treinamento supervisionado é o de retropropagação de erro (*backpropagation*).
- ii) Treinamento não supervisionado: neste caso, a saída desejada não é mostrada a rede. Ela, através de um impulso externo, analisa as características relevantes e as classifica de acordo com suas semelhanças, em classes previamente criadas.

2.5.3 Algoritmo de Treinamento *Backpropagation*

No processo de treinamento supervisionado, a rede é alimentada com dados que a permitem exprimir uma determinada resposta. Posteriormente, os pesos das sinapses são corrigidos, a fim de minimizá-los, com base no erro entre a resposta da rede e a resposta

esperada. O treinamento é encerrado, quando um critério de parada, pré-selecionado, é atingido (SALGADO, 2010).

No caso das MLPs, o erro em uma camada é função dos pesos nas camadas anteriores, dificultando sua computação. Assim, a função do algoritmo *backpropagation* é utilizar a regra da cadeia, para determinar o gradiente em termos da soma de produtos de derivadas locais ao longo de vários caminhos até a camada de saída, minimizando o erro entre a saída da rede e a resposta esperada. O treinamento com *backpropagation* possui duas fases (ALGGARAW, 2018):

- i) Fase de avanço: a rede é alimentada com os dados de treinamento, resultando em uma cascata de cálculos entre as camadas, onde são usados os conjuntos atuais de pesos sinápticos. O resultado final é comparado com o esperado e o erro entre eles é computado. A derivada da função do erro é calculada em relação a todos os pesos das camadas.
- ii) Fase de retrocesso: os gradientes calculados em relação a todos os pesos das camadas anteriores são utilizados para atualizar os pesos, na direção da camada de entrada. O objetivo é que esse aprendizado implique na obtenção de um erro cada vez menor.

2.5.4 Validação Cruzada

O método de Validação Cruzada consiste na divisão dos dados que são apresentados à rede. Sua função é impedir que a rede tivesse sua capacidade de generalização diminuída, o que poderia ocorrer durante a fase de treinamento, com a tendência de redução do erro e seu conseqüente ajuste aos dados de treinamento enviados a mesma. Inicialmente, os dados são divididos em treinamento e teste. Na fase de treinamento, a RNA é avaliada frequentemente, em relação aos dois conjuntos, porém a correção dos pesos sinápticos é feita apenas em relação ao conjunto de Treinamento. Sendo o conjunto de Teste utilizado para avaliar a eficiência da RNA, através da verificação da generalização. O terceiro conjunto são os dados de Validação. Sua função é analisar os valores de saída da rede, em relação os erros inferiores aos dados de treinamento, esta etapa é considerada um teste final (SALGADO, 2010).

O desempenho das redes, durante seu treinamento, é feito por métricas de erros, como Erro Médio Quadrado (EMQ), que são aplicadas aos subconjuntos de dados, até que seu

valor seja suficientemente pequeno ou quando a função objetivo se torna estacionária (SALGADO, 2010).

CAPÍTULO III

3 METODOLOGIA

Neste capítulo estão descritas todas as etapas para o desenvolvimento de um modelo matemático para predição das espessuras das incrustações concêntricas e excêntricas de CaCO_3 empregando os códigos MCNPX e MCNP6 e as redes neurais artificiais (RNAs), compreendendo a validação das equações analíticas para o cálculo de espessuras, desenvolvimento de uma geometria de medição para obtenção do conjunto de dados para treinamento supervisionado das RNAs, além de um estudo sobre a influência da variação da composição química dos materiais empregados no modelo proposto, a fim de testar sua adequabilidade para diferentes materiais.

3.1 VALIDAÇÃO DAS EQUAÇÕES ANALÍTICAS

Na seção 2.2.1.5 foram descritas as equações analíticas para o cálculo da espessura da incrustação, que são baseadas no escaneamento do duto, através da variação da posição do sistema fonte-detector ao longo de seu diâmetro. Para a validação das equações analíticas foram realizadas simulações com o código MCNPX para obtenção do coeficiente de atenuação linear dos materiais que compõem o sistema duto-fluido-incrustação e a relação entre o feixe incidente e transmitido, necessários para o cálculo do caminho percorrido pela radiação na incrustação (*path length*), conforme a equação 9 e posterior cálculo da espessura da incrustação, dado pela equação 13.

3.1.1 Coeficiente de atenuação linear dos materiais

Por meio de simulações com o código MCNPX foram obtidos os coeficientes de atenuação linear dos materiais e fluidos que serão empregados na validação das equações analíticas para o cálculo da espessura das incrustações de CaCO_3 . As frações mássicas de todos os materiais estão indicadas na [tabela 2 \(Mc CONNOR JR et al., 2011\)](#).

Tabela 2 - Fração mássica dos materiais empregados na simulação com o MCNPX.

Fração Mássica e Densidade dos Materiais				
Aço AISI 316L	Óleo Bruto México	Água Salgada*	Ar atmosférico**	CaCO ₃
($\rho=8\text{g/cm}^3$)	($\rho=0,975\text{g/cm}^3$)	($\rho=1,04\text{g/cm}^3$)	($\rho=1,205 \times 10^{-3}\text{g/cm}^3$)	($\rho=2,8\text{g/cm}^3$)
C =0,00030	H= 0,104039	H=0,107423	C=0,000124	C=0,120003
Si=0,01000	C=0,853733	O=0,853577	N=0,755268	O=0,479554
P= 0,00045	S=0,042228	Na=0,1015735	O=0,231781	Ca=0,400443
S=0,00030		Cl=0,024265	Ar=0,012827	
Cr=0,17000				
Mn=0,02000				
Fe=0,65395				
Ni=0,12000				
Mo=0,02500				

*A água salgada foi simulada com 4% de NaCl, representando a média mundial dos mares (SALGADO, 2010).

** O ar atmosférico foi empregado para simular o gás no interior do duto.

O modelo utilizado nas simulações com o código MCNPX é apresentado na [figura 16](#), onde uma amostra cilíndrica com, 20 mm de diâmetro, do material absorvedor foi posicionada entre uma fonte puntiforme, monoenergética 662 keV, referente a energia do Cs-137, e a superfície detectora (S1). A fonte radioativa tem emissão unidirecional com um feixe *pencil beam*. Para cada um dos materiais listados na [tabela 2](#), a espessura da amostra variou de 20 mm a 100 mm, em passos de 20 mm, para construção da curva $\ln(I/I_0 \times X)$, na qual o coeficiente de atenuação linear é o coeficiente angular da reta obtida pelo ajuste linear dos resultados por meio do método dos mínimos quadrados.

Nesta etapa foi utilizado o *tally* F1, disponível no código MCNPX, por meio do qual é possível obter o número de partículas de determinada energia que atravessam a superfície (S1) com uma determinada energia, com raio de 15 mm, aproximadamente a área sensível de um detector cintilador NaI(Tl) $1 \frac{1}{4} \times \frac{3}{4}$ ". O número de histórias usado foi de 2×10^8 a fim de obter um erro relativo menor que 5% para a energia de 662 keV.

Neste ponto, torna-se importante ressaltar que a metodologia escolhida para este estudo teve por objetivo simular um procedimento experimental.

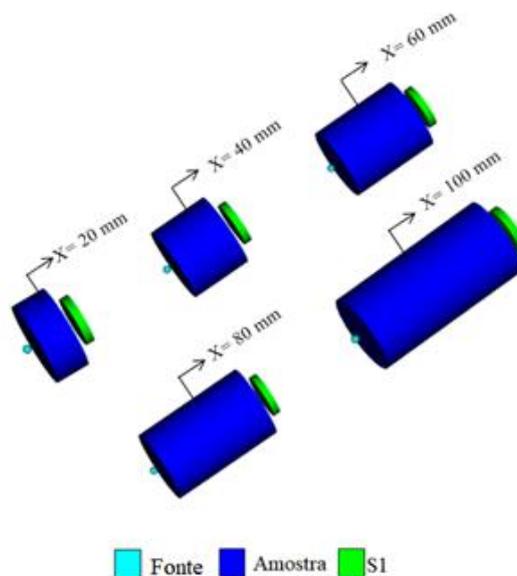


Figura 16 - Modelo utilizado para obtenção dos coeficientes de atenuação linear dos materiais usados na validação das equações analíticas para cálculo de espessuras de incrustações (CARVALHO, 2021).

3.1.2 Cálculo da espessura das incrustações

Para determinação do caminho da radiação na incrustação concêntrica, dado pela equação 9, foi realizado um escaneamento do duto por meio da Técnica de Transmissão Gama, no qual o sistema fonte-detector, posicionados diametralmente opostos, é deslocado ao longo do duto, para obtenção da relação entre as intensidades do feixe incidente e transmitido pela fonte de radiação gama para cada altura de detecção do sistema fonte-detector.

Para cada fluido no interior do duto foi realizado escaneamento por meio de simulação com o código MCNPX, sendo importante ressaltar que a simetria do duto em 180° foi considerada, proporcionando reduzir o número de simulações realizadas pela metade. O modelo proposto é demonstrado pela figura 17, onde os fluidos utilizados foram o ar atmosférico ($\rho = 1,205 \times 10^{-3} \text{ g/cm}^3$), óleo bruto mexicano ($\rho = 0,975 \text{ g/cm}^3$) e água salgada (4% NaCl; $\rho = 1,04 \text{ g/cm}^3$) e no qual o duto de aço AISI 316L possui 260 mm de diâmetro interno, com 5 mm de espessura. A fonte empregada nas simulações foi considerada puntiforme, unidirecional, monoenergética emitindo fótons de 662 keV. O feixe utilizado foi o *pencil beam*.

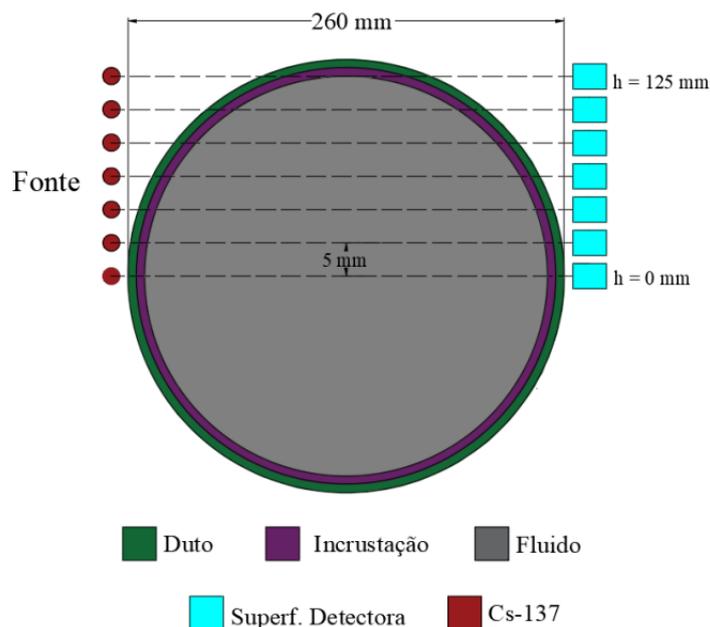


Figura 17- Modelo matemático proposto para validação das equações analíticas (CARVALHO, 2021).

Para a determinação da espessura da incrustação concêntrica utilizada na validação das equações analíticas, considerou-se inicialmente a espessura de 1 mm de CaCO_3 que foi aumentada em passos de 1mm para verificação da menor espessura que poderia ser utilizada. As simulações com o MCNPX foram realizadas apenas para a posição inicial ($h = 0$ mm) nesta etapa. Após a determinação da espessura a ser empregada, o escaneamento do duto foi realizado através da variação do sistema fonte-detector da posição inicial ($h = 0$ mm) até a altura $h = 125$ mm, em passos de 5 mm.

A fim de avaliar o emprego das equações analíticas em diferentes espessuras de incrustação, a mesma foi aumentada para 25 mm e 50 mm e as simulações com o código MCNPX foram realizadas para as posições do sistema fonte-detector de $h = 30$ mm a 60 mm em passos de 5 mm. Neste ponto é importante ressaltar que as posições do sistema fonte-detector escolhidas para utilização nesta etapa têm por objetivo avaliar o valor da espessura da incrustação concêntrica de CaCO_3 para diferentes caminhos da radiação na incrustação, conforme mostrado na [figura 6](#). Em todas as simulações com o código MCNPX nesta etapa, o comando de saída utilizado foi o *tally* F1 em uma superfície detectora com um raio de 15 mm.

3.2 GEOMETRIA PROPOSTA PARA PREDIÇÃO DA ESPESSURA DE INCRUSTAÇÕES DE CaCO_3

Nesta etapa buscou-se o desenvolvimento de uma geometria de detecção para simulação com o código MCNPX para obtenção dos dados que serão empregados na predição das espessuras de incrustações pelas redes neurais artificiais (RNAs). Inicialmente foi determinada a geometria de medição para obtenção das distribuições de altura de pulso (DAPs) empregadas no treinamento supervisionado das RNAs, considerando os fluidos incompressíveis e o escoamento estático. Em seguida foi realizado um estudo para determinação do melhor ângulo de colimação que será empregado no modelo simulado.

3.2.1 Modelo proposto para a geometria de medição

O sistema de detecção consistiu de três detectores NaI(Tl) $1\frac{1}{4} \times \frac{3}{4}$ " (SALGADO, 2010; SALGADO *et al.*, 2021) posicionado a cada 120° ao redor do duto de aço AISI 316L, conforme mostrado na figura 18. Os detectores D1, D2 e D3 são utilizados para medir o feixe espalhado, cuja aplicação neste estudo torna-se essencial devido a não uniformidade da deposição da incrustação excêntrica.

O duto de aço AISI 316L possui 252 mm de diâmetro externo e 2 mm de espessura. Em seu interior foi simulado um escoamento trifásico anular formado por 60% de óleo bruto mexicano ($\rho = 0,975 \text{ g/cm}^3$), 30% água salgada (4 % NaCl; $\rho = 1,04 \text{ g/cm}^3$) e 10 % ar atmosférico ($\rho = 1,205 \times 10^{-3} \text{ g/cm}^3$). A incrustação depositada no duto foi de CaCO_3 com espessura inicial de 2 mm, tanto nos casos de deposição concêntrica quanto excêntrica. O comando de saída utilizado nesta etapa foi o *tally* F8, disponível no código MCNP6.

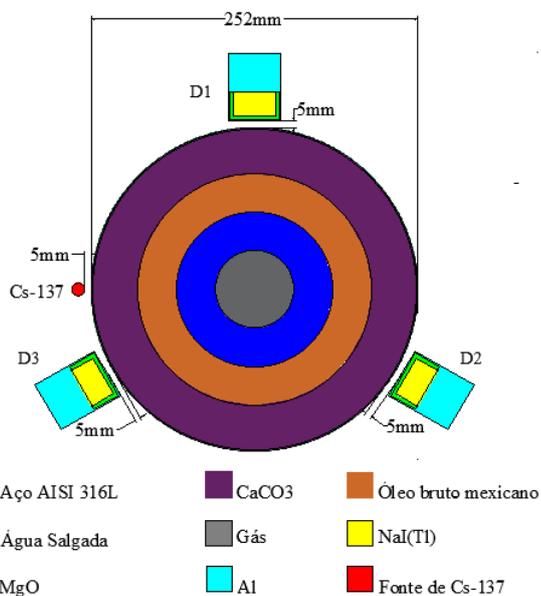


Figura 18 - Modelo matemático proposto para obtenção do conjunto de dados para treinamento supervisionado das RNAs (CARVALHO, 2021).

Na figura 19 é possível evidenciar mais detalhes do detector utilizado nas simulações, que apresenta um cristal de NaI (Tl) com diâmetro de 31 mm e espessura de 19 mm, uma camada de MgO com 3 mm de espessura e a fotomultiplicadora considerada um disco de Al com 30 mm de espessura (SALGADO, 2010). Para incorporar características reais de registro dos detectores foi implementado nas simulações o comando *Gaussian Energy Broadening* (GEB) através do cartão FTn, considerando a resolução em energia de um detector real na simulação.

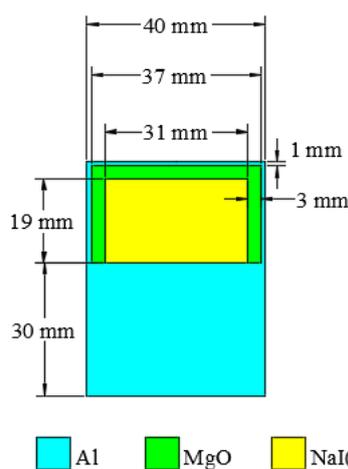


Figura 19 - Detector de NaI(Tl) usado nas simulações com o código MCNP6 (CARVALHO, 2021).

3.2.2 Estudo do ângulo de colimação

O ângulo de colimação é um parâmetro importante na geometria de medição, no qual é considerada a atenuação e espalhamento da radiação no meio absorvedor (DAM *et al.*, 2021). Portanto, a fim de otimizar a atividade da fonte de Cs-137 foi realizado um estudo para obter o melhor valor do ângulo de colimação.

Considerando que todo o estudo está baseado no espalhamento da radiação gama, os coeficientes de atenuação linear dos materiais e fluidos (aço AISI316L, óleo bruto mexicano, água salgada e CaCO_3), cujas frações mássicas estão dispostas na [tabela 2](#), foram empregados na análise da divergência do feixe de radiação, que foi realizada com o código MCNPX, por meio do modelo exposto na [figura 20](#), onde uma amostra de 100 mm de cada material/fluido foi posicionada entre uma fonte de Cs-137 e uma superfície detectora (S1). O comando de saída utilizado foi o *tally* F1 e os coeficientes de atenuação linear foram calculados através da equação 16. A determinação do melhor ângulo de colimação foi realizada avaliando-se o erro relativo nos coeficientes de atenuação linear conforme aumento do ângulo de emissão. Os valores de divergência empregados foram de $5,73^\circ$ (TEIXEIRA, 2018), 8° e 10° .

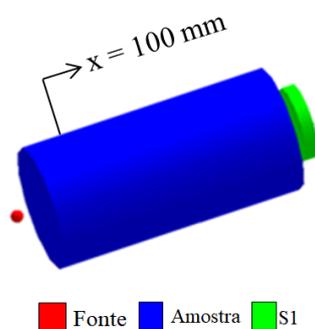


Figura 20 - Modelo utilizado para o estudo do ângulo de colimação para a geometria de medição proposta para predição de espessuras de incrustações de CaCO_3 (CARVALHO, 2021).

3.3 PREDIÇÃO DAS ESPESSURAS POR RNA

Nesta etapa a rede neural artificial (RNA) é usada para contornar a dificuldade de obtenção de informações internas do conjunto duto-escoamento-incrustação. O objetivo é obter a espessura da incrustação nos casos de deposição concêntrica e excêntrica, independentemente da presença dos fluidos no interior do duto. Em ambos os casos, um

conjunto de dados gerados pelas simulações com o código MCNP6, formado pelas informações adquiridas pelos três detectores cintiladores, através da obtenção de suas distribuições de altura de pulsos (DAPs) foi usado para aprendizado da rede. O conjunto de dados foi dividido na seguinte proporção: 70% treinamento, 20% teste e 10% de validação. Todas as RNAs empregadas no estudo são MLPs de três camadas e submetidas ao algoritmo de aprendizagem supervisionada *backpropagation*.

3.3.1 Espessura das Incrustações Concêntricas

A formação dos conjuntos de Treinamento, Teste e Validação da rede neural artificial (RNA) para o caso de deposição concêntrica de CaCO_3 foram obtidas 37 simulações com o MCNP6, variando a espessura da incrustação de, inicialmente em 2 mm até 124 mm, sendo este último valor de espessura a espessura máxima de CaCO_3 que causaria o entupimento total do duto, impedindo o escoamento dos fluidos. O passo de variação da espessura da incrustação foi de 2 mm para as primeiras 12 simulações. A partir desse ponto, o passo de variação foi de 4 mm. Além da geração do conjunto de dados, os valores da espessura escolhidos visam avaliar a capacidade de interpretação das DAPs pela RNA e, conseqüentemente, sua resposta nos casos de pequenas e grandes espessuras de incrustação de CaCO_3 .

A [figura 21](#) mostra dois exemplos de simulações realizadas, para as espessuras de CaCO_3 de 2 mm e 60 mm.

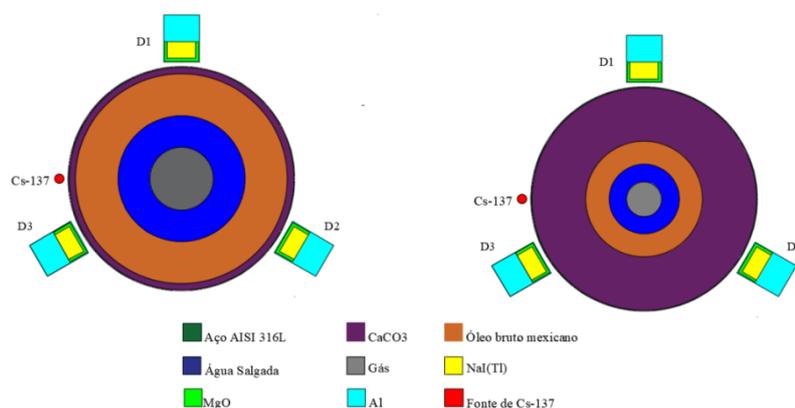


Figura 21 - Simulações realizadas para a incrustação concêntrica de: (a) 2 mm e (b) 60 mm (CARVALHO, 2021).

O conjunto de dados foi dividido para compor os subconjuntos de Treinamento (27 simulações), Teste (7 simulações) e Validação (3 simulações). O subconjunto de Teste foi usado para avaliar a generalização da RNA, impedindo que a ocorrência do supertreinamento, por meio do critério de parada de Validação Cruzada. Os padrões de Validação, utilizados após a fase de treinamento, têm por função realizar uma avaliação final do treinamento da RNA (HAYKIN, 2005). A distribuição dos dados nos três conjuntos foi realizada aleatoriamente, conforme a figura 22.

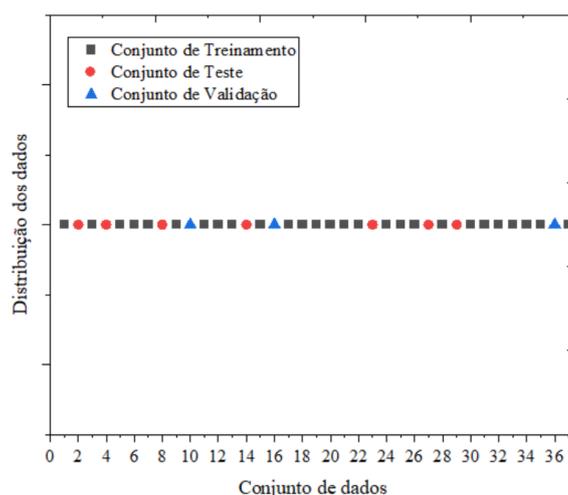


Figura 22 - Distribuição aleatória dos dados nos conjuntos de Treinamento, Teste e Validação para o treinamento supervisionado da RNA (CARVALHO, 2021).

Os padrões de treinamento da RNA, ilustrados na figura 23, são formados pelos seguintes dados:

- i) Entradas da RNA: contagens relativas às energias de 20 a 720 keV, ou seja, as DAPs obtidas pelos três detectores em cada simulação, com 10 keV por canal.
- ii) Saídas da RNA: espessura das incrustações concêntricas, de 2 mm a 124 mm.

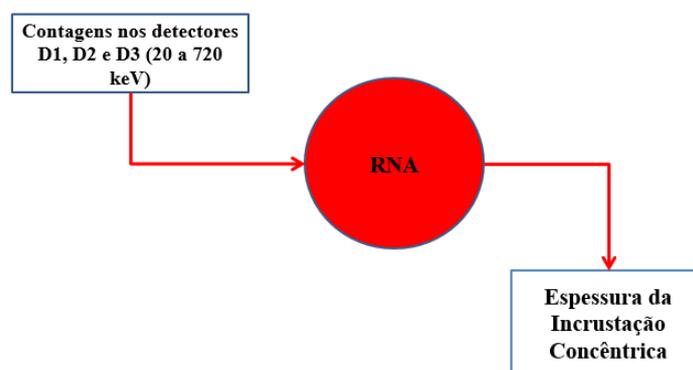


Figura 23 - Arquitetura da RNA concêntrica (CARVALHO, 2021).

3.3.2 Espessura das Incrustações Excêntricas

Com o objetivo de verificar a capacidade da RNA em prever a espessura máxima da incrustação excêntrica independentemente de sua localização, a posição da mesma foi alterada dentro do duto, a cada 15°, contabilizando um total de 24 ($360^\circ/15^\circ$) posições diferentes da incrustação máxima. Para cada uma destas posições foram realizadas 40 simulações com o código MCNP6. Nas primeiras 13 simulações, o passo da variação da espessura da incrustação foi de 2 mm e, nas simulações restantes foi de 4 mm. Assim, foi possível realizar 960 simulações, contabilizando um total de 2880 DAPs, registradas pelos três detectores.

Além da obtenção dos dados de Treinamento, Teste e Validação da RNA, ao estabelecer uma quantidade relativamente grande de diferentes posições para deposição máxima da incrustação, torna-se possível avaliar a resposta da RNA em diferentes casos, que possam vir a ocorrer em situações reais, pois devido a não uniformidade da deposição nos casos excêntricos, a predição das espessuras se torna particularmente difícil, principalmente devido à localização da espessura máxima dentro do duto. Além disso, nesta etapa visando tornar o modelo mais realístico, o gás metano foi utilizado nas simulações substituindo o ar atmosférico. A título de exemplo, a [figura 24](#) mostra dois exemplos de simulações realizadas, para a espessura de CaCO_3 de 84 mm.

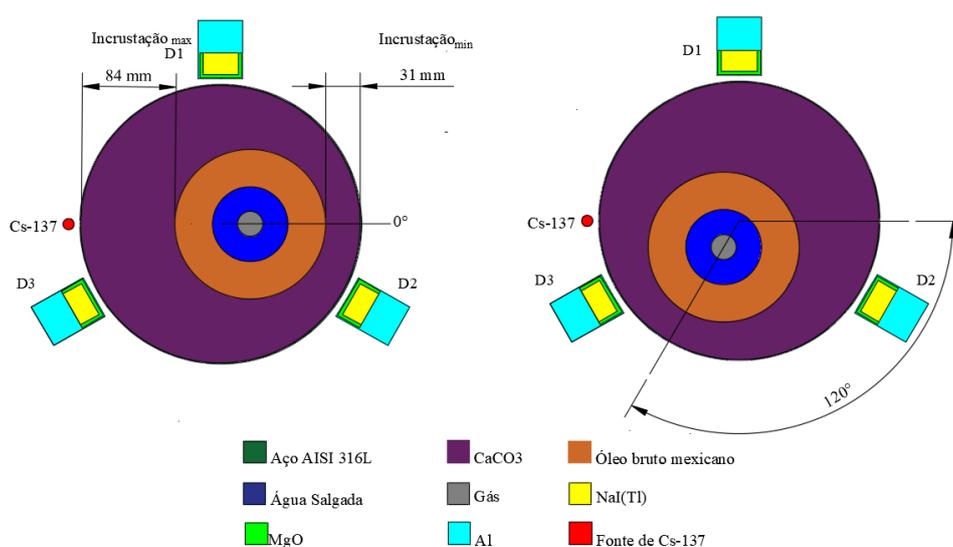


Figura 24 - Simulações realizadas para a incrustação excêntrica para o escoamento bifásico na posição: (a) 0°e (b) 120° (CARVALHO, 2021).

O conjunto de dados para treinamento da RNA foi distribuído aleatoriamente entre os subconjuntos para Treinamento (672 simulações), Teste (192 simulações) e Validação (96 simulações). A representação esquemática da arquitetura da RNA é a mesma utilizada para a obtenção das espessuras de incrustação concêntricas, mostrada na [figura 23](#).

3.4 ADEQUABILIDADE DO MODELO PROPOSTO

Nesta etapa foram realizados diversos estudos a fim de analisar a possibilidade de aplicação do modelo proposto para a obtenção das DAPs com o código MCNP6, que foram utilizadas como conjuntos de Treinamento, Teste e Validação das RNAs empregadas na predição de espessura de incrustações concêntricas e excêntricas, para diferentes materiais do duto, tipos de óleo e gás, e variações na incrustação de CaCO_3 . Neste ponto, torna-se importante ressaltar que a fração mássica da água salgada com 4%NaCl utilizada nas simulações representa a média de salinidade mundial dos mares ([SALGADO, 2010](#)), portanto não foram analisadas variações em sua composição.

Logo, para cada material e fluido escolhido foi realizado um estudo para obtenção de seus respectivos coeficientes de atenuação linear com o código MCNPX, empregando o mesmo modelo apresentado na seção 3.1.1, o objetivo é verificar a possibilidade de influência nos resultados obtidos com as RNAs alterando a composição dos materiais/fluidos utilizados no modelo proposto na seção 3.2.1.

3.4.1 Análise da influência da composição química do duto

Os equipamentos usados na indústria petrolífera, tanto dutos quanto válvulas, bombas e outros tipos de equipamentos em geral, enfrentam um ambiente extremamente agressivo, principalmente nos campos de produção *offshore*. Portanto, é necessário o uso de materiais com elevadas resistência à corrosão e tenacidade, propriedades que podem ser encontradas em diversos aços inoxidáveis ([ABINOX, 2021](#)).

Para garantir que a metodologia desenvolvida ao longo deste trabalho possa ser aplicada em uma gama de dutos, foram realizadas simulações com o código MCNPX para obtenção dos coeficientes de atenuação linear dos aços inoxidáveis listados na [tabela 3](#). A escolha dos materiais foi realizada de acordo com as concentrações de ferro em sua composição química, por ser o principal constituinte destes materiais. Assim, foram selecionados três aços disponíveis no *Compendium of Material Composition Data for Radioation Transport Modeling* (Mc CONNOR JR *et al.*, 2011) nos quais a concentração de ferro apresentasse variações em relação ao aço AISI 316L empregado no modelo proposto na seção 3.21.

Tabela 3- Fração mássica dos aços inoxidáveis avaliados (Mc CONNOR JR *et al.*, 2011).

Elementos	Aço AISI 440 $\rho=7,80 \text{ g/cm}^3$	Aço HT9 $\rho=7,87 \text{ g/cm}^3$	Aço AISI 304L $\rho=8,00 \text{ g/cm}^3$	Aço AISI 316L $\rho=8 \text{ g/cm}^3$
C	0,00675	0,00200	0,00015	0,00030
Si	0,00650	0,00400	0,00500	0,01000
P	0,00026	0,00030	0,00023	0,00045
S	0,00020	0,00020	0,00015	0,00030
V	-	0,00300	-	-
Cr	0,17000	0,11500	0,19000	0,17000
Mn	0,00650	0,00600	0,01000	0,02000
Fe	0,79505	0,84950	0,69448	0,65395
Ni	-	0,00500	0,10000	0,12000
Mo	0,00488	0,01000	-	0,02500
W	-	0,00500	-	-

3.4.2 Análise da influência da composição química do óleo

O óleo bruto de petróleo é uma mistura complexa, predominantemente formada por hidrocarbonetos e derivados orgânicos sulfurados, nitrogenados e oxigenados, além de compostos organometálicos, enxofre e metais formadores de sais ácidos (FERREIRA, 2018).

Com o objetivo de analisar a influência da composição química do óleo no modelo desenvolvido neste estudo, foram realizadas simulações com o código MCNPX para obtenção do coeficiente de atenuação linear dos óleos brutos de petróleo disponíveis na Agência Nacional de Petróleo e Gás (ANP, 2021), onde foram selecionados os óleos com diferentes valores de grau API de campos de exploração de petróleo nacionais, encontrados na Bacia de Santos (SP), Campo de Paru (Bacia Alagoas – Sergipe),

Campo de Atum (Bacia do Ceará) e na Bacia de Campos (RJ). As frações mássicas dos óleos brutos nacionais empregados nesta etapa estão dispostas na [tabela 4](#). As simulações realizadas com o código MCNPX tiveram por objetivo a obtenção dos coeficientes de atenuação linear destes materiais, para comparação com o óleo bruto mexicano ($\rho = 0,975 \text{ g/cm}^3$) empregado no modelo proposto na seção 3.2.1.

Tabela 4 - Fração mássica e densidade dos óleos brutos avaliados (ANP,2021).

Elementos	Óleo Bruto (Santos/SP) ($\rho=0,751$ g/cm^3) (API= 56,9°)	Óleo Bruto (Paru/Al) ($\rho=0,821$ g/cm^3) (API= 40,8°)	Óleo Bruto (Atum/CE) ($\rho=0,886$ g/cm^3) (API=28,1°)	Óleo Bruto (Campos/RJ) ($\rho=0,9402$ g/cm^3) (API= 19,0°)
H	0,143383	0,132528	0,133793	0,128648
C	0,854307	0,789580	0,797116	0,766460
S	0,00021	0,039400	0,040900	0,059900
N	0,00021	0,038500	0,028200	0,045000

Em ambos os casos, os coeficientes de atenuação linear dos óleos selecionados foram obtidos através de simulações com o código MCNPX empregando-se o modelo da seção 3.1.1.

3.4.3 Análise da influência da composição química do gás

O gás metano (CH_4) foi empregado nas simulações com o código MCNP6 para os casos de deposição excêntrica de CaCO_3 . No entanto, nos poços de petróleo, o gás associado encontrado é uma mistura de hidrocarbonetos no qual o metano é o principal componente e estão presentes em sua composição química gases como etano (C_2H_6), propano (C_3H_8), butano (C_4), dióxido de carbono (CO_2) e nitrogênio (N_2) (ALMEIDA, 2015). Logo, foram selecionados quatro tipos de gás natural bruto para análise da influência de sua composição química no modelo empregado neste estudo. A escolha foi realizada levando em consideração a concentração de metano no gás natural bruto, com o objetivo de analisar sua influência nos valores dos coeficientes de atenuação linear, obtidos com código MCNPX, conforme a geometria de medição apresentada na seção 3.1.1. Os valores das frações mássicas utilizadas nas simulações para os gases selecionados estão descritos na [tabela 5](#).

Tabela 5 - Fração mássica dos gases naturais avaliados (ALMEIDA, 2015).

Composto	Argentina ($\rho=5,9 \times 10^{-4}$ g/cm ³)	Rio de Janeiro ($\rho=6,2 \times 10^{-4}$ g/cm ³)	Gás Metano ($\rho=6,7 \times 10^{-4}$ g/cm ³)	Venezuela ($\rho=7,0 \times 10^{-4}$ g/cm ³)	Irã ($\rho=8,7 \times 10^{-4}$ g/cm ³)
C ₄ H ₄	0,950000	0,884400	1,000000	0,781000	0,660000
C ₂ H ₆	0,040000	0,067000		0,099000	0,140000
C ₂ H ₂	-	0,022600		0,055000	0,105000
C ₄	-	0,004600		0,049000	0,070000
CO ₂	-	0,003400		0,004000	0,015000
N ₂	0,010000	0,008000		0,001200	0,010000

3.4.4 Análise da influência da composição química da incrustação

Alguns estudos com incrustações de BaSO₄ (BESERRA, 2012; TEIXEIRA, 2018) mostraram a presença de outros elementos na composição destas incrustações. No entanto, não foram encontrados dados precisos sobre a presença de outros elementos na composição das incrustações de CaCO₃. Assim, foram estabelecidos os seguintes critérios para analisar a influência da variação da composição química da incrustação:

- i) Na [figura 4](#), na seção 2.2.1.1, é possível verificar que as curvas de produtos de solubilidade versus temperatura das incrustações de CaCO₃ e MgCO₃ se cruzam para uma temperatura acima de 250°F (aproximadamente 121°C), o que indica a possibilidade de precipitação de ambas, nas situações em que estejam presentes na mesma solução.
- ii) A água do mar, cuja presença na rocha reservatório é considerada um fator decisivo para a formação da incrustação (KAMAL, 2018) e, possui em sua composição íons de Ba²⁺, Mg²⁺, Sr²⁺ e Ca²⁺ dissolvidos.

Então, considerou-se a presença de de MgCO₃, BaCO₃ e SrCO₃ na composição das incrustações de CaCO₃ nas simulações com o código MCNPX para obtenção dos coeficientes de atenuação linear de cada composto, conforme o modelo da seção 3.1.1. As frações mássicas dos compostos dispostas na [tabela 6](#) foram variadas formando as seguintes composições:

- i) Análise da presença do MgCO₃ no CaCO₃:

90% CaCO₃ – 10% MgCO₃;

80% CaCO₃ – 20% MgCO₃;

70% CaCO₃ – 30% MgCO₃;

60% CaCO₃ – 40% MgCO₃.

ii) Análise da presença do SrCO₃ no CaCO₃:

90% CaCO₃ – 10% SrCO₃;

80% CaCO₃ – 20% SrCO₃;

70% CaCO₃ – 30% SrCO₃;

60% CaCO₃ – 40% SrCO₃.

iii) Análise da presença do BaCO₃ no CaCO₃:

90% CaCO₃ – 10% BaCO₃;

80% CaCO₃ – 20% BaCO₃;

70% CaCO₃ – 30% BaCO₃;

60% CaCO₃ – 40% BaCO₃.

Neste ponto, torna-se importante ressaltar que todas as composições acima foram escolhidas de maneira a manter o CaCO₃ como maior constituinte do composto.

Tabela 6- Fração mássica das incrustações analisadas (Mc CONNOR JR *et al.*, 2011).

Composto	Fração Mássica			
	Ca	C	O	Mg/Sr/Ba
90%CaCO ₃ 10%Mg/Sr/BaCO ₃ $\rho = (2,81/2,87/2,94\text{g/cm}^3)$	0,3603987	0,120030	0,479554	0,040044
80%CaCO ₃ 20%Mg/Sr/BaCO ₃ $\rho = (2,83/2,94/3,01\text{ g/cm}^3)$	0,3203544	0,120030	0,479554	0,080086
70%CaCO ₃ 30%Mg/Sr/BaCO ₃ $\rho = (2,85/3,01/3,24\text{ g/cm}^3)$	0,2803101	0,120030	0,479554	0,120132
60%CaCO ₃ 40%Mg/Sr/BaCO ₃ $\rho = (2,87/3,08/3,38\text{ g/cm}^3)$	0,240265	0,120030	0,479554	0,160177

CAPÍTULO IV

4 RESULTADOS

De acordo com as etapas descritas na metodologia, são expressos neste capítulo os resultados da validação das equações analíticas para cálculo de espessuras de incrustações, estudo do ângulo de colimação para o modelo proposto para obtenção do conjunto de dados para o treinamento supervisionado das redes neurais artificiais (RNAs), predição de espessura das incrustações concêntricas e excêntricas por RNAs e adequabilidade do modelo proposto para materiais com diferentes composições químicas a partir do estudo de seus coeficientes de atenuação linear.

4.1 VALIDAÇÃO DAS EQUAÇÕES ANALÍTICAS

A etapa de validação das equações analíticas para cálculo das espessuras das incrustações de CaCO_3 descritas na seção 3.1 estão divididas em duas etapas, na primeira estão descritos os resultados dos coeficientes de atenuação linear dos materiais que são empregados no cálculo do caminho percorrido da radiação na incrustação e, na segunda parte estão demonstrados os resultados dos cálculos das espessuras das incrustações.

4.1.1 Coeficiente de Atenuação Linear dos materiais

Com o modelo matemático descrito na seção 3.1.1 foi possível obter as curvas $\text{Ln}(I_0/I) \times X$ dos materiais e fluidos investigados neste trabalho, como pode ser visto na [figura 25](#).

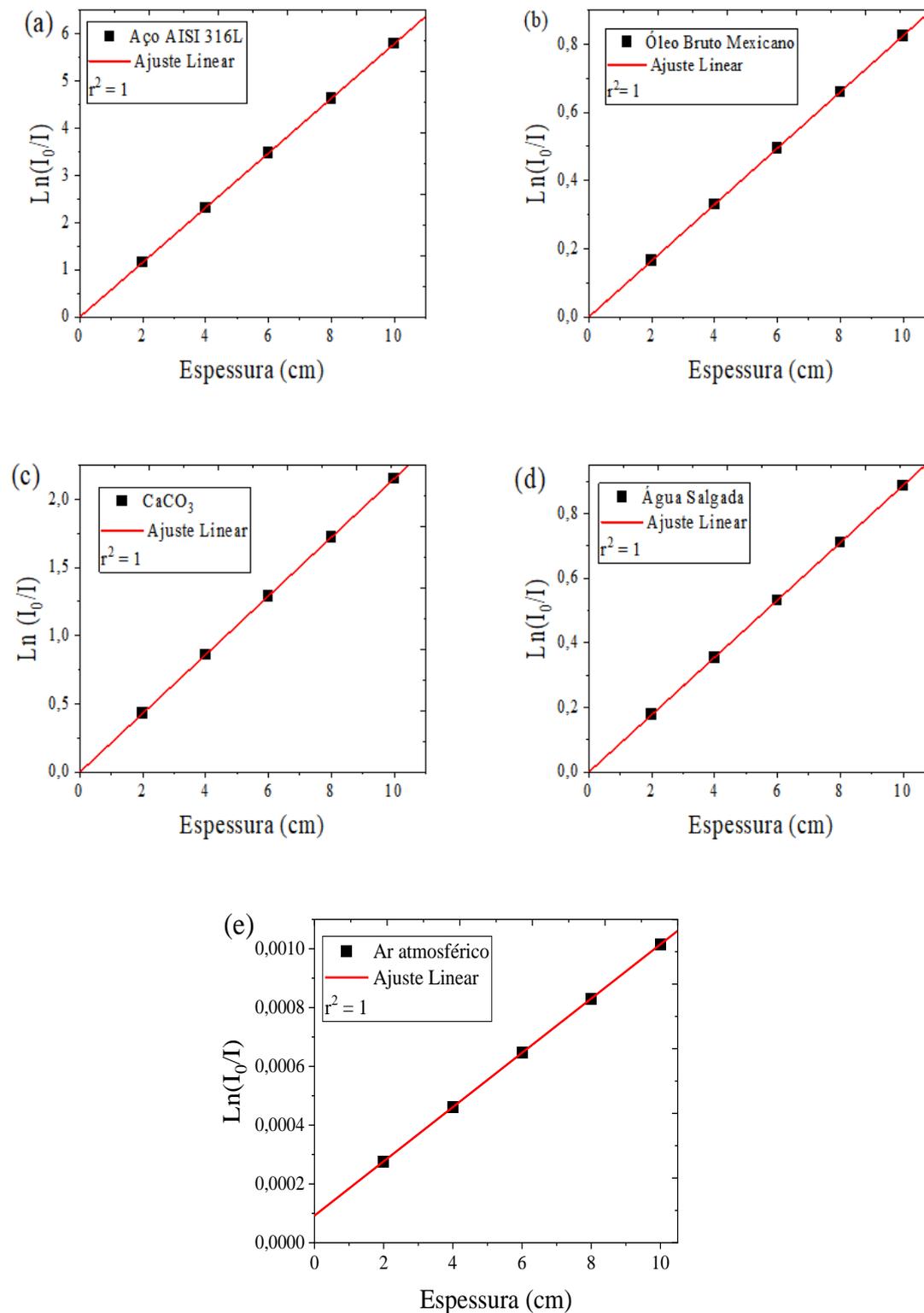


Figura 25- Curvas $\text{Ln}(I_0/I) \times X$ para obtenção do coeficiente de atenuação linear do: (a) aço AISI316L, (b) óleo bruto mexicano, (c) CaCO_3 , (d) água salgada e (e) ar atmosférico.

Em seguida foi realizado um ajuste linear dos dados, pelo método dos mínimos quadrados, onde o coeficiente de atenuação linear dos materiais é dado pelo coeficiente angular da reta. Os resultados estão expressos na [tabela 7](#) e para cada material/fluido foi

realizada a validação por meio dos valores teóricos fornecidos pelo programa X-COM do *National Institute of Standards and Technology* (NIST). O erro relativo foi calculado de acordo com a equação 22.

$$\text{Erro relativo (\%)} = \left(\frac{V_{ref} - V_{obs}}{V_{ref}} \right) \times 100 \quad (22)$$

Onde:

V_{ref} – valor de referência dado pelo NIST;

V_{obs} – valor observado, obtida com o MCNPX.

Tabela 7 - Coeficiente de atenuação do aço, óleo, incrustação, água salgada e ar atmosférico.

μ (cm^{-1})	Aço AISI 316L	Óleo Bruto	CaCO_3	Água Salgada	Ar atmosférico
MCNPX	$5,78 \times 10^{-1}$	$8,24 \times 10^{-2}$	$2,15 \times 10^{-1}$	$8,80 \times 10^{-2}$	$9,23 \times 10^{-5}$
NIST	$5,88 \times 10^{-1}$	$8,29 \times 10^{-2}$	$2,17 \times 10^{-1}$	$8,87 \times 10^{-2}$	$9,30 \times 10^{-5}$
Erro Relativo (%)	1,70	0,6	0,92	1,12	0,75

Os resultados foram considerados satisfatórios, com o erro relativo máximo obtido para o coeficiente de atenuação linear do aço AISI316L (1,70%), logo, podem ser empregados para o cálculo das espessuras de CaCO_3 por meio das equações analíticas da seção 2.2.1.5. Além disso, o modelo desenvolvido com o código MCNPX foi considerado válido para a obtenção dos coeficientes de atenuação linear.

4.1.2 Cálculo das espessuras por meio das equações analíticas

Na figura 26 estão dispostos os resultados dos erros relativos das espessuras obtidas com a equação 13 para determinação da menor espessura que poderia ser utilizada na validação das equações analíticas para o cálculo das espessuras concêntricas de CaCO_3 , para a altura de detecção $h = 0$ mm e com os fluidos ar, óleo ou água no interior do duto, onde é possível verificar que apenas a partir do valor de 5 mm da espessura da incrustação CaCO_3 o erro relativo encontrado é menor que 5% para os três fluidos, portanto este valor foi utilizado para a validação das equações analíticas.

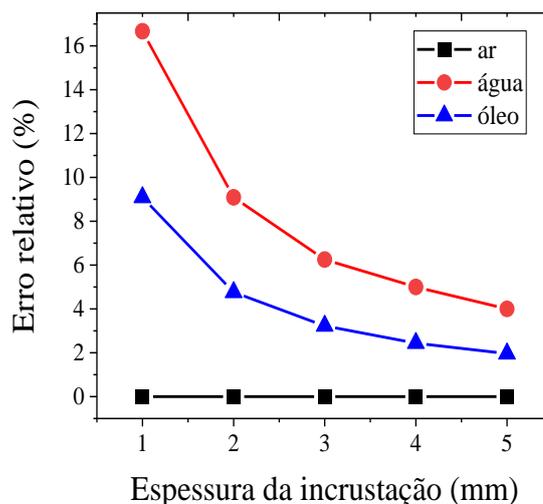


Figura 26- Erro relativo versus espessuras de CaCO_3 para as espessuras de 1 a 5 mm.

Os valores da espessura da incrustação de CaCO_3 calculados pela equação 13 para a espessura de 5 mm estão expressos na [tabela 8](#). Os resultados estão divididos de acordo com o fluido simulado no interior da tubulação: ar atmosférico, óleo bruto mexicano e água salgada (4% NaCl).

O erro relativo foi calculado de acordo com a equação 22, onde o valor de referência considerado é a espessura determinada na simulação com o código MCNPX e o valor observado é a calculada com a equação 13.

A análise da [tabela 8](#) mostra que a presença do ar no interior da tubulação não influencia nos resultados da espessura da incrustação, nos casos em que o mesmo foi empregado nas simulações. No entanto, é possível evidenciar que a presença do óleo e da água nas simulações há influência nos resultados obtidos com as equações analíticas, onde os piores casos são encontrados para água salgada, que possui densidade relativamente maior ($1,04 \text{ g/cm}^3$) que o óleo ($0,975 \text{ g/cm}^3$) o que contribui para diminuição das contagens na superfície detectora.

Além disso, há influência de (h) nos resultados obtidos com altura $h = 125 \text{ mm}$, pois para este valor não há interação da radiação com o fluido no interior do duto, logo a espessura da incrustação obtida para essa altura de detecção não corresponde à espessura real da incrustação. Portanto, a altura $h = 120 \text{ mm}$ é o caso limite para o cálculo da espessura da incrustação, sendo o último ponto onde a intersecção dos

segmentos de reta CD e OB, mostrados na [figura 9](#), corresponde à espessura da incrustação.

Tabela 8 - Espessura da Incrustação de 5 mm com variação dos fluidos no interior do duto e altura de detecção.

h (mm)	<u>Espessura da Incrustação (mm)</u>			<u>Erro Relativo (%)</u>		
	ar	óleo	água	ar	óleo	água
0	5,0	5,1	5,2	0	2	4
5	5,0	5,1	5,2	0	2	4
10	5,0	5,1	5,2	0	2	4
15	5,0	5,1	5,2	0	2	4
20	5,0	5,1	5,2	0	2	4
25	5,0	5,1	5,2	0	2	4
30	5,0	5,1	5,2	0	2	4
35	5,0	5,1	5,2	0	2	4
40	5,0	5,1	5,2	0	2	4
45	5,0	5,1	5,2	0	2	4
50	5,0	5,1	5,2	0	2	4
55	5,0	5,1	5,2	0	2	4
60	5,0	5,1	5,2	0	2	4
65	5,0	5,1	5,1	0	2	2
70	5,0	5,1	5,1	0	2	2
75	5,0	5,1	5,1	0	2	2
80	5,0	5,1	5,1	0	2	2
85	5,0	5,1	5,1	0	2	2
90	5,0	5,0	5,1	0	0	2
95	5,0	5,0	5,1	0	0	2
100	5,0	5,0	5,1	0	0	2
105	5,0	5,0	5,1	0	0	2
110	5,0	5,0	5,0	0	0	0
115	5,0	5,0	5,0	0	0	0
120	5,0	5,0	5,0	0	0	0
125	0,40	10	17,6	92	100	698

Para melhor análise dos erros relativos obtidos, os mesmos foram classificados em faixas de 0 a 20%, conforme a [tabela 9](#), onde se verifica que para os três fluidos simulados no interior do duto, em 96,15 % dos resultados apresentam erro relativo menor que 5%, confirmando a validação das equações analíticas da seção 2.2.1.5 através das simulações com o código MCNPX. Neste ponto, é importante ressaltar que os resultados com erro relativo maior que 20% se devem as alturas de detecção $h = 125$ mm, já explicados anteriormente.

Tabela 9 - Classificação dos erros relativos.

Erro Relativo	Fluido		
	ar	óleo	Água
<5%	96,15	96,15	96,15
5% - 10%	0	0	0
10 - 20%	0	0	0
>20%	3,85	3,85	3,85

Os resultados obtidos para as espessuras de 25 e 50 mm, com as alturas de detecção entre 30 e 60 mm estão dispostas nas tabelas 10 e 11, demonstrando que as equações analíticas podem ser usadas para diferentes valores de espessura, pois nenhum dos erros relativos calculados para ambas as espessuras ultrapassou o valor de 5%, embora, novamente os maiores valores do erro relativo tenham sido encontrados nos casos em que a água salgada foi o fluido empregado nas simulações com o código MCNPX.

Tabela 10 - Espessura da Incrustação de 25 mm com variação dos fluidos no interior do duto e altura de detecção.

h (mm)	Espessura da Incrustação (mm)			Erro Relativo (%)		
	ar	Óleo	água	ar	óleo	água
30	25,0	25,2	25,4	0	0,8	1,6
35	25,0	25,2	25,4	0	0,8	1,6
40	25,0	25,2	25,4	0	0,8	1,6
45	25,0	25,2	25,3	0	0,8	1,2
50	25,0	25,2	25,3	0	0,4	1,2
55	25,0	25,1	25,3	0	0,4	1,2
60	25,0	25,1	25,3	0	0,4	1,2

Tabela 11-Espessura da Incrustação de 50 mm com variação dos fluidos no interior do duto e altura de detecção.

h (mm)	Espessura da Incrustação (mm)			Erro Relativo (%)		
	ar	óleo	água	ar	Óleo	Água
30	50,0	50,2	50,4	0	0,4	0,8
35	50,0	50,2	50,4	0	0,4	0,8
40	50,0	50,2	50,4	0	0,4	0,8
45	50,0	50,2	50,3	0	0,4	0,6
50	50,0	50,2	50,3	0	0,4	0,6
55	50,0	50,2	50,3	0	0,4	0,6
60	50,0	50,2	50,3	0	0,4	0,6

Além disso, a análise das tabelas 10 e 11 mostra a influência da presença do enxofre (S) no óleo bruto mexicano e do cloreto de sódio (NaCl) na água do mar nos resultados obtidos com as equações analíticas, pois com o aumento da espessura das incrustações (25 mm e 50 mm) e conseqüente redução da quantidades dos fluidos no interior do duto, os erros relativos são menores do que os demonstrados na tabela 9.

Neste ponto é importante ressaltar que mediante a validação das equações analíticas para os casos de deposição concêntrica da incrustação, considera-se que as mesmas são válidas para os casos de incrustação com deposição excêntrica.

4.2 ESTUDO DO ÂNGULO DE COLIMAÇÃO

O estudo da divergência do ângulo de colimação da fonte de Cs-137 utilizada no modelo proposto na seção 3.2.2 para obtenção das distribuições de altura de pulso (DAPs) que serão empregadas como conjunto de dados para treinamento das redes neurais artificiais (RNAs) foi realizado por meio da análise de sua influência sobre os coeficientes de atenuação linear do aço AISI 316L, óleo bruto mexicano, CaCO₃ e água salgada (4% NaCl). Em razão de seu coeficiente de atenuação linear relativamente baixo ($\mu = 9,29 \times 10^{-5} \text{ cm}^{-1}$), e conseqüentemente baixa probabilidade de interação da radiação, o ar atmosférico não foi empregado nesta etapa do estudo. Nas tabelas 12, 13, 14 e 15 estão os valores dos coeficientes de atenuação linear para cada um dos materiais/fluidos em relação aos ângulos de colimação (5,73°, 8° e 10°) empregados nas simulações com o código MCNPX. O erro relativo foi calculado por meio da equação 22, onde o valor de referência considerado foi obtido com o programa X-COM do NIST.

Tabela 12 - Coeficiente de atenuação linear do aço AISI 316L para os diferentes ângulos de colimação.

Aço AISI 316L $\mu \text{ (cm}^{-1}\text{)}$			Erro Relativo (%)		
5,73°	8°	10°	5,73°	8°	10°
$5,80 \times 10^{-1}$	$5,87 \times 10^{-1}$	$6,31 \times 10^{-1}$	0,17	1,36	9,19

Tabela 13 - Coeficiente de atenuação linear do óleo bruto mexicano para os diferentes ângulos de colimação.

Óleo bruto México μ (cm^{-1})			Erro Relativo (%)		
5,73°	8°	10°	5,73°	8°	10°
$8,27 \times 10^{-2}$	$8,88 \times 10^{-2}$	$1,33 \times 10^{-1}$	0,24	7,11	60,43

Tabela 14 - Coeficiente de atenuação linear do CaCO_3 para os diferentes ângulos de colimação.

CaCO_3 μ (cm^{-1})			Erro Relativo (%)		
5,73°	8°	10°	5,73°	8°	10°
$2,16 \times 10^{-1}$	$2,22 \times 10^{-1}$	$2,66 \times 10^{-1}$	0,46	2,30	23,72

Tabela 15 - Coeficiente de atenuação linear da água salgada para os diferentes ângulos de colimação.

Água Salgada μ (cm^{-1})			Erro Relativo (%)		
5,73°	8°	10°	5,73°	8°	10°
$8,90 \times 10^{-2}$	$9,50 \times 10^{-2}$	$1,39 \times 10^{-1}$	0,11	6,86	57,95

Analisando as tabelas 12, 13, 14 e 15, verifica-se que embora o ângulo de colimação de 5,73° apresente os menores erros relativos para todos os materiais estudados é possível empregar no modelo proposto da seção 3.2.2 o ângulo de 8° para otimização da fonte de Cs-137, dado que os maiores erros relativos são referentes ao óleo bruto mexicano (7,11%) e à água salgada (6,86%). Os erros relativos obtidos com o ângulo de 10°, para o óleo bruto mexicano, CaCO_3 e água do mar, impedem sua aplicação no modelo proposto.

4.3 PREDIÇÃO DAS ESPESSURAS DAS INCRUSTAÇÕES CONCÊNTRICAS

Nesta primeira fase do estudo com redes neurais artificiais, foram utilizados os 37 arquivos de saída obtidos com o MCNP6, aleatoriamente subdivididos entre conjuntos de Treinamento, Teste e Validação. A título de ilustração, as DAPs obtidas com o detector 1 (D1), detector 2 (D2) e detector 3 (D3) para a espessura de 60 mm estão demonstradas na figura 27, onde constata-se que a maior contribuição nas contagens registradas nas regiões sensíveis dos detectores é relativa ao espalhamento do feixe

incidente, confirmando a predominância do efeito Compton, conforme citado na seção 3.2.1.

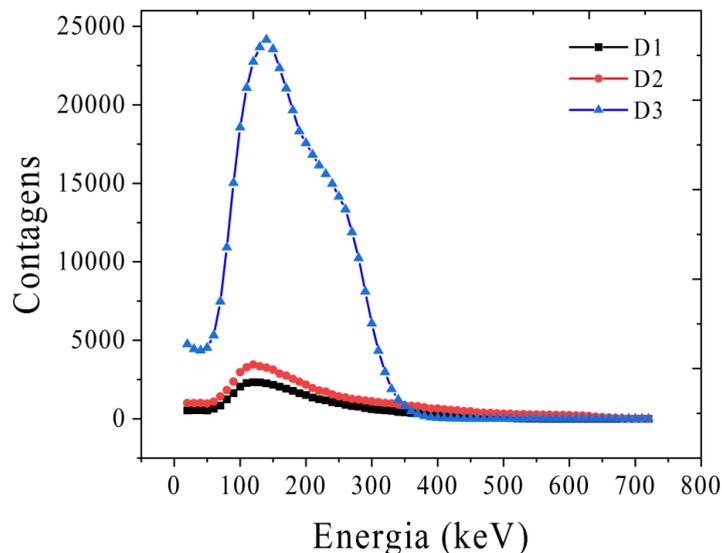


Figura 27- DAPs obtidas com os detectores D1, D2 e D3 para as espessuras de CaCO_3 de 60 mm.

Os parâmetros de treinamento supervisionado com o algoritmo de *backpropagation* que apresentaram melhor resposta da rede neural artificial *Perceptron Feedforward* de três camadas na predição das espessuras com deposição concêntrica são mostrados na tabela 16. O critério de parada empregado foi o de validação cruzada.

Tabela 16- Parâmetros de treinamento da RNA para predição de espessuras concêntricas.

Taxa de Aprendizagem $\eta = 0,01$		Momento = 0,1			
PARÂMETROS	CAMADAS*				
	Entrada	Intermediária		Saída	
Função de Ativação	Linear [-1,1]	Gaussiana	Tanh	Gaussiana Complementar	Logística
Neurônios	178	30	30	30	1

* A RNA possui apenas uma camada intermediária, no entanto é possível selecionar três funções de ativação diferentes.

Na figura 28 é apresentada a correlação entre as espessuras reais e as preditas pela RNA. Neste ponto, torna-se necessário ressaltar que os valores denominados reais são os valores da incrustação definidos nas simulações com o código MCNP6.

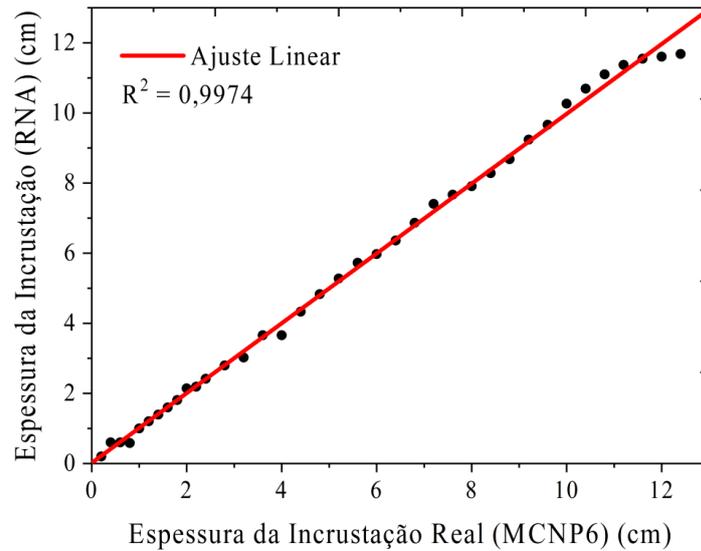


Figura 28- Correlação entre as espessuras concêntricas reais e preditas pela RNA.

Analisando a resposta da RNA para todo o conjunto de dados é possível verificar sua convergência para os casos de deposição concêntrica, o que pode ser comprovado aplicando o método dos mínimos quadrados para um ajuste linear, resultando em um fator de correlação (r^2) de 0,9974.

A figura 29, figura 30 e figura 31 mostra a resposta da RNA para os conjuntos de Treinamento, Teste e Validação e sua correlação com os valores reais de espessura com os respectivos ajustes lineares obtidos com o método dos mínimos quadrados e coeficientes de correlação para os conjuntos de Treinamento ($r^2 = 0,9977$), Teste ($r^2 = 0,9973$) e Validação ($r^2 = 0,9967$).

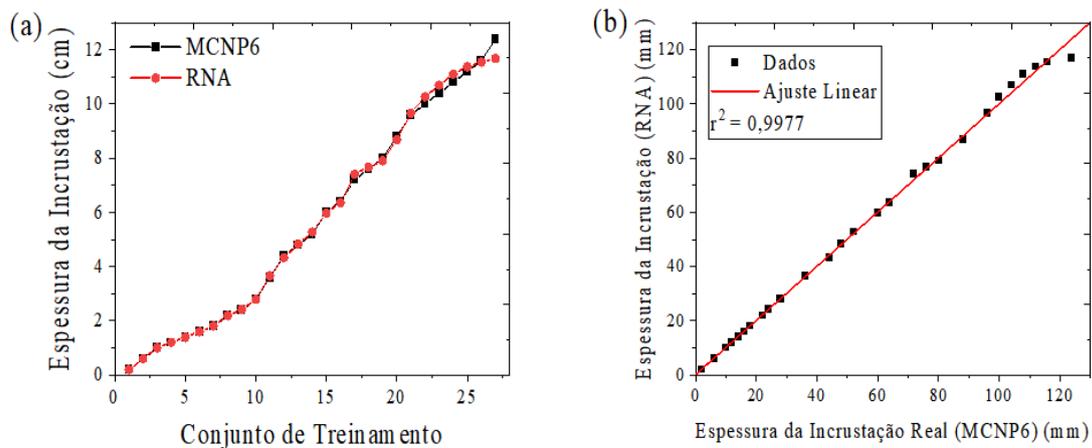


Figura 29 (a)- Resultados obtidos pela RNA para o conjunto de treinamento e (b) seu respectivo ajuste linear.

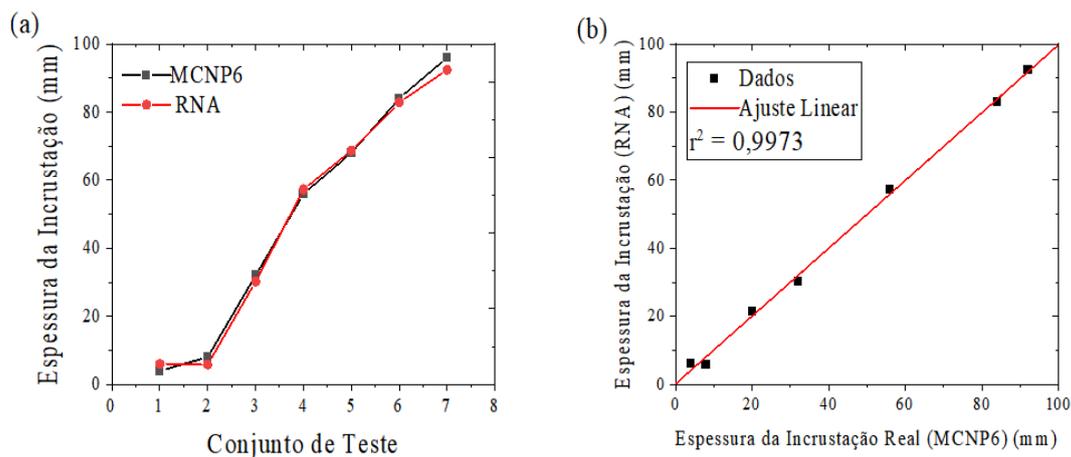


Figura 30 (a)- Resultados obtidos pela RNA para o conjunto de teste e (b) seu respectivo ajuste linear.

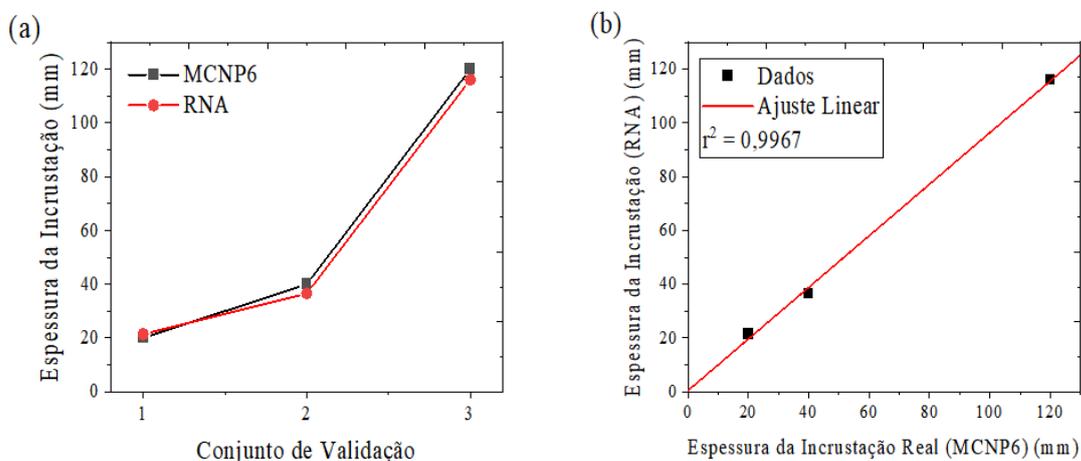


Figura 31(a) - Resultados obtidos pela RNA para o conjunto de validação e (b) seu respectivo ajuste linear.

Os resultados evidenciados nas figuras 28, 29, 30 e 31 mostram a capacidade da RNA em prever as espessuras concêntricas de CaCO_3 , além da escolha adequada do modelo proposto para as simulações com o código MCNP6 para obtenção do conjunto de dados para o treinamento supervisionado da RNA. Os dados processados pela RNA para todo o conjunto de dados (Treinamento, Teste e Validação) estão dispostos na tabela 17, na qual os erros relativos são classificados de 0% até valores maiores que 30%.

Tabela 17 - Dados processados pela RNA para o caso concêntrico.

Erro Relativo	Casos de deposição concêntrica
<5%	86,486
5% - 10%	0
10 - 20%	2,703
20 - 30%	5,405
>30%	5,405
r^2	0,9974

Os resultados mostram que em 86,48% dos casos, o erro é inferior a 5%, o que indica a capacidade da RNA de seguir o padrão dos dados gerados pelo código MCNP6, tanto para espessuras da incrustação relativamente pequenas, por exemplos, os casos de 2 mm a 10 mm, quanto no caso em que foi simulado o entupimento completo do duto pela incrustação (espessura de 124 mm). Os resultados nos quais o erro relativo é maior que 10% (2,703% dos casos na faixa de 10 - 20% e 5,405 % dos casos na faixa de 20 -30% e 5,405% dos casos, acima de 30%) podem ser consequência do número relativamente pequeno do conjunto de dados.

Além disso, através de parâmetros estatísticos é possível avaliar também a eficiência da RNA. Na [tabela 18](#) estão expressos os resultados do erro absoluto médio (MAE), erro quadrático médio (MSE), a raiz quadrada do erro médio (RMSE) e o erro médio relativo (MRE) para todos os padrões e para o conjunto de Validação.

[Tabela 18 - Análise da RNA através de parâmetros estatísticos.](#)

Métricas	Padrões	
	Total (37)	Conjunto de Validação (3)
MAE	0,152	0,525
MSE	0,153	0,433
RMSE	0,189	0,312
MRE (%)	0,658	1,54

Esses resultados mostram que a RNA apresenta, de fato, boa capacidade de generalização, sendo capaz de prever a espessura da incrustação mesmo para os padrões que não foram utilizados nas etapas de treinamento e teste da RNA. Logo, considerou-se a metodologia empregada aceitável para a predição de espessuras de CaCO_3 para o caso de deposição concêntrica com a RNA.

4.4 PREDIÇÃO DAS ESPESSURAS DAS INCRUSTAÇÕES EXCÊNTRICAS

A segunda fase do estudo com redes neurais artificiais (RNAs) consistiu na utilização de 2880 arquivos de saídas obtidos com o código MCNP6, que foram obtidos através da variação da posição da espessura máxima da incrustação excêntrica de CaCO_3 a cada

15° no interior do duto e subdivididos aleatoriamente entre os conjuntos de Treinamento, Teste e Validação. A título de ilustração, as DAPs obtidas nas simulações com os detectores (D1), (D2) e (D3) para a espessura de 84 mm da incrustação são demonstradas na figura 32.

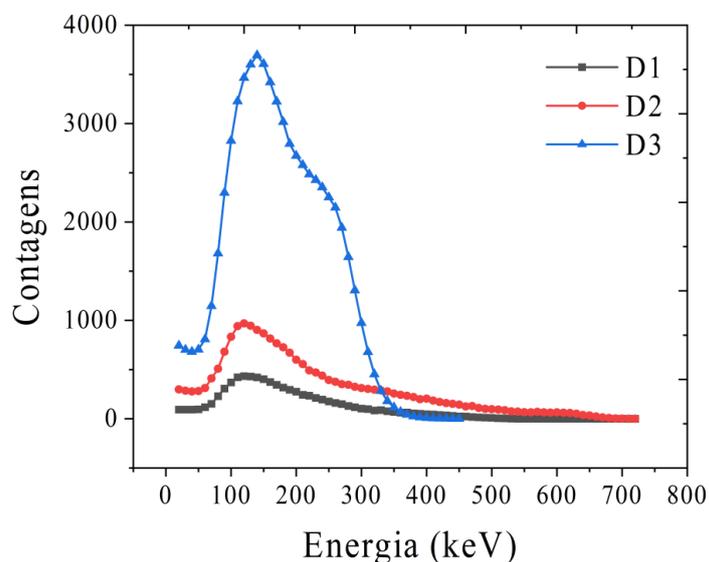


Figura 32 - DAPs obtidas com os detectores D1, D2 e D3, para a espessura excêntrica de CaCO_3 de 84 mm para a posição de 120°.

Os parâmetros de treinamento supervisionado com o algoritmo de *backpropagation* que apresentaram melhor resposta da RNA estão demonstrados na tabela 19. O critério de parada empregado no treinamento foi o de validação cruzada.

Tabela 19-Parâmetros de treinamento da RNA para predição de espessuras excêntricas.

Taxa de Aprendizagem $\eta = 0,01$		Momento = 0,1			
PARÂMETROS		CAMADAS*			
Função de Ativação	Entrada	Intermediárias		Saída	Logística
	Linear [-1,1]	Gaussiana	Tanh15	Gaussiana Complementar	
Neurônios	178	38	38	38	1

* A RNA possui apenas uma camada intermediária, no entanto é possível selecionar três funções de ativação diferentes.

Na figura 33 estão demonstrados os resultados das espessuras de CaCO_3 preditos pela RNA correlacionados com os valores reais que novamente são considerados os valores das espessuras simulados com o código MCNP6, para todo o conjunto de dados.

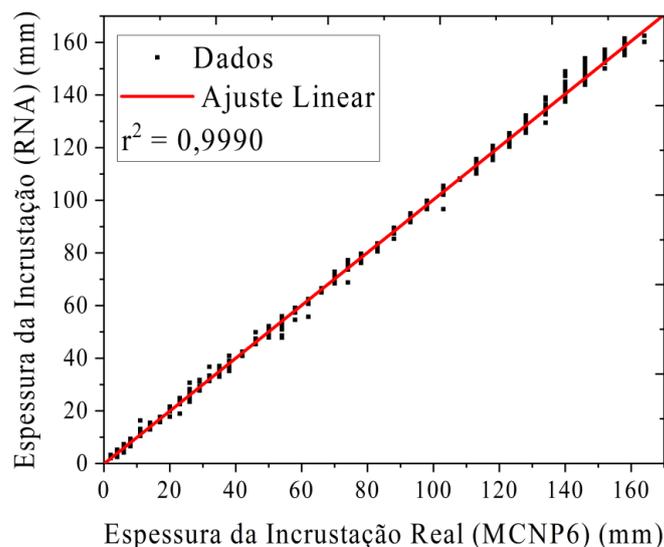


Figura 33- Correlação entre os valores das espessuras excêntricas reais e preditas pela RNA.

Através do ajuste linear com o método dos mínimos quadrados, foi obtido um fator de correlação de 0,9990, logo, assim como no caso de deposição concêntrica, é possível verificar a convergência da RNA para os casos de predição de espessura excêntrica.

Na figura 34 está demonstrado o resultado obtido com a RNA para o conjunto de Treinamento. O ajuste linear foi realizado com o método dos mínimos quadrados, cujo fator de correlação (r^2) é de 0,9994. Devido à grande quantidade de dados não foi demonstrada a correlação entre valores de espessura da incrustação obtidos com a RNA e o MCNP6.

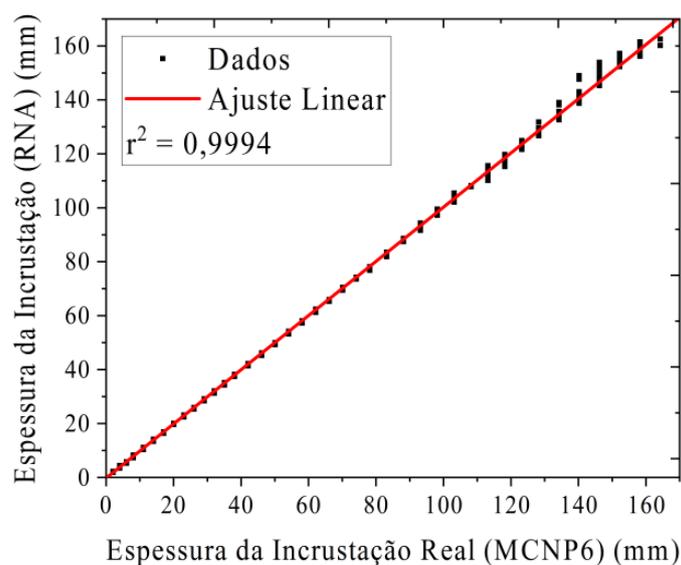


Figura 34 - Ajuste Linear do conjunto de treinamento da RNA.

O resultado da RNA para o conjunto de Teste e para o conjunto de Validação e suas correlações com os valores reais de espessura são mostrados na figura 35 e figura 36.

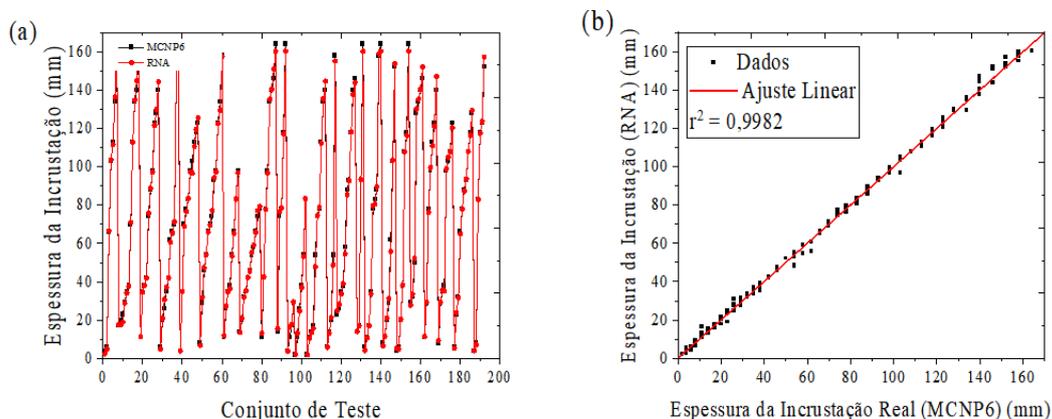


Figura 35- (a) Resultados obtidos pela RNA para o conjunto de Teste (b) seu respectivo ajuste linear.

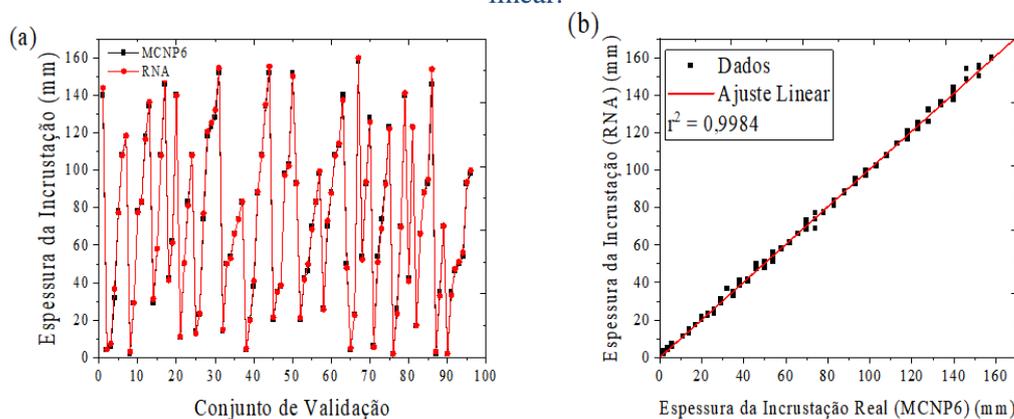


Figura 36- (a) Resultados obtidos pela RNA para o conjunto de Validação (b) seu respectivo ajuste linear.

O resultado do ajuste linear obtido pelo método dos mínimos quadrados para o conjunto de Teste e Validação apresentou um coeficiente de correlação (r^2) 0,9982 e 0,9984 respectivamente.

Os resultados apresentados nas figuras 33, 34, 35 e 36 confirmam a capacidade da RNA em prever as espessuras excêntricas de CaCO_3 independentemente de sua posição no interior da tubulação. Também pode-se verificar que o modelo empregado na obtenção das DAPs com o código MCNP6 foi adequado para obtenção do conjunto de dados para o treinamento supervisionado da RNA *Perceptron Feedforward* de três camadas. A tabela 20 exprime o resultado dos dados processados pela RNA para todo o conjunto de dados (Treinamento, Teste e Validação) para a predição das espessuras de CaCO_3 com deposição excêntrica. Os erros relativos foram classificados de 0% até valores maiores que 30%, onde se verifica que em 91,25% dos casos, o erro relativo foi menor que 5%,

confirmando a análise de que a RNA foi capaz de prever as espessuras máximas de CaCO_3 tanto para valores relativamente pequenos (2 mm) quanto para o maior valor de espessura simulado com o código MCNP6 (164 mm), independentemente de sua posição no interior da tubulação, o que torna o resultado ainda mais expressivo, devido a não uniformidade da deposição.

Tabela 20 - Dados processados pela RNA para o caso excêntrico.

Erro Relativo	Casos de deposição excêntrica
<5%	91,250
5% - 10%	5,417
10 - 20%	2,396
20 - 30%	0,313
>30%	0,625
r^2	0,9990

De fato, o emprego de um conjunto de dados (960 simulações) para o treinamento supervisionado da RNA em comparação com o caso das incrustações concêntricas (37 simulações) contribuiu para melhor desempenho da RNA na predição de espessuras.

A [tabela 21](#) apresenta os parâmetros estatísticos utilizados para avaliar a eficiência dos resultados da RNA, onde é possível confirmar que o treinamento foi adequado, principalmente por meio dos resultados para o conjunto de Validação, que evidencia a boa capacidade de generalização da RNA.

Portanto, considera-se satisfatório o resultado, podendo a metodologia desenvolvida nesta etapa ser empregada na predição de espessuras excêntricas de CaCO_3 .

Tabela 21 - Análise da RNA através de parâmetros estatísticos.

Métricas	Padrões	
	Total (960)	Conjunto de Validação (96)
MAE	0,085	0,129
MSE	0,023	0,035
RMSE	0,154	0,186
MRE (%)	0,244	2,89

4.5 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA COMPOSIÇÃO QUÍMICA DO AÇO

Na figura 37 é apresentado o resultado das simulações com o código MCNPX com os aços HT9, AISI 304L e AISI 440, para obtenção de seus respectivos coeficientes de atenuação linear. Para fins de comparação, optou-se por incluir o resultado para o aço AISI 316L, empregado na geometria de medição. Os coeficientes de atenuação são obtidos por meio de ajuste linear com o método dos mínimos quadrados. Uma análise preliminar dos resultados evidencia que não existem diferenças significativas na atenuação do feixe incidente da fonte Cs-137 nos aços estudados.

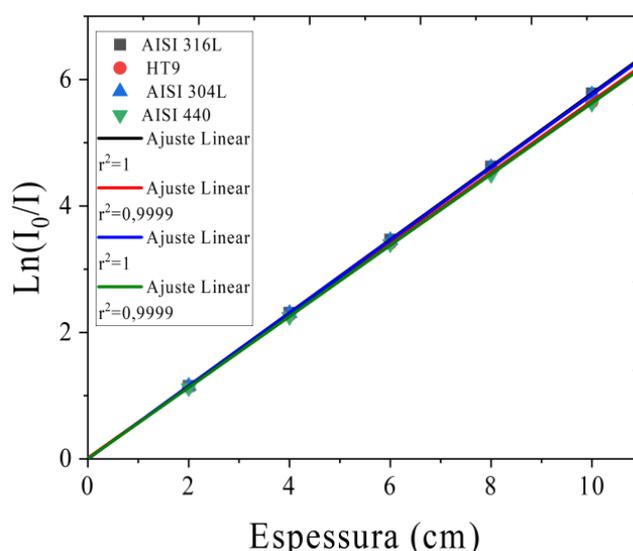


Figura 37- Curvas $\text{Ln}(I_0/I) \times X$ para obtenção do coeficiente de atenuação linear dos aços AISI 316L, HT9, AISI 304L e AISI 440.

O que pode ser confirmado mediante ao cálculo do erro relativo entre os coeficientes de atenuação linear obtidos conforme a equação 22, expressos na tabela 22, onde o valor de referência foi considerado o coeficiente de atenuação linear do aço AISI 316L e o valor observado é o coeficiente de atenuação linear de cada um dos aços estudados.

Tabela 22- Coeficiente de atenuação linear dos aços estudados e seus respectivos erros relativos.

μ (cm^{-1})			Erro Relativo (%)		
AISI440	HT9	AISI304L	AISI440	HT9	AISI304L
$5,63 \times 10^{-1}$	$5,65 \times 10^{-1}$	$5,76 \times 10^{-1}$	2,60	2,24	0,34

De fato, os resultados demonstrados na [tabela 22](#) mostram que não há variações significativas entre os coeficientes de atenuação linear dos aços analisados, mesmo com variações em relação ao teor de Fe (AISI 316L = 63,95%; HT9 = 84,95%; AISI 304L = 69,44%; AISI 440 = 79,50%), principalmente para o aço que AISI304L que porcentagem de Fe mais próxima do aço AISI316L, confirmando que o modelo proposto na seção 3.2.1 poderia ser usado para aços cujas concentrações de ferro estejam dentro das faixas analisadas neste estudo, sem que haja influência nos resultados das espessuras obtidas com as redes neurais artificiais (RNAs).

4.6 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA COMPOSIÇÃO QUÍMICA DO ÓLEO

Os resultados da simulação com o MCNPX são mostrados na [figura 38](#). Para fins de comparação foi novamente plotado o resultado obtido com o óleo bruto México utilizado no modelo proposto. Foi possível verificar a influência da densidade e concentração de enxofre dos óleos estudados em relação à atenuação do feixe incidente da fonte de Cs-137, onde o óleo da bacia de Campos ($\rho = 0,9402 \text{ g/cm}^3$; $S(\%) = 5,99$) apresentou um comportamento mais próximo do óleo bruto mexicano ($\rho = 0,975 \text{ g/cm}^3$; $S(\%) = 4,22$), seguido dos óleos das bacias de Atum ($\rho = 0,886 \text{ g/cm}^3$; $S(\%) = 4,09$), Paru ($\rho = 0,821 \text{ g/cm}^3$; $S(\%) = 3,94$) e Santos ($\rho = 0,751 \text{ g/cm}^3$; $S(\%) = 0,021$).

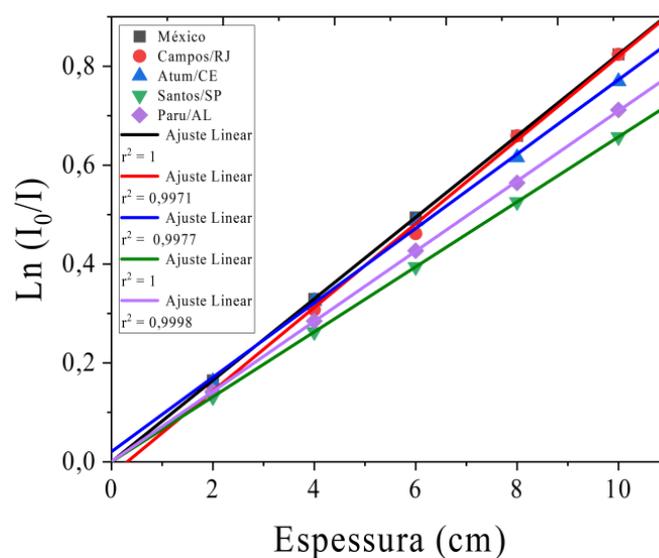


Figura 38-Curvas $\ln(I_0/I) \times X$ para obtenção do coeficiente de atenuação linear dos óleos brutos brasileiros.

Na [tabela 23](#) estão expressos os coeficientes de atenuação linear dos óleos brutos de petróleo brasileiros estudados e seus erros relativos, onde se considerou como valor de referência o coeficiente de atenuação linear do óleo bruto México.

Tabela 23-Coeficiente de atenuação linear dos óleos brasileiros estudados e seus respectivos erros relativos.

μ ($\times 10^{-2} \text{ cm}^{-1}$)				Erro Relativo (%)			
Santos	Paru	Atum	Campos	Santos	Paru	Atum	Campos
6,57	7,10	7,52	8,46	20,27	13,84	8,74	2,67

Os resultados da [tabela 23](#) confirmam a análise inicial da [figura 38](#). Neste caso, o óleo bruto da bacia de Campos poderia ser empregado no modelo proposto na seção 3.2.1, sem prejuízo nos resultados obtidos com as redes neurais artificiais para predição das espessuras das incrustações, sendo de fato o óleo que apresenta densidade mais próxima do óleo bruto México. Para os demais óleos analisados, não se descarta o emprego no modelo adotado neste trabalho, no entanto se sugere novo treinamento das RNAs utilizadas nas seções 3.3.1 e 3.3.2, principalmente para os óleos das bacias de Santos e Paru, que apresentaram os maiores valores dos erros relativos, 20,27% e 13,84%, respectivamente.

4.7 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA COMPOSIÇÃO QUÍMICA DO GÁS METANO

A [figura 39](#) mostra os resultados das simulações com o código MCNPX para avaliar a presença de diversos gases, em diferentes composições no gás natural bruto, sua análise mostra a influência da densidade e concentração de C_4H_4 na atenuação do feixe incidente da fonte de Cs-137, onde há menor atenuação do feixe no gás da Argentina ($\rho = 5,9 \times 10^{-4} \text{ g/cm}^3$; C_4H_4 (%) = 95), seguido dos gases do Rio de Janeiro ($\rho = 6,2 \times 10^{-4} \text{ g/cm}^3$; C_4H_4 (%) = 88,44), Venezuela ($\rho = 7,0 \times 10^{-4} \text{ g/cm}^3$; C_4H_4 (%) = 78,10) e Irã ($\rho = 8,7 \times 10^{-4} \text{ g/cm}^3$; C_4H_4 (%) = 66). Neste ponto é importante ressaltar que devido à densidade do metano ($\rho = 6,67 \times 10^{-4} \text{ g/cm}^3$) relativamente baixa em relação aos outros materiais presentes neste estudo, a espessura do material absorvedor da seção 3.1.1 empregada nas simulações foi de 0 a 20 cm, aumentada em passos de 2 cm.

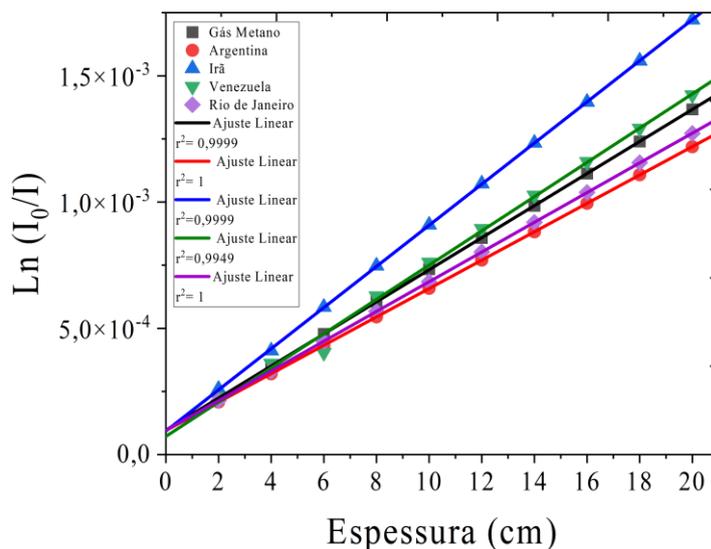


Figura 39- Curvas $\text{Ln}(I_0/I) \times X$ para obtenção do coeficiente de atenuação linear dos gases estudados.

Na tabela 24, são apresentados os coeficientes de atenuação linear de todos os gases, onde foi considerado como valor de referência, o coeficiente de atenuação linear do gás metano puro.

Tabela 24-Coeficiente de atenuação linear dos gases estudados e seus respectivos erros relativos.

μ ($\times 10^{-5} \text{cm}^{-1}$)				Erro Relativo (%)			
Argentina	Rio de Janeiro	Venezuela	Irã	Argentina	Rio de Janeiro	Venezuela	Irã
5,62	5,88	6,78	8,15	11,49	7,40	6,77	28,18

De fato, os resultados da tabela 24 confirmam a análise da figura 39, onde os maiores erros relativos são encontrados no gás natural iraniano (28,18%) e argentino (11,49%), indicando que no caso de sua utilização no modelo da seção 3.2.1, poderia ser necessário realizar novo treinamento das RNAs utilizadas nas seções 3.3.1 e 3.3.2. Para os demais gases naturais considerados, os erros relativos obtidos em relação ao gás metano puro indicam que poderiam ser empregados sem prejuízos nos resultados obtidos com as RNAs.

4.8 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA COMPOSIÇÃO QUÍMICA DA INCRUSTAÇÃO

Para análise da composição química das incrustações considerou-se a presença das incrustações carbonáticas de MgCO_3 , SrCO_3 e BaCO_3 no CaCO_3 , nas concentrações de 10%, 20%, 30% e 40%. Os resultados das simulações com o MCNPX são mostrados na figura 40.

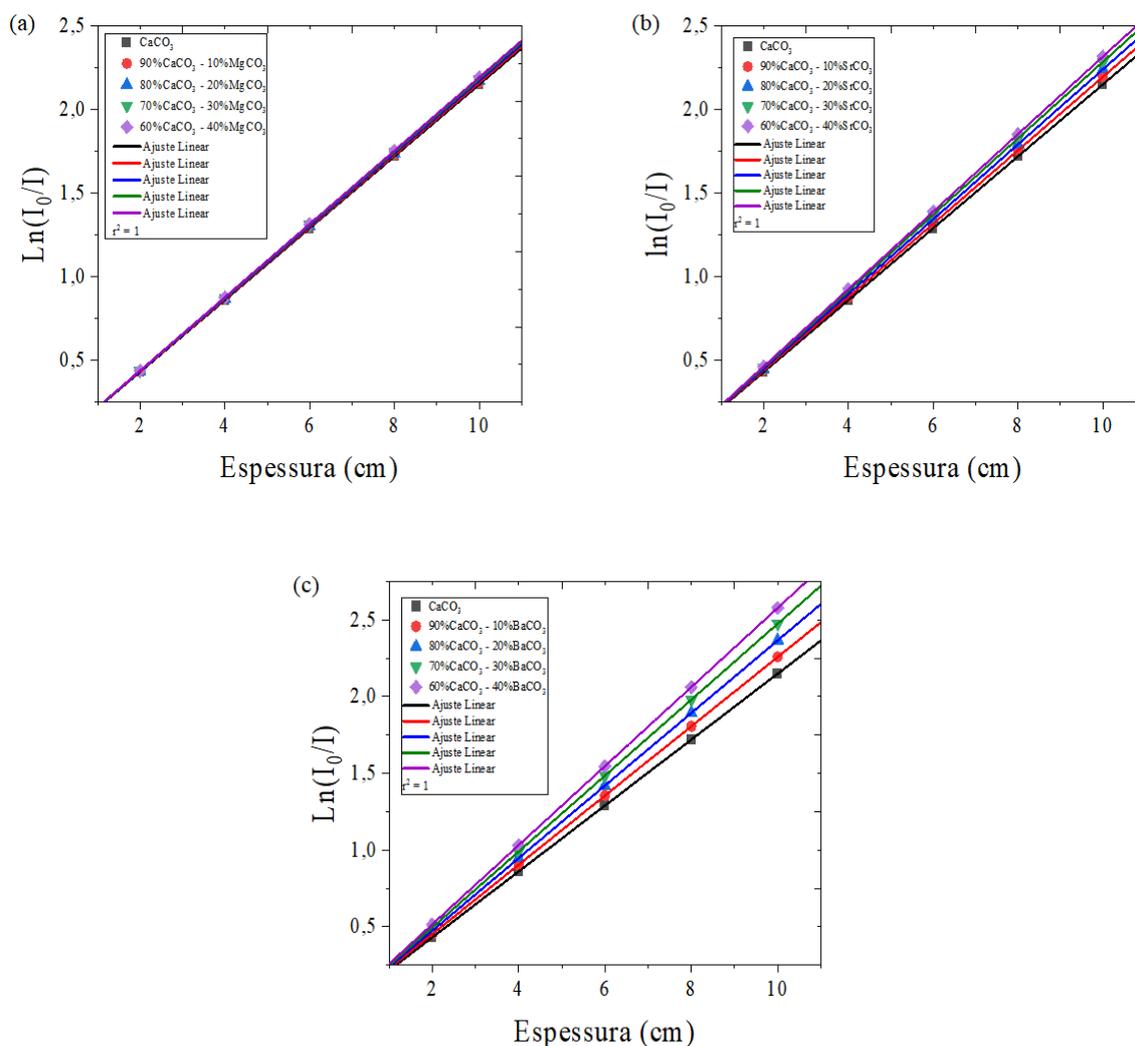


Figura 40- Curvas $\text{Ln}(I_0/I) \times X$ para obtenção do coeficiente de atenuação linear das incrustações de CaCO_3 considerando a presença de: (a) MgCO_3 , (b) SrCO_3 e (c) BaCO_3 .

Na tabela 25 estão dispostos os resultados dos coeficientes de atenuação linear obtidos com ajuste linear por meio do método dos mínimos quadrados para os compostos. Os erros relativos foram calculados conforme a equação 22, onde se considerou como valor de referência, o coeficiente de atenuação linear do CaCO_3 puro obtido na seção 4.1.1.

Tabela 25 - Coeficiente de atenuação linear das incrustações estudados e seus respectivos erros relativos.

Composto	μ ($\times 10^{-1} \text{cm}^{-1}$)	Erro Relativo (%)
90%CaCO₃ 10%MgCO₃	2,16	0,46
80%CaCO₃ 20%MgCO₃	2,17	0,93
70%CaCO₃ 30%MgCO₃	2,18	1,39
60%CaCO₃ 40%MgCO₃	2,19	1,86
90%CaCO₃ 10%SrCO₃	2,20	2,32
80%CaCO₃ 20%SrCO₃	2,23	3,72
70%CaCO₃ 30%SrCO₃	2,28	6,04
60%CaCO₃ 40%SrCO₃	2,31	7,44
90%CaCO₃ 10%BaCO₃	2,25	4,65
80%CaCO₃ 20%BaCO₃	2,36	9,76
70%CaCO₃ 30%BaCO₃	2,47	14,88
60%CaCO₃ 40%BaCO₃	2,57	19,53

Avaliando os resultados da [tabela 25](#) apenas a presença do BaCO₃ nas incrustações de CaCO₃ poderiam causar uma divergência nos valores de espessuras obtidos com o modelo proposto na seção 3.2.1, devido à discrepância de 14,88% (presença de 30% de BaCO₃) e 19,53% (presença de 40% de BaCO₃) observada no coeficiente de atenuação linear, quando comparado com o valor obtido para uma incrustação composta 100% de CaCO₃, o que pode ser explicado pela maior densidade do BaCO₃ ($\rho = 4,29 \text{ g/cm}^3$) em relação as demais incrustações analisadas (MgCO₃; $\rho = 2,96 \text{ g/cm}^3$ e SrCO₃; $\rho = 3,50 \text{ g/cm}^3$), o que mostra a importância do conhecimento da densidade dos materiais, mesmo não sendo utilizadas as equações analíticas para o cálculo das espessuras. A fim de evitar erros relativos maiores que os obtidos com as RNAs empregadas neste estudo, no caso da presença de BaCO₃, em uma concentração maior que 30%, deve ser realizado um novo treinamento das RNAs utilizadas nas seções 3.3.1 e 3.3.2.

CAPÍTULO V

5 CONCLUSÃO

Neste trabalho foi proposta uma metodologia para predição de espessuras de CaCO_3 com deposição concêntrica e excêntrica em uma tubulação de aço inoxidável AISI 316L com escoamento trifásico anular, formado por óleo bruto de petróleo mexicano, água salgada (4%NaCl) e gás, visando a aproximação das situações reais encontradas na indústria petrolífera.

Baseando-se na técnica de densitometria gama foi desenvolvido um modelo matemático com o código MCNP6 para gerar um conjunto de dados formado pelas distribuições de altura de pulso (DAPs) registradas em três detectores cintiladores de NaI(Tl) dispostos a 120° ao redor da tubulação, para cada um dos valores de espessuras de CaCO_3 simulados. Para as incrustações concêntricas, a espessura da incrustação foi variada de 2 a 124 mm, caso limite, simulando a interrupção completa do escoamento bifásico, resultando em 37 simulações. Com as incrustações excêntricas, o valor da espessura máxima foi variado de 2 a 164 mm em 24 posições diferentes dentro da tubulação, gerando 960 simulações. Tal conjunto de dados foi empregado para o treinamento supervisionado das redes neurais artificiais (RNAs) *Perceptron FeedForward* com o algoritmo de *backpropagation*. O emprego das RNAs na predição de espessuras de CaCO_3 teve por objetivo contornar dificuldades como a necessidade de informações específicas sobre o regime de escoamento imprescindíveis no uso de equações analíticas para o cálculo de espessuras de incrustações.

Os resultados obtidos neste trabalho indicam que a metodologia desenvolvida é considerada promissora para aplicação em sistemas reais da indústria petrolífera, podendo ser empregada na predição de espessuras das incrustações em tubulações, auxiliando na escolha de métodos de remoção adequados, bem como para a avaliação do uso de inibidores de incrustações, dado que em aproximadamente 87% dos casos de deposição concêntrica e em 97% dos casos de deposição excêntrica, as RNAs foram capazes de prever a espessuras com um erro relativo menor que 10%, embora ainda seja necessária a validação experimental desta metodologia.

Além disto, foi realizado um estudo com objetivo de analisar a influência da composição química do aço, óleo bruto de petróleo, gás natural e da incrustação de CaCO_3 no modelo matemático empregado para obtenção do conjunto de dados para o treinamento supervisionado das RNAs com o código MCNP6 e verificar a adequabilidade do mesmo para materiais com diferentes composições químicas, por meio da obtenção de seus coeficientes de atenuação linear e respectivas comparações com os empregados no modelo matemático.

Para os três tipos de aço analisados, HT9, AISI 304L e AISI 440 não foram encontradas divergências significativas em seus coeficientes de atenuação linear em comparação com o aço AISI 316L, indicando a possibilidade do emprego de aços inoxidáveis com teor de ferro entre 63,95% e 84,95% sem possível influência nos resultados obtidos com as RNAs.

No caso do estudo dos óleos brutos de petróleo, desvios relativos maiores que 10% nos coeficientes de atenuação linear em comparação com o óleo bruto mexicano, foram encontrados nos óleos dos campos de Santos (20,27%) e Paru (13,84%).

A influência da variação na composição do gás natural foi analisada para quatro tipos diferentes de gases e comparada com o gás metano puro utilizado no estudo com as RNAs. Os erros relativos maiores que 10% foram encontrados no gás natural Iraniano (28,18%) e Argentino (11,49%).

A análise da presença de MgCO_3 , SrCO_3 e BaCO_3 nas incrustações de CaCO_3 mostrou que apenas o caso do BaCO_3 , em concentrações acima de 30%, poderia causar variações significativas nos resultados obtidos neste trabalho.

Portanto, é razoável afirmar que o modelo desenvolvido com o MCNP6 poderia ser empregado para diferentes tipos de tubulações de aço inoxidável, óleo bruto de petróleo, gás natural e incrustações. No entanto, nos casos em que os coeficientes de atenuação linear de novos materiais e fluidos apresentarem discrepâncias relativamente grandes aos utilizados neste trabalho poderia ser necessário o retreinamento das RNAs utilizadas.

Como trabalhos futuros, têm-se as seguintes propostas:

i) Validação experimental dos resultados obtidos.

- ii) Análise da influência do tipo de escoamento trifásico, nos resultados obtidos com a RNA.
- iii) Treinar uma rede com materiais e fluidos que apresentem propriedades diferentes dos utilizados.
- iv) Considerar a presença de NORMs nas incrustações.
- v) Comparar os resultados obtidos com a incrustação de CaCO_3 com os resultados para BaSO_4 .
- vi) Projetar uma rede profunda.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABINOX, Disponível em: <<https://www.abinox.org.br/site/aco-inox.php>. > . Acesso em 13 de março de 2021.

AGGARWAL, C. C. *Neural networks and deep learning*. [S. l.]: Springer, 2018. ISBN 978-3-319-94462-3.

ALLAGA, D.A., WU, G., SHARMA, M.M.M, LAKE,L.W. Barium and calcium sulfate precipitation and migration inside sand packs. *SPE Form Eval* 7 (1992): 79–86. doi: <https://doi.org/10.2118/19765-PA>.

ALMEIDA, C. J. *Gás natural no panorama brasileiro e um estudo de caso do setor automotivo*. 2015. 88 p. Monografia (Graduação em Engenharia Elétrica) - Universidade Estadual Paulista, Guaratinguetá, 2015.

ANP, Disponível em: <<https://www.gov.br/anp/pt-br>>. Acesso em 15 de abril de 2021.

AQUATEKPRO, Disponível em: < <https://www.aquatekpro.com/scale-control.html>>. Acesso em 16 de julho de 2021.

ASTUTO, A. *Desenvolvimento de um sistema de inspeção de tubos usando a técnica de transmissão gama*. 1995. Dissertação. (Mestrado em Engenharia Nuclear). Universidade Federal do Rio de Janeiro, RJ, 1995.

BESERRA, M.T.F. *Avaliação da espessura de incrustação em dutos de extração de petróleo*. Dissertação (Mestrado em Radioproteção e Dosimetria). Instituto de Radioproteção e Dosimetria/Comissão Nacional de Energia Nuclear. Rio de Janeiro, 2012.

BEZERRA, M.C.M, KHALIL, C.N., ROSÁRIO, F.F. Barium and strontium sulfate scale formation due to incompatible water in the Namorado Field, Campos Basin, Brazil. *SPE Latin America Petroleum Engineering Conference*. 1990. Rio de Janeiro: Brazil. DOI: <https://doi.org/10.2118/21109-MS>.

BOTELHO, M. H.D.S. *Metodologia para mapeamento 3D de doses em um depósito de rejeitos radioativos utilizando MCNP e redes neurais*. 2018. 87 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Nuclear) - Programa de Pós-Graduação em Engenharia Nuclear, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2018.

CAI, S., TORAL, H., QIU, J., ARCHER, J.S., Neural network based objective flow regime identification in air-water two phase flow. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, v. 72, n3, p.440-445, 1994. DOI: <https://doi.org/10.1002/cjce.5450720308>.

CANEIRO JR, C. *Desenvolvimento de um sistema de inspeção baseado em transmissão da radiação gama para aplicação em dutos e colunas industriais*. Dissertação (Mestrado em Engenharia Nuclear). Universidade Federal do Rio de Janeiro. Rio de Janeiro, 2006.

CARVALHO, A. C. L. *Técnicas de descontaminação de material radioativo de ocorrência natural (NORM) na indústria de óleo e gás*. 2019. 91 p. Monografia (Pós-Graduação em Proteção Radiológica) - Faculdade Casa Branca, Casa Branca, 2019.

CASTRO, B. B. *Avaliação da corrosão em operações de remoção de incrustações carbonáticas*. 2015. 88 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Metalúrgica e de Materiais) - Programa de Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica e de Materiais, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2015.

DAM, R.S.F; SALGADO, W.L.; SALGADO, A.G.M.; SALGADO, C.M. Source-detector effective solid angle calculation using MCNP6 code. *Brazilian Journal of Radiation Sciences*, v.9, n.1A, p. 01-12, 2021 .DOI: <https://doi.org/10.15392/bjrs.v9i1>.

DEEPLARNINGBOOK, Disponível em: <<https://www.deeplearningbook.com.br>> Acesso em 10 de novembro de 2021.

DIEBES, E.F., JESSEN, F.W. Carbonate scale formation on steel surfaces. *18th Annual Technical Meeting, The Petroleum Society of CIM*. Banff: Alberta. 1967.

FERREIRA, F. G. *Classificação de Petróleos*. 2018. 105 p. Tese (Doutorado em engenharia elétrica) - Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2018.

FURTADO, M. I. V. *Redes neurais artificiais: Uma abordagem para sala de aula*. Ponta Grossa (PR): Atena Editora, 2019. ISBN 978-85-7247-326-2.

GARCIA, J.P.C. *Análise de incrustações por técnicas atômicas/nucleares*. Tese (Doutorado em Engenharia Nuclear). Universidade Federal do Rio de Janeiro. Rio de Janeiro, 2010.

GOUVEIA, J.M.G. *Inspeção de tubos usando a técnica de transmissão gama e detectors CsI(Tl)*. Dissertação (Mestrado em Engenharia Nuclear). Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2000.

GOUVEIA, M.A.G. *Sistema de caracterização de materiais em dutos por espalhamento de radiação*. Dissertação (Mestrado em Engenharia Nuclear). Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2000.

HAYKIN, S. *Neural networks: A comprehensive Foundation*. 9^a. ed. [S. l.]: Pearson Education, 2005. ISBN 81-7808-300-0.

KAMAL, M. S., HUSSEIN, I., MAHMOUD, M., SULTAN, A., SAAD, M.A.S. Oilfield scale formation and chemical removal: A review. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, [s. l.], v. 171, p. 127-139, 218.

KNOLL, G. F. *Radiation Detection and Measurement*. 3^a. ed. Jonh Wiley & Sons, 2000.

KUMAR, S., NAIYA, T.K., KUMAR, T. Developments in oilfield scale handling towards green technology-A review, *Journal of Petroleum Science and Engineering* (2018), doi:10.1016/j.petrol.2018.05.068.

LANL. (2003). *MCNP - A general Monte Carlo n-particle transport code* (5 ed., Vol. Volume I: Overview and Theory). New Mexico: Los Alamos National Laboratory.

LINDLOF, J.C., STOFFER, K.G., A case study of seawater injection incompatibility. *Journal of Petroleum Technology*. 1983. DOI: <https://doi.org/10.2118/9626-PA>

MARQUES, L. M. C. *Estudo Comparativo de Detectores de HPGe, NaI(Tl), CdZnTe para aplicações em segurança e para resposta a ameaças Nucleares e Radiológicas*. 2011. 170 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Física) - Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa, Lisboa, 2011.

MCCONN JR, R. J. *et al. Compendium of material composition data for radiation Transport Modeling*. 1^a. ed. rev. [S. l.: s. n.], 2011.

McElhiney, J.E., Sydansk, R.D., Lintelmann, K.A., Benzel, W.M., and Kimberly B. D. Determination of In-Situ Precipitation of Barium Sulphate During Coreflooding. *International Symposium on Oilfield Scale*, Aberdeen, United Kingdom, January 2001. doi: <https://doi.org/10.2118/68309-MS>.

MI, Y., TSOUKALAS, L. H., ISHII, M., XIAO, Z. Hybrid fuzzy-neural flow identification methodology. *5th International Conference on Fuzzy-Systems*, 1996. New Orleans, L.A.

MITCHELL, R.W., GRIST, D.M., BOYLE, M.J. Chemical treatments associated with North Sea projects. *Journal of Petroleum Technology*. 1980. DOI: <https://doi.org/10.2118/7880-PA>

MIZRAHI, S. S.; GALETTI, D. *Física Nuclear e de Partículas: Uma Introdução*. 1^a. ed. São Paulo: Livraria da Física, 2016. ISBN 978-85-7861-40-2.

Moghadasi, J., Jamialahmadi, M., Miller-Steinhagen, H., Sharif, A., Izadpanah, M., Motaei, E., Barati, R. (2002). Formation Damage in Iranian Oil Fields. *SPE International Symposium and Exhibition on Formation Damage Control*, Lafayette, La. 10.2118/73781-MS.

OLAJIRE, A. A. A review of oilfield mineral scale deposits management technology for oil and gas production. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, [s. l.], 2015. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.petrol.2015.09.011>.

OLIVEIRA, D.F., NASCIMENTO, J.R., MARINHO, C.A., LOPES, R.T. Gamma transmission system for detection of incrustation in oil exploration pipelines. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*. v.784. p 616-620. 2014 DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nima.2014.11.030>.

OPEC, Disponível em: < https://www.opec.org/opec_web/en/publications/338.htm>. Acesso em 06 de setembro de 2021.

PELOWITZ, D.B., MCNP-X TM User's Manual, Version 2.5.0, LA-CP-05-0369, Los Alamos National Laboratory, 2005.

READ, P.A., RIGEN, J.K. *The use of laboratory tests to evaluate scaling problems during water injection. 6th International Symposium on Oilfield and Geothermal Chemistry.* 1982. Dallas: Texas.

SALGADO, C. M. *Identificação de regimes de fluxo e predição de frações de volume em sistemas multifásicos usando técnica nuclear e rede neural artificial.* 2010. 161 p. Tese (Doutorado em Engenharia Nuclear) - Programa de Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica e Nuclear, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2010.

SALGADO C.M., BRANDÃO L.E.B., SCHIRRU R., PEREIRA C.M.N.A., CONTI C.C., 2012 "Validation of aNaI(Tl) detector's model developed with MCNPX code". *Progress in Nuclear Energy*, vol. 59, pp.19–25.

SALGADO, W.L., DAM, R.S.F, TEIXEIRA, T.P., CONTI, C.C., SALGADO., C.M. Application of artificial intelligence in scale thickness prediction on offshore petroleum using a gamma-ray densitometer. *Radiation Physics and Chemistry.* 2019. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2019.108549>, vol. 168.

SALGADO, W.L., DAM, R.S.F., CONTI, C.C., SALGADO., C.M. Calculation of scales in oil pipeline using gamma-ray densitometry and artificial intelligence. *Measurement.* 2021. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.measurement.2021.109455>, vol. 179.

SEKOGUCHI, K., INOUE, K., IMASAKA, T. Void signal analysis and gas-liquid two phase flow regime determination by a statistical pattern recognition method. *The Japan Society of Mechanical Engineers.* p 1266-1273. 1987.

SHOHAM, O. *Mechanistic modeling of gas-liquid two-phase flow in pipes.* [S. l.]: Society of Petroleum Engineers, 2006. 396 p. ISBN 978-1555631079.

SIPPEL, R. F., GLOVER, D. The solution alteration of carbonate rocks, the effects of temperature and pressure. *Geochimica et Cosmochimica Acta.* v. 28. P -1401-1417. 1964.

SOARES, M. *Sistema de detecção de incrustações em dutos de transporte de petróleo pela técnica de transmissão gama.* Tese (Doutorado em Engenharia Nuclear). Universidade Federal do Rio de Janeiro. Rio de Janeiro, 2014.

STIFF JR., H.A., DAVIS, L.E. A method for predicting the tendency of oil field waters to deposit calcium carbonate. *The American Institute of Mining, Metallurgical and Petroleum Engineers*. v. 195, p. 213-216. 1952.

TAUHATA, L., SALATI, I., DI PRINZIO, R., DI PRINZIO, AR. *Radioproteção e Dosimetria: Fundamentos*. 5ª. ed. Rio de Janeiro: IRD/CNEN, 2003. 242 p.

TAUHATA, L., SALATI, I., DI PRINZIO, R., DI PRINZIO, AR. *Radioproteção e Dosimetria: Fundamentos*. 10ª. ed. Rio de Janeiro: IRD/CNEN, 2014. 344 p.

TEIXEIRA, J.B. *Petrografia de rochas reservatório areníticas e relação com diferentes técnicas de obtenção de parâmetros petrofísicos*. 2016. 128p. Dissertação (Mestrado em Geociências) – Universidade Federal Fluminense. Niterói, 2016.

TEIXEIRA, T.P. *Predição da espessura de incrustação em tubulações usadas no transporte de petróleo utilizando radiação gama e rede neural artificial*. Dissertação (Mestrado em Ciência e Tecnologia Nucleares). Instituto de Engenharia Nuclear/Comissão Nacional de Energia Nuclear. Rio de Janeiro, 2018.

TEIXEIRA, T. P., SANTOS, M.C., BARBOSA, C.M., SALGADO, W.L., DAM, R.S.F., SALGADO, C.M., SCHIRRU, R., LOPES, R.T. Determination of eccentric deposition thickness on offshore horizontal pipes by gamma-ray densitometry and artificial intelligence technique. *Applied Radiation and isotopes*, [s. l.], v. 165, 2020. DOI <https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2020.109221>.

TRIGGIA, A. A. *et al. Fundamentos da Engenharia de Petróleo*. 2ª. ed. Rio de Janeiro: Editora Interciência, 2004. ISBN 85-7193-046-5.

TODREAS, N. E.; KAZIMI, M. S. *Nuclear Systems I: Thermal Hydraulic Fundamentals*. [S. l.: s. n.], 1993. ISBN 1-56032-051-6.

WAT, R.M.S., SORBIE, K.S., TODD, A.C., PING, C., JIANG, P. Kinetics of BaSO₄ crystal Growth and effect in formation damage. *SPE Formation Damage Control Symposium*. 1992. Laffayette, Louisiana.

WATKINSON, A.P., MARTINEZ, O. Scaling of heat exchanger tubes by calcium carbonate. *Journal of Heat Transfer*. 1975. DOI: <https://doi.org/10.1115/1.3450419>

ANEXO A: Etapas de formação do petróleo e gás natural

O petróleo é formado basicamente pela deposição de matéria orgânica aos sedimentos, submetidos a condições extremas de pressão e temperatura. O produto final encontrado na rocha reservatório, água, óleo e gás, é o resultado de um processo constituído por quatro etapas, mostradas na [figura A1](#).

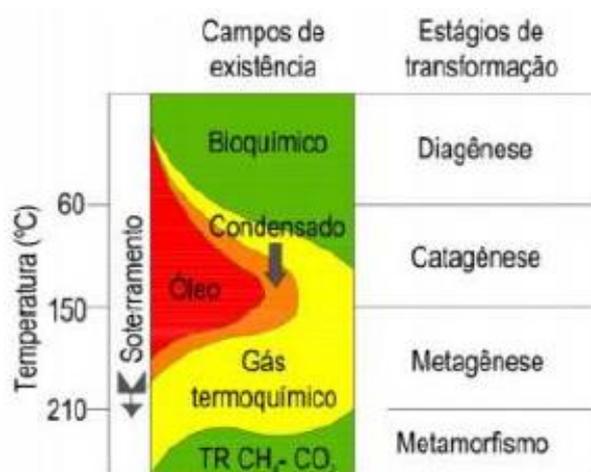


Figura A1 - Processos termoquímicos que compreendem a formação do petróleo e gás natural. (CARVALHO, 2019 apud TRIGGIA *et al.*, 2004).

Durante a diagénesse, marcada por temperaturas em torno de 65°C, a matéria orgânica é transformada em querogênio pela ação de bactérias aeróbicas e anaeróbicas. Esta etapa é caracterizada pela produção de metano. A deposição contínua de sedimentos causa o soterramento da rocha geradora e impõe ao querogênio novas condições de pressão e temperatura, resultando no surgimento de novos produtos. Para a faixa de 65°C a 165°C, na catagénesse, as moléculas de querogênio são quebradas, gerando hidrocarbonetos líquidos e gás metano úmido. Acima de 165°C, inicia-se a metagénesse, etapa na qual as moléculas dos hidrocarbonetos são quebradas, dando origem ao gás metano seco. Para temperaturas acima de 210°C, no metamorfismo, os hidrocarbonetos com traços de grafite, gás carbono e gás metano são degradados (TRIGGIA *et al.*, 2004).

O processo de geração de petróleo explica a presença de óleo e gás nas rochas reservatório. A presença da água pode ser explicada pela migração de aquíferos

próximos aos reservatórios, a depender da porosidade das rochas (TRIGGIA *et al.*, 2004).

Logo, os hidrocarbonetos extraídos consistem de uma mistura de componentes, como, N_2 , CO_2 , H_2S , $C_1 - C_6$, C_7^+ , no estado líquido ou gasoso. Ademais, a água que segue a extração de óleo e gás também apresenta outros compostos dissolvidos (OLAJIRE, 2015). O tipo de incrustação que surge quando a solução se torna saturada depende dos mecanismos de formação envolvidos.

ANEXO B: Produção de Pares

Produção de Pares

Efeito predominante para radiações γ de alta energia. De fato, apenas quando a energia do fóton excede o dobro do valor da massa de repouso do elétron (1,022 MeV) sua ocorrência é possível. Desta maneira, fótons com energia superior a este valor, ao interagirem com o campo elétrico nuclear, desaparecem, dando origem a um par elétron-pósitron, de acordo com o ilustrado na figura B1 (KNOLL, 2000; TAUHATA *et al.*, 2014).

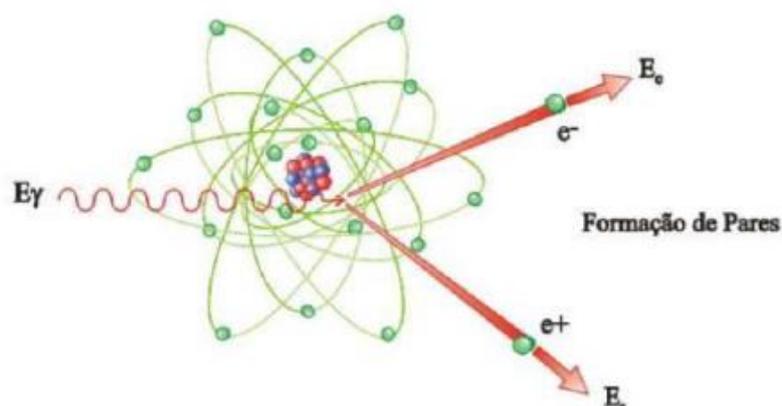


Figura B1 - Representação da Produção de Pares (TAUHATA *et al.*, 2003).

A equação 1 demonstra matematicamente a interação, onde a energia cinética é dividida entre o elétron e o pósitron, que posteriormente irão se aniquilar, produzindo dois fótons, com energia de 511 KeV cada (KNOLL, 2000).

$$\gamma \rightarrow e^- + e^+ + \text{energia cinética} \quad (1)$$

A probabilidade de ocorrência da produção de pares é difícil de ser demonstrada matematicamente, mas é possível considerar que sua magnitude varia aproximadamente com o quadrado do número atômico do absorvedor (KNOLL, 2000).

ANEXO C: Detectores Cintiladores

O mecanismo de detecção baseia-se na capacidade do cintilador em converter a energia depositada pela radiação em fótons de luz, através de três processos luminescentes, a saber (KNOLL, 2000):

- i) Fluorescência: é a emissão imediata de radiação visível, ocorrendo ao mesmo tempo que a excitação.
- ii) Fosforescência: emissão da radiação visível, caracterizada por maior comprimento de onda e ocorrendo num tempo mais lento, após a excitação.
- iii) Fluorescência atrasada: apresenta o mesmo espectro de emissão da fluorescência imediata, no entanto é caracterizada por um tempo muito longo de emissão, após a excitação.

Então, para que um material possa ser considerado um bom cintilador, é indispensável que possua a capacidade de converter a energia da radiação incidente através da fluorescência, além da habilidade de minimizar as contribuições indesejáveis dos outros dois processos (KNOLL, 2000).

Não obstante, outras propriedades importantes de um material cintilador ideal são (KNOLL, 2000):

- i) Alta eficiência na capacidade de conversão da energia cinética das partículas carregadas em luz visível.
- ii) A relação de conversão deve ser linear, isto significa que a quantidade de luz produzida precisa ser proporcional a energia depositada.
- iii) O meio carece de transparência, para que haja uma boa coleta da luz produzida. Portanto, o índice de refração do material deve ser próximo o suficiente do vidro, para permitir o acoplamento entre o cintilador e o tubo fotomultiplicador.
- iv) O tempo de decaimento da luminescência precisa ser o menor possível.
- v) O material precisa possuir boa qualidade óptica e capacidade de ser manipulado em tamanhos diferentes, conforme as necessidades práticas.

Na prática, nenhum material atende a todos os critérios estabelecidos, logo para escolha de um cintilador específico outros fatores precisam ser relacionados. Por exemplo, os cristais inorgânicos, como iodeto de sódio, tendem a produzir maior quantidade de luz e apresentam maior linearidade, porém seu tempo de resposta é relativamente longo. Enquanto isso, cintiladores líquidos e plásticos de base orgânica são mais rápidos, no entanto, sua produção de luz é menor.

Ademais, a escolha da aplicação é um fator importante na escolha do cintilador. O alto valor do número atômico dos cristais inorgânicos beneficia sua escolha para espectroscopia gama. Em contrapartida, a presença de hidrogênio nos cristais orgânicos favorece sua aplicação na detecção de nêutrons rápidos e espectroscopia beta (KNOLL, 2000).

Adicionalmente, para que os sinais luminosos - extremamente fracos - gerados pelo cintilador possam ser utilizados em um sistema de contagem ou espectroscopia, é primordial sua conversão em sinais elétricos cuja intensidade é relativamente maior, porém proporcional, à saída de luz. Essa tarefa é realizada por uma válvula fotomultiplicadora (KNOLL, 2000). A figura C1 mostra os principais componentes de uma válvula fotomultiplicadora.

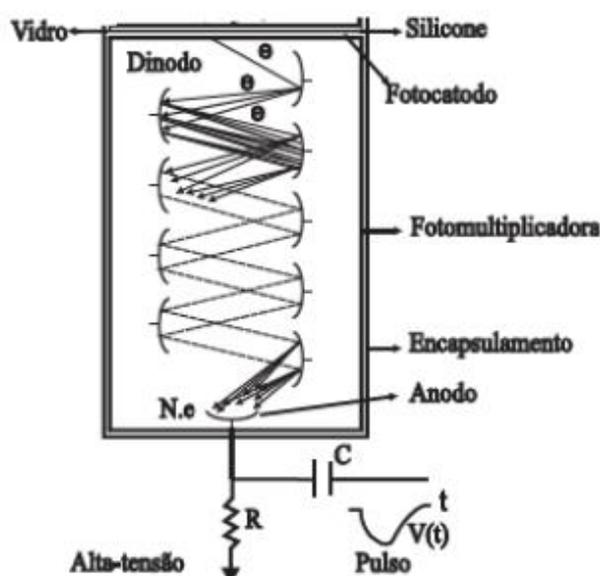


Figura C1 - Ilustração de uma válvula fotomultiplicadora (TAUHATA *et al.*, 2014) (Adaptado).

Inicialmente, a luz incidente é absorvida e ocorre a transferência de energia para um elétron dentro do fotocatodo. A energia desses elétrons estão entre 1 e 2 eV. Em

seguida, os elétrons são acelerados e projetados contra a superfície do primeiro dinodo. A energia depositada pelo elétron, agora em torno de 100 eV resulta na remissão de mais elétrons através um processo semelhante a emissão de elétrons secundários, criando um efeito cascata (KNOLL, 2000). Normalmente, o fator de multiplicação dos dinodos está entre 10^5 e 10^6 , produzindo cerca de 10^7 a 10^9 elétrons. Esta carga é suficiente para fornecer um pulso de tensão ao ser coletada no anodo da fotomultiplicadora (TAUHATA *et al.*, 2014).

A ausência de carga da radiação gama torna seu processo de detecção muito particular. Para que ele aconteça é necessário que ocorra algum tipo de interação com o material do detector, resultando no surgimento de uma determinada quantidade portadores de carga dentro do volume ativo do detector (KNOLL, 2000).

Seguidamente, os portadores de carga precisam ser coletados para formação de um sinal elétrico. Usualmente, este procedimento é realizado por meio da aplicação de um campo elétrico no detector dentro do detector, por exemplo detectores de HpGe. Deste modo as cargas negativas e positivas fluem em direções opostas e o capacitor do detector armazena as cargas elétricas coletadas (KNOLL, 2000).

As cargas armazenadas constituem os pulsos cuja amplitude carrega informações importantes sobre a radiação incidente no detector. Uma análise de um grande número de pulsos demonstra sua variação nas amplitudes, devido à interação da radiação no detector e, também, flutuações na resposta que são inerentes ao sistema de medição da radiação com um detector. Logo, a distribuição de altura de pulsos (DAP) é uma das propriedades fundamentais do sistema fonte-detector (KNOLL, 2000). Com base na DAP, obtém-se informações importantes sobre a radiação incidente no volume sensível do detector, como sua energia e o tipo de interação produzido.

No entanto, para obtenção da DAP é necessário um sistema de medição associado ao detector, de acordo com a [figura C2](#).

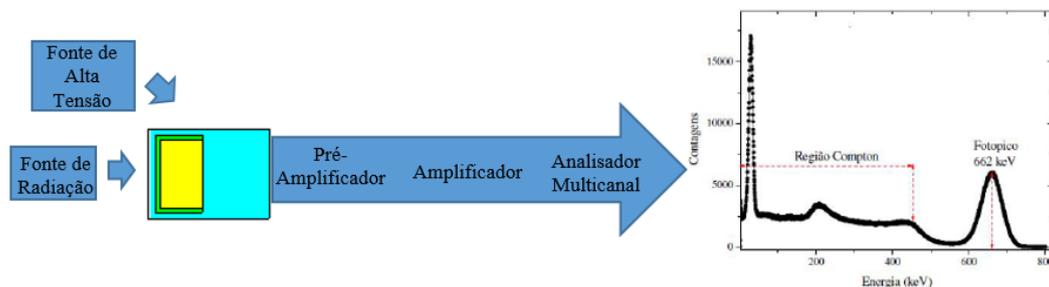


Figura C2 - Representação esquemática de um sistema de medição utilizado com detectores de radiação (CARVALHO, 2021).

A fonte de alta de tensão é utilizada para coleta do sinal e sua faixa de operação varia com o tipo de sistema usado. O pré-amplificador realiza o casamento de impedâncias do detector e amplificador, permitindo o transporte do sinal a grandes distâncias e com poucas distorções, além da transformação da capacitância para otimização da relação sinal-ruído (TAUHATA *et al.*, 2014).

No amplificador, as funções principais são executadas como aumento da amplitude do sinal gerado no pré-amplificador e a transformação do sinal nuclear em uma gaussiana. Estes pulsos gaussianos são processados pelo analisador multicanal, agrupando-os em pequenos intervalos de amplitude, em conformidade com os intervalos de energia para obtenção do espectro da distribuição de energia da radiação (TAUHATA *et al.*, 2014).

ANEXO D: Estrutura do arquivo de entrada do MCNP

i) Cartão de Células (*Cell Card*): as células são formadas pela combinação de formas geométricas pré-definidas (planos, esferas, cilindros, elipsoides, toróides, entre outras) no cartão de superfícies. O arranjo das superfícies para formação de uma célula é realizado com o uso de operadores booleanos (união, intercessão, complemento). Para cada célula é necessário atribuir um valor de referência, bem como densidade do material do usado, número do material e as operações booleanas realizadas na sua formação (LANL, 2003; SALGADO, 2010).

ii) Cartão de superfícies (*Surface Card*): as superfícies são definidas por caracteres mnemônicos, que indicam além do tipo de superfície utilizada, seu posicionamento no espaço (LANL, 2003). Para cada superfície é atribuído um número de referência que será usado nas combinações com os operadores booleanos na etapa de construção das células.

iii) Cartão de Dados (*Data Card*): está subdividido nos seguintes cartões:

- Cartão de Material: o usuário pode optar em inserir os dados dos materiais das células utilizando valores de fração mássica ou atômica.
- Cartão MODE: nesta etapa define-se o tipo de partícula cuja trajetória será seguida no MCNP.
- Cartão de Importância: define a importância de cada célula, ou seja, se a partícula que será seguida ou descartada quando dentro de um a região.
- Especificação da fonte: as características da fonte, como posição, energia e tipo de partícula emitida pela fonte são especificadas através do comando SDEF (*Source Definition*). Tal comando possui muitas variáveis, sendo considerado um dos mais complexos do MCNP, pois é capaz de produzir uma variedade de fontes.

- Cartão de *Tallies*: compreende as grandezas de interesse a serem obtidas, estipuladas pelo usuário, de acordo com o problema que se estuda. A [tabela D1](#) apresentam alguns *tallies* do MCNPX.

Tabela D1 - Exemplos de tallies do MCNP (LANL, 2003).

Mnemônico	Tipo de Tally	Partículas	Unidade
F1	Corrente integrada sobre uma superfície	N, P, E	Partículas
F2	Fluxo médio sobre uma superfície	N, P, E	Partículas/cm ²
F4	Fluxo médio sobre uma célula	N, P, E	Partículas/cm ²
F5	Fluxo em um detector pontual	N, P	Partículas/cm ²
F6	Energia média depositada em uma célula	N, P, E	MeV/g
F7	Deposição de energia média de fissão em uma célula	N	MeV/g
F8	Distribuição de Altura de Pulsos	P, E	Pulsos

- Cartão de histórias: o número de histórias é um dos métodos usuais para limitar por quanto tempo o MCNP é executado. Além disso, é um parâmetro importante na definição da precisão e flutuação estatística ([SALGADO, 2010](#)).