



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
CENTRO DE TECNOLOGIA E GEOCIÊNCIAS
COMISSÃO NACIONAL DE ENERGIA NUCLEAR
CENTRO REGIONAL DE CIÊNCIAS NUCLEARES DO NORDESTE
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM TECNOLOGIAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES

PATRÍCIO LUIZ DE ANDRADE

**TOMOGRAFIA DE DUPLA ENERGIA APLICADA À CARACTERIZAÇÃO DE
MATERIAIS: Metodologia para determinação do número atômico e densidade**

Recife
2025

PATRÍCIO LUIZ DE ANDRADE

**TOMOGRAFIA DE DUPLA ENERGIA APLICADA À CARACTERIZAÇÃO DE
MATERIAIS: Metodologia para determinação do número atômico e densidade**

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Tecnologias Energéticas e Nucleares da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para obtenção do título de doutor em Tecnologias Energéticas e Nucleares. Área de concentração: Aplicações de Radioisótopos na Indústria e Medicina.

Orientador: Prof. Dr. Antonio Celso Dantas Antonino

Recife

2025

.Catalogação de Publicação na Fonte. UFPE - Biblioteca Central

Andrade, Patrício Luiz de.

Tomografia de dupla energia aplicada à caracterização de materiais: metodologia para determinação do número atômico e densidade / Patrício Luiz de Andrade. - Recife, 2025.

116f.: il.

Tese (Doutorado) - Universidade Federal de Pernambuco, Centro de Tecnologia e Geociência, Programa de Pós-Graduação em Tecnologias Energéticas e Nucleares, 2025.

Orientação: Antonio Celso Dantas Antonino.

Inclui referências e apêndices.

1. Tomografia computadorizada de dupla energia; 2. Raios gama; 3. Raios x; 4. Número atômico efetivo; 5. Densidade. I. Antonino, Antonio Celso Dantas. II. Título.

UFPE-Biblioteca Central

PATRÍCIO LUIZ DE ANDRADE

TOMOGRAFIA DE DUPLA ENERGIA APLICADA À CARACTERIZAÇÃO DE MATERIAIS: METODOLOGIA PARA DETERMINAÇÃO DO NÚMERO ATÔMICO E DENSIDADE

Tese Apresentada ao Programa de Pós Graduação Tecnologias Energéticas e Nucleares da Universidade Federal de Pernambuco, Centro de Tecnologia e Geociência - CTG, como requisito para a obtenção do título de Doutor em Tecnologias Energéticas e Nucleares. Área de Concentração: Aplicações de Radioisótopos na Indústria e Medicina.

Aprovado em: 20/02/2025

BANCA EXAMINADORA

Dr. Antonio Celso Dantas Antonino (Examinador Interno)
Universidade Federal de Pernambuco - UFPE

Dr. Abel Gámez Rodríguez (Examinador Externo)
Universidade Federal de Pernambuco - UFPE

Dr. Richard John Heck (Examinador Externo)
UNIVERSITY of GUELPH

Dr. Tiago Siqueira de Miranda (Examinador Externo)
Universidade Federal de Pernambuco - UFPE

Dr. Daniel Milian Pérez (Examinador Externo)
Universidade Federal de Pernambuco - UFPE

Dedico este trabalho:

- À minha esposa, Antonia Lira.
- Aos meus filhos, Davi Lucas e André Victor.
- Aos meus pais, Maria de Fátima e Luiz Domingos (in memoriam).
- Aos meus irmãos, Antonio Petrus, Eduardo e Elisângela (in memoriam).
- Aos meus sobrinhos, João Miguel, José Rafael e Arthur Torres (in memoriam).

AGRADECIMENTOS

Ao meu orientador, Prof. Dr. Antonio Celso Dantas Antonino, por sua orientação, apoio, incentivo e confiança.

Aos professores Dr. Richard John Heck, Dr. José Antônio Barbosa, Dr.^a Viviane Khoury Asfora, Dr. Jair de Lima Bezerra, Dr. Mario Augusto Bezerra da Silva, Dr. Daniel Milian Pérez, Dr. Abel Gámez Rodríguez e Dr. Tiago Siqueira de Miranda, pela participação e colaboração em minhas bancas de seminários, qualificação e defesa.

Ao físico Daniel Amancio Duarte e aos pesquisadores Abel Gámez Rodríguez e Marcio Fernando Paixão de Brito, pelo suporte necessário para realização dos ensaios experimentais.

Ao Programa de Pós-graduação em Tecnologias Energéticas e Nucleares, pela oportunidade de realização deste trabalho, e ao Departamento de Energia Nuclear, por fornecer a infraestrutura necessária para desenvolvimento de minha pesquisa.

Ao Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia da Paraíba pelo apoio e pela concessão do meu afastamento, que foi essencial para a realização deste trabalho.

Ao amigo Dr. Enivaldo Santos Barbosa, pelo apoio e inestimáveis contribuições, que foram fundamentais para a realização deste trabalho.

À minha esposa, Antonia, e aos meus filhos, André Victor e Davi Lucas, cujo amor me sustentou, independentemente da distância.

A Deus, por seu infinito amor.

RESUMO

Este estudo apresenta um novo modelo matemático para a determinação do número atômico efetivo e da densidade de materiais, utilizando tomografia de dupla energia com um tomógrafo de transmissão de raios gama e um microtomógrafo de raios X. O método proposto baseia-se em uma função algébrica que relaciona o número atômico com a razão de atenuação. A metodologia envolveu o desenvolvimento teórico do modelo, seguido por testes com dados do NIST XCom e experimentos práticos com um tomógrafo de transmissão de raios gama, utilizando fontes de amerício (59,5 keV) e césio (662 keV), além de um microtomógrafo de raios X operando em duas tensões distintas. O desempenho do modelo foi comparado com abordagens de outros autores, analisando elementos com números atômicos entre 6 e 30, abrangendo uma ampla gama de materiais de interesse prático e científico. Os experimentos incluíram também phantoms e amostras de rochas carbonáticas, demonstrando a aplicabilidade da técnica em contextos geológicos e para materiais não elementares. Os resultados mostraram discrepâncias inferiores a 3,5% para o número atômico e até 10,04% para a densidade em materiais elementares com a tomografia de raios gama. Para materiais não elementares, as discrepâncias no número atômico efetivo foram inferiores a 5% para o tomógrafo de raios gama e a 8,5% para o microtomógrafo de raios X, enquanto os erros na determinação da densidade foram menores que 6,5% com a tomografia de raios gama e inferiores a 8% com a microtomografia de raios X.

Palavras-chave: Tomografia computadorizada de dupla energia; raios gama; raios x; número atômico efetivo; densidade.

ABSTRACT

This study presents a new mathematical model for determining the effective atomic number and density of materials, using dual-energy tomography with a gamma-ray transmission tomograph and an X-ray microtomograph. The proposed method is based on an algebraic function that relates the atomic number to the attenuation ratio. The methodology involved the theoretical development of the model, followed by tests with NIST XCom data and practical experiments with a gamma-ray transmission tomograph, using americium (59.5 keV) and cesium (662 keV) sources, as well as an X-ray microtomograph operating at two distinct voltages. The performance of the model was compared with approaches from other authors, analyzing elements with atomic numbers between 6 and 30, encompassing a wide range of materials of practical and scientific interest. The experiments also included phantoms and samples of carbonate rocks, demonstrating the applicability of the technique in geological contexts and for non-elementary materials. The results showed discrepancies of less than 3.5% for the effective atomic number and up to 10.04% for the density in elementary materials with gamma-ray tomography. For non-elementary materials, the discrepancies in the effective atomic number were less than 5% for the gamma-ray tomograph and 8.5% for the X-ray microtomograph, while the errors in determining the density were less than 6.5% with gamma-ray tomography and less than 8% with X-ray microtomography.

Keywords: Dual-energy computed tomography; gamma rays; X-rays; effective atomic number; density.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 –	Influência da energia do fóton e número atômico do absorvedor, no processo de absorção da radiação pela matéria	23
Figura 2 –	Espectro característico do ^{241}Am	25
Figura 3 –	Espectro característico do ^{137}Cs	25
Figura 4 –	Espectro característico de uma fonte de raios X	26
Figura 5 –	Tomógrafo computadorizado de raios gama de 1ª geração (TGCI - 1ªG)	33
Figura 6 –	Tomógrafo de terceira geração com fonte de radiação de raios X do DEN da UFPE	35
Figura 7 –	Materiais de calibração para o método de energia dupla usando as fontes de ^{241}Am e ^{137}Cs	37
Figura 8 –	Materiais de calibração para o método de energia dupla usando o $\mu\text{TC-RX}$	37
Figura 9 –	Materiais elementares usados para validação do modelo proposto	38
Figura 10 –	Materiais não elementares escaneados com o tomógrafo de raios gama	39
Figura 11 –	Materiais não elementares escaneados com o $\mu\text{TC-RX}$	40
Figura 12 –	Amostras de rochas carbonáticas	41
Figura 13 –	Esboço da geometria dos materiais utilizados neste trabalho	42
Figura 14 –	(a) Projeção da amostra I(VN01) obtida com a tensão de 180kV (b) Gráfico de intensidade da radiação ao longo da linha indicada na Figura 3(a). (c) Perfil de atenuação calculado a partir do perfil de intensidade	43
Figura 15 –	(a) Intensidade da radiação para a amostra VN01 com a fonte de ^{241}Am . (b) Perfil de atenuação calculado a partir do perfil de intensidade	44

Figura 16 –	(a) Projeção de um tubo de acrílico contendo diversos materiais, obtida com tensão de 180 kV. (b) Intensidade da radiação. (c) Atenuação da radiação dada pela Equação (3.6)	46
Figura 17 –	Interface de entrada para seleção do tipo de material (elemento, composto ou mistura) a ser analisado no software XCOM	47
Figura 18 –	Interface de entrada para a fórmula do composto e definição da faixa de energia	47
Figura 19 –	Coeficientes de atenuação de massa da água para energias de 1 a 1000 keV	48
Figura 20 –	Perfis dos coeficientes de atenuação mássico em função da energia para os elementos C, Mg, Al e Fe	49
Figura 21 –	Perfis dos coeficientes de atenuação mássico em função da energia para os materiais não elementares da Tabela 4.....	49
Figura 22 –	Perfis dos coeficientes de atenuação mássico em função da energia para as amostras geológicas da Tabela 5	50
Fluxograma 1 –	Processo de calibração do método de dupla energia proposto.....	55
Fluxograma 2 –	Processo de determinação do número atômico e densidade com o método de dupla energia	56
Figura 23 –	Ajuste das seções de choque totais para a energia de 59,5 keV.....	62
Figura 24 –	Ajuste das seções de choque totais para a energia de 662 keV.....	62
Figura 25 –	Número atômico em função da razão (R) para todos os elementos com número atômico $Z \in [1,30]$	63
Figura 26 –	Massa atômica (A) em função do número atômico (Z)	64
Figura 27 –	Comparação de resultados preditos com os valores de referência para o número atômico	67
Figura 28 –	Comparação de resultados preditos com os valores de referência para a densidade	68

Figura 29 –	Comparação dos valores teóricos (R_{teo}) com os resultados experimentais (R_{exp}) da razão da atenuação para os materiais da calibração	70
Figura 30 –	Curva de ajuste para a seção de choque total, baseada nos elementos de calibração, para a energia de 59,5 keV ..	71
Figura 31 –	Curva de ajuste para a seção de choque total, baseada nos elementos de calibração, para a energia de 662 keV ...	71
Figura 32 –	Comparação entre os valores das seções de choque totais preditos e mensurados para a energia de 59,5 keV	72
Figura 33 –	Comparação entre os valores das seções de choque totais preditos e mensurados para a energia de 662 keV	72
Figura 34 –	Ajuste do modelo proposto aos dados experimentais de transmissão gama utilizando o método de dual energia	74
Figura 35 –	Modelo exponencial	76
Figura 36 –	Modelo quadrático	76
Figura 37 –	Modelo racional quadrático	77
Figura 38 –	Números atômicos observados e preditos para as amostras de C, Mg, Al e Fe	78
Figura 39 –	Atenuação de raios gama obtida com a fonte de amerício para amostras de rocha e um phantom de acrílico	79
Figura 40 –	Atenuação de raios gama obtida com a fonte de amerício para amostras de água, óxido de alumínio e acrílico	80
Figura 41 –	Atenuação de raios gama obtida com a fonte de cézio para amostras de rocha e um phantom de acrílico	80
Figura 42 –	Atenuação de raios gama obtida com a fonte de cézio para amostras de água, óxido de alumínio e acrílico	81
Figura 43 –	Projeções obtidas para os materiais de calibração com energia de $E_L = 130kV$	83
Figura 44 –	Projeções obtidas para os materiais de calibração com energia de $E_H = 180kV$	84
Figura 45 –	Perfis da intensidade obtidos das projeções com $E_L = 130kV$	85

Figura 46 –	Perfis da intensidade obtidos das projeções com $E_H = 180\text{kV}$	85
Figura 47 –	Atenuação da radiação pelos materiais de calibração para $E_L = 130\text{kV}$	86
Figura 48 –	Atenuação da radiação pelos materiais de calibração para $E_H = 180\text{kV}$	86
Figura 49 –	Ajuste das seções de choque totais em função do número atômico para as energias $E_L = 130\text{kV}$ e $E_H = 180\text{kV}$	87
Figura 50 –	Ajuste do número atômico em função da razão R	88
Figura 51 –	Figura 50 – (a) Projeção de um tubo com óxido de alumínio com 130 kV. (b) Intensidade da radiação que atravessando o tubo vazio (em azul) e o tubo com Al_2O_3 (em vermelho). (c) Atenuação da radiação devido ao Al_2O_3	89
Figura 52 –	Perfis da atenuação da radiação dos phantoms para a energia de 130kV	90
Figura 53 –	Perfis da atenuação da radiação dos phantoms para a energia de 180kV	90
Figura 54 –	Perfis da atenuação da radiação da rocha VN01 para as energias de 180kV e 130 kV	91

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 –	Parâmetros de escaneamento	35
Tabela 2 –	Propriedades físicas dos materiais de calibração para o método de energia dupla usando as fontes de ^{241}Am e ^{137}Cs ...	36
Tabela 3 –	Propriedades físicas das amostras usadas para validação do modelo proposto	38
Tabela 4 –	Propriedades físicas dos phantoms	39
Tabela 5 –	Amostras de rochas carbonáticas	41
Tabela 6 –	Equações de predição do número atômico utilizando o método de dupla energia	53
Tabela 7 –	Tabela ANOVA	59
Tabela 8 –	Coefficientes obtidos pelo ajuste das seções de choque totais às Equações (3.9) e (3.10)	63
Tabela 9 –	Valores dos coeficientes de ajustes das Equações (3.12) e (3.17) para cálculos do número atômico e da massa atômica ...	64
Tabela 10 –	Valores teóricos (T_{eo}) e experimentais (T_{exp}) para a razão R e o número atômico (Z) das amostras de validação, obtidos com o método de dupla energia proposto	65
Tabela 11 –	Valores de densidade obtidos com o método de dupla energia, a partir de dados teóricos (T_{eo}) e experimentais (T_{exp}) para as amostras de validação	66
Tabela 12 –	Métricas para avaliação das predições do número atômico e densidade a partir de valores de R teóricos e experimentais	67
Tabela 13 –	Comparação da Razão da atenuação teórica (R_{teo}) e experimental (R_{exp}) para o método de dupla energia para os materiais de calibração (C, Al, Si, Ti, V, Cr, Co, Ni, Cu, Zn)	69
Tabela 14 –	Coefficientes dos ajustes das seções de choque totais para os materiais de calibração	73
Tabela 15 –	Valores dos coeficientes do modelo algébrico (Equação (3.12)) para mensurar o número atômico, utilizando o método de dupla energia de transmissão de raios gama	74

Tabela 16 – Comparação entre o número atômico e densidade calculados com método proposto, para valores de R obtidos experimentalmente, e os valores de referência	75
Tabela 17 – Comparação entre números atômicos de referência e preditos por diferentes modelos para amostras de C, Mg, Al e Fe	77
Tabela 18 – Métricas para avaliação das predições do número atômico para os modelos algébrico, racional quadrático, exponencial e quadrático	79
Tabela 19 – Coeficientes de atenuação linear obtidos pela técnica de tomografia gama com o uso das fontes de amerício e cério	81
Tabela 20 – Comparação dos números atômicos efetivos e das densidades obtidas pela técnica CT- γ de dupla energia com os valores de referência	82
Tabela 21 – Coeficientes dos ajustes das seções de choque totais para os materiais de calibração (C, Mg, Al, Si, Ti) utilizados com o tomógrafo de raios X	87
Tabela 22 – Valores dos coeficientes de ajuste do modelo algébrico para mensurar o número atômico	88
Tabela 23 – Comparação dos números atômicos efetivos e das densidades obtidas pela técnica μ CT de dupla energia com os números atômicos efetivos e as densidades de referência	91

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	17
1.1	OBJETIVOS	20
1.1.1	Geral	20
1.1.2	Específicos	20
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	21
2.1	INTERAÇÃO DA RADIAÇÃO COM A MATÉRIA	21
2.1.1	Efeito Fotoelétrico	21
2.1.2	Efeito Compton	22
2.1.3	Produção de Pares	22
2.2	ATENUAÇÃO DA RADIAÇÃO	23
2.3	ESPECTROS CARACTERÍSTICOS	24
2.4	NÚMERO ATÔMICO EFETIVO	27
2.5	DUPLA ENERGIA	28
2.5.1	Método 1	28
2.5.2	Método 2	30
3	MATERIAIS E MÉTODOS	33
3.1	TOMOGRAFIA COMPUTADORIZADA	33
3.1.1	Tomógrafo de raios gama	33
3.1.2	Tomógrafo de raios X	34
3.2	AMOSTRAS	36
3.2.1	Materiais para curvas de calibração	36
3.2.2	Materiais elementares para validação do método de dupla energia	38
3.1.3	Phantoms	38
3.1.4	Amostras Geológicas	40
3.3	DETERMINAÇÃO DA ATENUAÇÃO DA RADIAÇÃO	41
3.3.1	Atenuação da radiação: descrição para materiais confinados em tubos	45
3.4	COEFICIENTES DE ATENUAÇÃO OBTIDOS COM O XCOM	46
3.5	MODELO PARA SEÇÃO DE CHOQUE TOTAL	50
3.6	MODELO DE DUAL ENERGIA PROPOSTO	51

3.6.1	Modelo para o número atômico efetivo	52
3.6.2	Modelo para a densidade	53
3.7	REGRESSÃO NÃO LINEAR	57
3.7.1	Qualidade do ajuste	57
3.7.1.1	<i>Raiz do Erro Quadrático Médio (RMSE)</i>	57
3.7.1.2	Coeficiente de Determinação (R^2 , R-quadrado ou R-dois)	58
3.7.3.3	Análise de variância da regressão	59
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	61
4.1	TOMOGRAFIA GAMA	61
4.1.1	Curva de calibração teórica	61
4.1.1.1	Determinação do número atômico e densidade	65
4.1.2	Razão da atenuação	68
4.1.3	Curvas de calibração experimentais	70
4.1.4	Validação do modelo e comparação com modelos para cálculo do número atômico efetivo	75
4.1.5	Avaliação de phantoms e amostras geológicas	79
4.1.5.1	Perfis de atenuação	79
4.1.5.2	Obtenção do número atômico efetivo e densidade	82
4.2	PROJEÇÕES POR RAIOS X	83
4.2.1	Curvas de calibração experimentais	86
4.2.2	Avaliação de phantoms e amostras geológicas	88
4.2.2.1	Perfis de atenuação	88
4.2.2.2	Obtenção do número atômico e densidade	91
5	CONSIDERAÇÕES FINAIS	93
	REFERÊNCIAS	95
	APÊNDICE A – ARGUMENTOS DE ENTRADA E SAÍDA PARA A FUNÇÃO LSQCURVEFIT	100
	APÊNDICE B – COEFICIENTES DE ATENUAÇÃO DOS MATE- RIAS DE CALIBRAÇÃO OBTIDOS COM O TOMÓGRAFO DE RAIOS GAMA	102
	APÊNDICE C – PROJEÇÕES OBTIDAS COM O μTC DE RAIOS X	103
	APÊNDICE D – CÓDIGOS DO PROCESSO DE CALIBRAÇÃO..	112

APÊNDICE E – CÓDIGO PARA DETERMINAÇÃO DO NÚMERO ATÔMICO E DENSIDADE	115
--	------------

1. INTRODUÇÃO

A tomografia por dupla energia começou a ser utilizada na década de 1970, inicialmente voltada para aplicações médicas, como demonstrado nos trabalhos de Alvarez; Macovski, (1976) e Rutherford; Pullan; Isherwood, (1976). Brody et al., (1981) apresentaram um método para separar ossos e tecidos moles, baseando-se nas diferenças de absorção fotoelétrica e espalhamento Compton, utilizando projeções radiográficas. Este modelo foi validado experimentalmente com phantoms de água e alumínio e testado em um ser vivo, especificamente um cachorro. Lehmann et al., (1981) também exploraram a decomposição e separação de materiais através do uso de tomografia computadorizada de dupla energia, aplicada a imagens radiográficas de projeção única.

Na atualidade, a tomografia por dupla energia expandiu seu uso para além da medicina, atraindo o interesse de pesquisadores em diversas áreas. Na segurança, por exemplo, é aplicada na inspeção de bagagens e cargas (MOSHKBAR-BAKSHAYESH; AFARIDEH; AZIMIRAD, 2023; YALÇIN; REYHANCAN, 2022; ZHANG; YANGDAI, 2016). Na geociência, é utilizada para a análise de rochas e minerais, e na indústria de petróleo e gás é empregada na caracterização de rochas reservatório, incluindo a avaliação da porosidade (GEET; SWENNEN; WEVERS, 2000; IOVEA et al., 2009; JUSSIANI; APPOLONI, 2015; MARTINI et al., 2021; TELES; LIMA; LOPES, 2016). Essas aplicações exemplificam sua versatilidade, destacando seu potencial em diversos campos de pesquisa e indústria.

A tomografia por dupla energia é uma ferramenta importante para a caracterização precisa de materiais, permitindo a determinação do número atômico e da densidade. Suas técnicas são aplicáveis em sistemas que utilizam radiação gama e raios X. Além disso, podem ser implementadas tanto em dispositivos de visão única quanto em tomógrafos que oferecem visão tridimensional, ampliando seu alcance e utilidade em diferentes contextos (YALÇIN; REYHANCAN, 2022).

A combinação da composição química e da densidade de uma amostra resulta no coeficiente de atenuação. Essa condição representa um desafio para compreender a distribuição heterogênea de composição em amostras geológicas através de imagens tomográficas. Isso ocorre porque, isoladamente, não é possível determinar se as variações de cor observadas em imagens em escala de cinza são

decorrentes de diferenças na densidade, na composição química ou de uma combinação de ambas (ALVES; LIMA; LOPES, 2014).

Rizescu; Besliu; Jipa, (2001) conduziram uma investigação teórica e experimental sobre a determinação da densidade local e do número atômico efetivo utilizando um método de tomografia computadorizada (TC) com radiação gama de dupla energia proveniente do radioisótopo ^{192}Ir . Este método inovador baseia-se na modelagem da seção de choque efetiva total da radiação gama em materiais elementares, com variação do número atômico (Z) de 1 a 92. A abordagem considera as contribuições das seções de choque fotoelétrica e de dispersão Compton, permitindo uma análise detalhada das propriedades dos materiais. Os resultados destacam a precisão do método em identificar variações na densidade local e no número atômico efetivo.

Alves et al., (2015) desenvolveram uma metodologia para caracterizar amostras minerais por meio de microtomografia de dupla energia, utilizando energias de 80 e 130 kV. Esta técnica possibilita a distinção e segmentação de regiões internas com base na densidade e no número atômico efetivo, superando as limitações das imagens tradicionais em escala de cinza. O estudo demonstra a calibração de um sistema de alta resolução e a utilização de um código em MatLab® para processamento detalhado, proporcionando uma análise aprofundada da composição e distribuição tridimensional das amostras.

Teles; Lima; Lopes, (2016) desenvolveram uma metodologia para avaliar a porosidade em rochas utilizando microtomografia computadorizada de raios X de dupla energia. As imagens obtidas por essa técnica foram capazes de fornecer informações quantitativas sobre a estrutura interna do material. Os resultados da avaliação do espaço poroso a partir da microtomografia de dupla energia mostraram-se mais precisos do que os obtidos com a microtomografia convencional, quando comparados à porosimetria com gás hélio. Os autores demonstraram que a técnica melhora a precisão das medições, oferecendo uma possível alternativa para a indústria de petróleo e gás.

O estudo realizado por Yalçın; Reyhancan, (2022) investigou a aplicação de sistemas de raios X de dupla energia com visão única para a detecção de materiais explosivos em bagagens. A pesquisa concentrou-se na determinação do número atômico efetivo (Z_{eff}) dos materiais, um parâmetro crucial para a classificação de substâncias em orgânicas, inorgânicas e metálicas. Foram utilizadas amostras puras

para estabelecer uma correlação entre Z_{eff} e a razão dos coeficientes de atenuação de massa em diferentes energias. Essa metodologia permitiu a identificação automática de explosivos orgânicos, apesar dos desafios como a distinção entre água e explosivos.

Em suma, a tomografia computadorizada de dupla energia é uma técnica versátil e eficaz que oferece vantagens em diversas aplicações práticas, destacando-se pela sua capacidade de discriminar materiais com precisão e fornecer informações detalhadas sobre suas composições. Contudo, até o momento, não existe um formalismo universalmente aceito na comunidade acadêmica para a determinação do número atômico efetivo utilizando esta técnica (LIMA; JUSSIANI, 2024).

O presente trabalho tem como objetivo principal desenvolver uma metodologia de dupla energia para determinar o número atômico efetivo e a densidade de materiais, com foco especial em amostras de rochas reservatório. Para isso, serão utilizados tanto um sistema de transmissão de raios gama com fontes de amerício (59,5 keV) e célio (662 keV) quanto projeções obtidas por meio de um sistema de microtomografia de raios X.

Este trabalho está estruturado em cinco capítulos. A introdução estabelece o contexto e a importância do estudo, delineando os objetivos gerais e específicos, além de discorrer de modo breve sobre trabalhos recentes que também criaram metodologias com uso de tomografia de dupla energia, para serem aplicadas em suas respectivas áreas de pesquisa. Na Fundamentação Teórica, são explorados os aspectos teóricos do trabalho, incluindo as principais interações que ocorrem com radiações X e gama, o conceito de número atômico efetivo e métodos de dupla energia. O capítulo Materiais e Métodos, fornece uma descrição das amostras utilizadas, dos equipamentos de tomografia, e dos procedimentos metodológicos adotados para a determinação dos coeficientes de atenuação, culminando na exposição dos modelos teóricos propostos. Em Resultados e Discussão, a tese apresenta uma análise dos dados experimentais, incluindo a validação do modelo e a avaliação de phantoms e amostras geológicas com o tomógrafo de raios gama, complementada por uma discussão sobre o uso do modelo de dupla energia a partir de projeções por raios X para avaliação de phantoms e amostras geológicas. Finalmente, as Considerações Finais sintetizam as principais conclusões alcançadas e perspectivas de possível continuidade deste trabalho.

1.1 OBJETIVOS

1.1.1 Geral

Desenvolver uma metodologia para caracterizar materiais utilizando técnicas nucleares, visando determinar o número atômico efetivo e a densidade. A pesquisa tem como foco a análise de amostras de rochas reservatório, empregando um tomógrafo computadorizado (TC) de raios gama e microtomografia (μ TC) de raios X de dupla energia. Essa metodologia busca aprimorar a análise de materiais, essencial para diversas áreas, como a indústria de petróleo e gás.

1.1.2 Específicos

1. Desenvolver um método de dupla energia para determinação do número atômico efetivo e densidade de materiais;
2. Implementar o método de dupla energia no software Matlab;
3. Desenvolver a metodologia para a aplicação da técnica de dupla energia utilizando TC de raios gama e μ TC de raios X;
4. Aplicar a técnica de dupla energia com o uso de dados de atenuação obtidos com o software XCOM da NIST;
5. Aplicar a metodologia para caracterizar materiais homogêneos(phantoms) usando tomografia gama e microtomografia de raios X;
6. Aplicar a metodologia para caracterizar amostras geológicas de rochas reservatório.

2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 INTERAÇÃO DA RADIAÇÃO COM A MATÉRIA

Fótons são partículas eletricamente neutras que não perdem energia de modo contínuo enquanto penetram na matéria. Eles podem viajar uma certa distância antes de interagir com um átomo ou entre interações sucessivas. A profundidade de penetração de um fóton em um meio é descrita estatisticamente por uma probabilidade de interação por unidade de distância percorrida, conhecida como seção de choque total ou coeficiente de atenuação. Quando o fóton interage, ele pode ser absorvido e desaparecer ou pode ser espalhado, mudando sua direção, com ou sem perda de energia. (PEIXOTO, 2008; TURNER, 2007).

Os três principais tipos de interação da radiação eletromagnética ionizante com a matéria são o efeito fotoelétrico, o espalhamento Compton e a produção de pares elétron-pósitron. As probabilidades de ocorrências destas interações variam com a energia do fóton incidente e o número atômico do material absorvedor (ATTIX, 1986). Cada um desses tipos de interação será detalhado nas subseções seguintes.

2.1.1 Efeito Fotoelétrico

No processo de interação conhecido como efeito fotoelétrico, um fóton com energia $h\nu$ (onde h é a constante de Planck e ν é a frequência da radiação) interage com um átomo, resultando na ejeção de um elétron. O elétron ejetado, chamado de "fotoelétron", adquire uma energia cinética igual a $(h\nu - E_l)$ onde E_l é a energia de ligação da camada eletrônica de onde o elétron foi removido. O fóton é completamente absorvido neste processo, resultando em um átomo excitado. Este átomo retornará ao seu estado fundamental quando outro elétron preencher a lacuna deixada pela ejeção do elétron original.

Para fótons com energia inferior a 100 KeV, a seção de choque fotoelétrica, denotada por τ , obedece à relação (ATTIX, 1986):

$$\tau \propto \frac{Z^4}{h\nu^3} \quad (2.1)$$

2.1.2 Efeito Compton

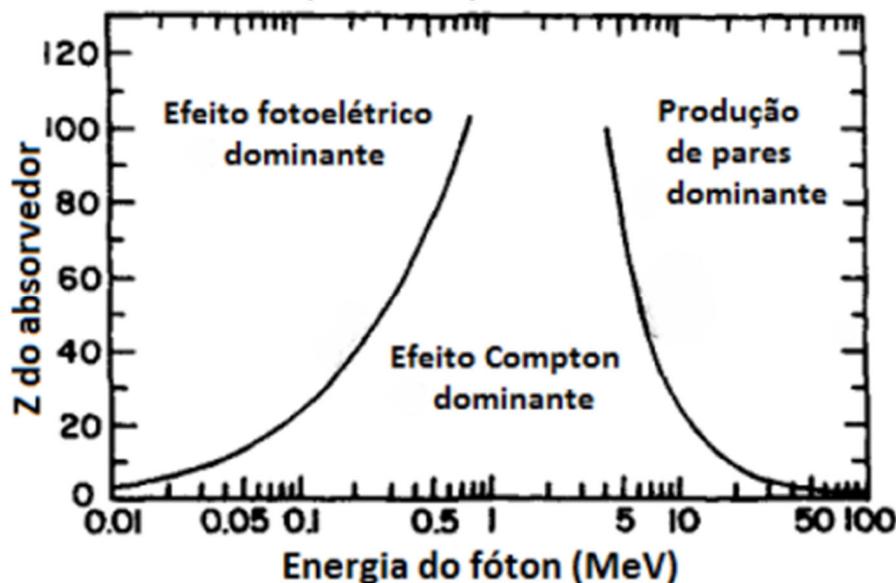
Este processo de interação ocorre entre o fóton da radiação eletromagnética incidente e um elétron do material absorvedor. Durante esse processo, o fóton incidente é defletido por um ângulo θ em relação à sua direção inicial. O fóton transfere parte de sua energia ao elétron (inicialmente em repouso), que é, então, chamado de elétron de recuo. O ângulo de espalhamento depende da energia do fóton incidente. A probabilidade de ocorrência do efeito Compton por átomo absorvedor está relacionada ao número de elétrons disponíveis como alvos, ou seja, depende do número atômico (Z) do absorvedor, aumentando linearmente com Z (KHAN, 2003).

2.1.3 Produção de Pares

A produção de pares é um processo em que a energia de um fóton é utilizada para produzir um par de partículas, consistindo de um pósitron e um elétron. Para que esse processo ocorra, a energia do fóton deve ser superior a 1,02 MeV, que é a energia mínima necessária para formar essas duas partículas. Este fenômeno ocorre nas proximidades do núcleo atômico e se torna o mecanismo de absorção predominante quando a energia do fóton excede aproximadamente 10 MeV (HENRIKSEN; MAILLIE, 2003).

A Figura 1 mostra a importância relativa de cada efeito em função do número atômico e da energia dos fótons. As interações fotoelétricas predominam para todos os materiais quando os fótons têm energias suficientemente baixas. No entanto, à medida que a energia aumenta, o efeito fotoelétrico diminui mais rapidamente que o efeito Compton, que então se torna predominante. Com o contínuo aumento na energia do fóton, o efeito Compton, embora também diminua em termos absolutos, permanece mais significativo em relação ao efeito fotoelétrico. Acima da energia de alguns MeV para o fóton, a produção de pares passa a ser a contribuição predominante nas interações com fótons (TAUHATA *et al.*, 2013).

Figura 1 – Influência da energia do fóton e número atômico do absorvedor, no processo de absorção da radiação pela matéria



Fonte: Adaptado de (EVANS, 1955).

2.2 ATENUAÇÃO DA RADIAÇÃO

O conceito de atenuação está relacionado à redução da intensidade de um feixe de fótons à medida que este atravessa a matéria. Essa atenuação ocorre devido à absorção da radiação pelo meio ou pela dispersão do feixe. Compreender a atenuação é crucial para entender as interações que acontecem quando um fóton interage com átomos, sendo fundamental para as análises tomográficas. A relação entre a radiação não atenuada (I_0) e os fótons transmitidos (I) após a interação com o material é descrita pela lei de Beer–Lambert, aplicável a um feixe monoenergético, conforme ilustrado na Equação (2.2) (DANTAS et al., 2013; EVANS, 1955; KAPLAN, 1978).

$$I = I_0 e^{-\mu x} \quad (2.2)$$

onde μ é o coeficiente de atenuação linear e x é a espessura do objeto atenuador. A utilização do coeficiente de atenuação linear na Equação (2.2) é limitada, porque ele varia com a densidade do absorvedor, mesmo que este seja sempre do mesmo material. Por isso, em algumas pesquisas, utiliza-se o coeficiente de atenuação de massa ou coeficiente de atenuação mássico (μ_m) (EVANS, 1955), dado por:

$$\mu_m = \frac{\mu}{\rho} \quad (2.3)$$

em que ρ ($kg \cdot m^{-3}$) representa a densidade física do material absorvedor. Neste caso, a Equação (2.2) é reescrita como:

$$I = I_0 e^{-\mu_m \rho x} \quad (2.4)$$

No caso de uma fonte de raios X, que é uma fonte de feixe polienergético, onde cada energia do feixe é atenuada de forma diferente, a intensidade transmitida após a interação com o material é definida por:

$$I(s) = \int_{E_{min}}^{E_{max}} \Omega(E) e^{-\int_0^s \mu(E,x) dx} dE \quad (2.5)$$

em que $\mu(E, x)$ é o coeficiente de atenuação linear do material [cm^{-1}], e I_0 é a intensidade do feixe polienergético de raios X incidente na amostra, dada por:

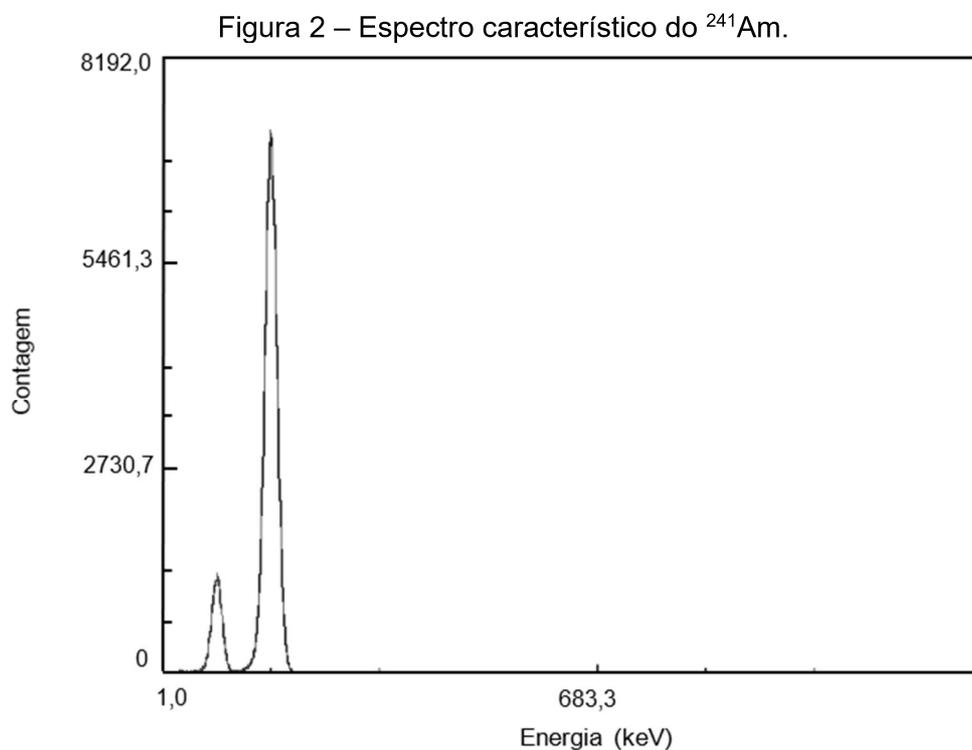
$$I_0 = \int_{E_{min}}^{E_{max}} \Omega(E) dE \quad (2.6)$$

sendo que $\Omega(E)$ representa o espectro de raios X incidente.

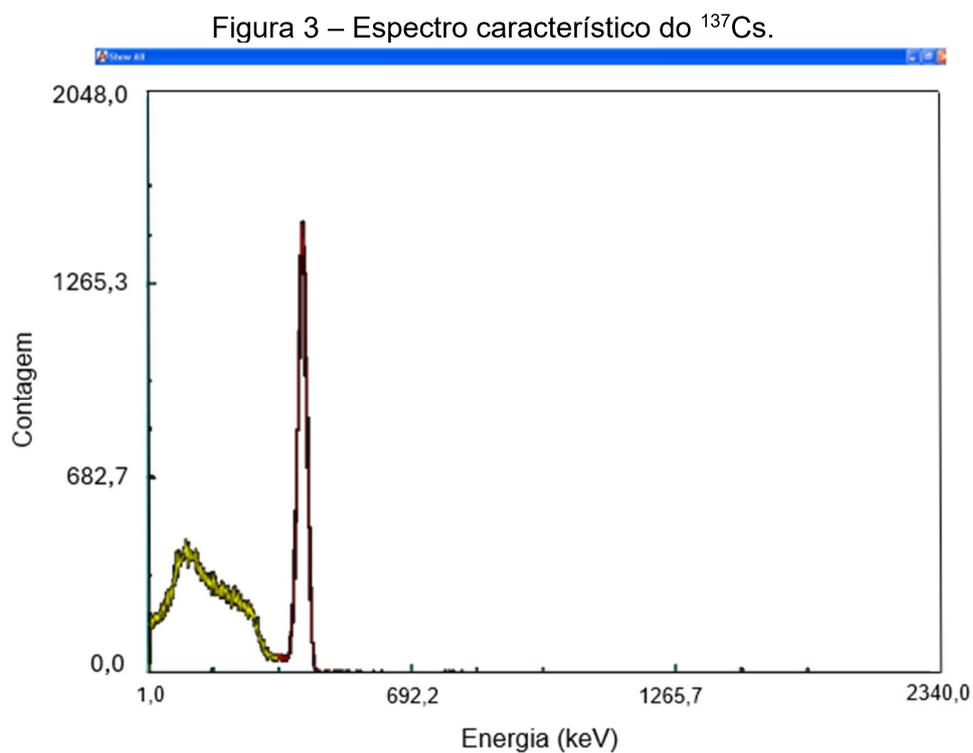
2.3 ESPECTROS CARACTERÍSTICOS

O espectro de energia refere-se à distribuição do número de fótons em um feixe de raios X ou gama. As radiações gama provenientes de elementos radioativos naturais são emitidas com intensidades e energias bem definidas, características do radioisótopo considerado. Para cada radioisótopo, o espectro possui uma faixa de energia bem definida, caracterizando um espectro discreto de emissão (FONSECA,

2017). Nas Figuras 2 e 3, podem-se observar os espectros característicos do ^{241}Am e do ^{137}Cs , respectivamente.

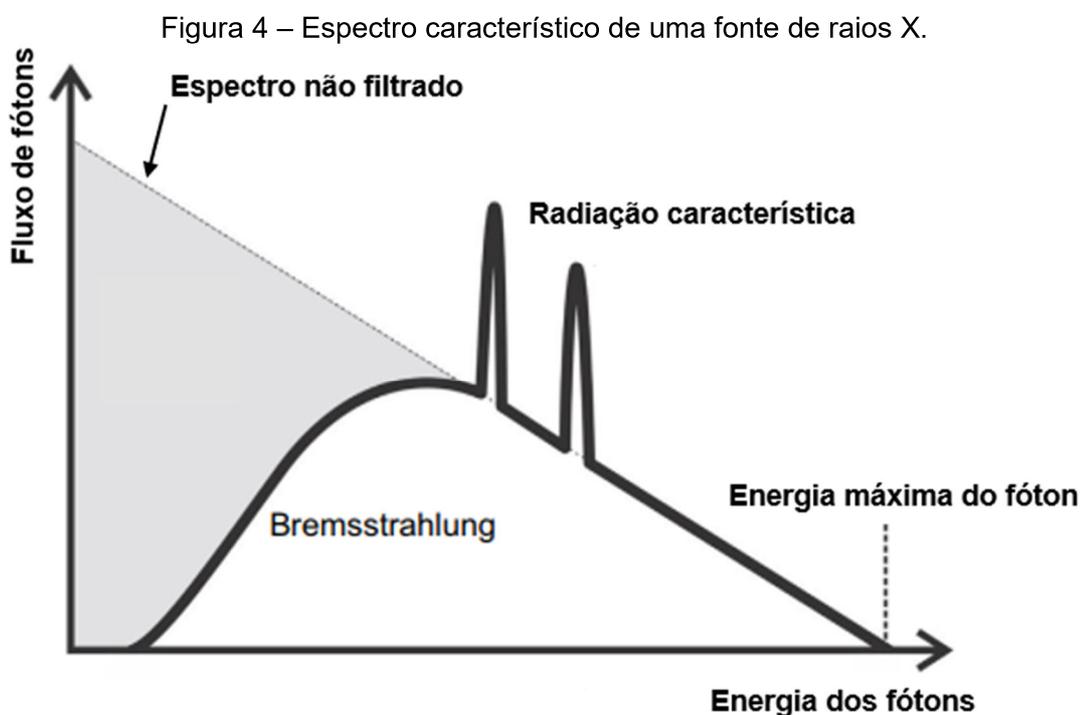


Fonte: Adaptado de (CARVALHO, 2023).



Fonte: Adaptado de (FONSECA, 2017).

Os raios X são gerados quando elétrons são acelerados em direção aos átomos de um material alvo. As interações dos elétrons com os átomos do alvo resultam na produção de raios X por meio de dois processos distintos. No primeiro processo, os elétrons podem colidir com elétrons próximos ao núcleo atômico dos átomos do alvo, com energia suficiente para ejetar esses elétrons, causando ionização. Quando esses elétrons são removidos, os elétrons das camadas mais externas caem para o nível ionizado, emitindo raios X característicos do átomo envolvido na interação. O segundo processo envolve o 'freamento' dos elétrons ao passarem próximos ao núcleo atômico dos átomos. A radiação resultante desse efeito de 'freamento' permanece na forma de um espectro contínuo, onde os fótons de máxima energia no espectro são gerados quando a energia cinética dos elétrons é totalmente convertida em energia dos fótons. Esta radiação é conhecida como radiação de Bremsstrahlung (CURRY III; DOWDEY; MURRY, 1990; HAMPEL, 2015; KAPLAN, 1978). Na Figura 4, pode-se ver uma ilustração do espectro característico de uma fonte de raios X.



Fonte: Adaptado de (HAMPEL, 2015).

2.4 NÚMERO ATÔMICO EFETIVO

Segundo Taylor et al., (2008), desde o trabalho original de Moseley, (1913), o número atômico, Z , foi identificado como fundamentalmente conectado com várias propriedades dos elementos, sendo observada a dependência das interações de fótons ao número atômico de um material, desde os primeiros estudos de absorção de fótons. De acordo com Murty, (1965), compostos e misturas podem ser descritos, a partir da forma como interagem com a radiação, como se fossem formados por um elemento fictício com um número atômico Z_{eff} , chamado de número atômico efetivo.

De acordo Azevedo et al., (2016), Liu; Hong; Cai, (2021) e Taylor et al., (2008) um método frequentemente empregado para determinação do número atômico efetivo, foi proposto por Mayneord, (1937) o qual define:

$$Z_{eff} = \sqrt[m]{\sum_{i=1}^N f_i Z_i^m} \quad (2.6)$$

em que Z_i é número atômico do i -ésimo elemento, N é o número de elementos do material constituinte e f_i representa a fração eletrônica relativa do elemento i , definida por

$$f_i = \frac{n_i Z_i}{\sum_{j=1}^N n_j Z_j} \quad (2.7)$$

O valor de m varia de 2,94 a 3,8, dependendo dos fenômenos de interação e materiais considerados (ALVES; LIMA.; LOPES, 2014; BONNIN et al., 2014; MARTINI et al., 2021). Este método é frequentemente utilizado como base teórica em estudos relativos a técnicas de tomografia de dupla energia (LIU; HONG; CAI, 2021). Neste trabalho adotou-se o valor de $m = 3,8$, para determinação do número atômico efetivo teórico para as amostras de validação não elementares.

2.5 DUPLA ENERGIA

Neste trabalho, serão abordados três métodos de identificação de materiais utilizando tomografia por dupla energia. O primeiro método foi proposto por Geet; Swennen; Wevers, (2000) e aplicado por Alves; Lima; Lopes, (2014) e Teles; Lima; Lopes, (2016) no estudo de rochas por microtomografia com dupla energia de raios X. O segundo método foi proposto e implementado Rizescu; Besliu; Jipa, (2001), nesse estudo foi utilizado um tomógrafo de raios γ com uma fonte de ^{192}Ir . O terceiro método é o que está sendo proposto neste trabalho, para a análise de materiais, utilizando duas fontes de raios γ (^{241}Am e ^{137}Cs) e microtomografia de raios X, que será apresentado na Seção 3.6.

2.5.1 Método 1

O coeficiente de atenuação linear total (μ) de um feixe pode ser aproximado pela soma das contribuições da interação da radiação com a matéria do espalhamento Compton μ_c com o efeito fotoelétrico μ_f , conforme Equação (2.8) (HSIEH, 2009)

$$\mu = \mu_c + \mu_f \quad (2.8)$$

Os valores dos coeficientes de atenuação são dependentes principalmente da densidade, número atômico efetivo e energia do feixe de radiação, de forma que o coeficiente de atenuação linear pode ser escrito como:

$$\mu_E = \rho a_E + \rho Z_{eff}^{3,8} b_E \quad (2.9)$$

e o coeficiente de atenuação de massa

$$\mu_{mE} = \frac{\mu_E}{\rho} = a_E + Z_{eff}^{3,8} b_E \quad (2.10)$$

em que ρ é a densidade, Z_{eff} o número atômico efetivo, E a energia do feixe de raios X, e os coeficientes a_E e b_E são dependentes da energia. O primeiro termo do lado direito corresponde à contribuição do espalhamento Compton e o segundo termo corresponde ao efeito fotoelétrico. Para elementos compostos, o número Z_{eff} foi escrito como

$$Z_{eff} = \left(\sum f_i Z_i^{3,8} \right)^{1/3,8} \quad (2.11)$$

onde f_i é a fração do número total de elétrons contribuídos pelo elemento i com número atômico Z_i .

Desta forma, a partir da medida do coeficiente de atenuação de feixes de raios X ou γ em duas energias distintas atravessando o mesmo material, é possível escrever um sistema de duas equações, como a seguir:

$$\begin{cases} \mu_{m_L} = a_L + Z_{eff}^{3,8} b_L \\ \mu_{m_H} = a_H + Z_{eff}^{3,8} b_H \end{cases} \quad (2.12)$$

$$(2.13)$$

em que os índices L e H correspondem a baixas e altas energias, respectivamente.

A partir das equações (2.12) e (2.13), é possível escrever uma equação para a densidade (ρ) e outra para o número atômico efetivo (Z_{eff}), sendo possível extrair informações de densidade e número atômico de um objeto sem, a princípio, conhecer sua estrutura. Contudo, é necessário obter os coeficientes de energia a_L , a_H , b_L e b_H conforme apresentado nas equações a seguir (GEET; SWENNEN; WEVERS, 2000):

$$\rho = \frac{b_H \cdot \mu_L - b_L \cdot \mu_H}{b_H \cdot a_L - b_L \cdot a_H} \quad (2.14)$$

$$Z_{eff} = \sqrt[3,8]{\frac{a_L \cdot \mu_H - a_H \cdot \mu_L}{b_H \cdot \mu_L - b_L \cdot \mu_H}} \quad (2.15)$$

Os coeficientes podem ser obtidos através da aquisição de imagens de objetos com características conhecidas, ou seja, densidade e número atômico efetivo definido. Uma vez que se obtêm os valores de coeficiente de atenuação linear desses objetos de referência, pode-se plotar e analisar a curva do coeficiente de atenuação de massa em função de $Z_{eff}^{3,8}$ para se obter informações dos coeficientes de energia.

2.5.2 Método 2

A seção de choque efetiva total da radiação em função da composição química dos materiais investigados e da energia, pode ser modelada pela seguinte relação (RIZESCU; BESLIU; JIPA, 2001):

$$\sigma(E) = a(E)Z + b(E)Z^{c(E)} \quad (2.16)$$

onde Z é o número atômico efetivo e E a energia da radiação. Os coeficientes a , b e c dependem apenas da energia (sendo desprezada sua dependência material). O primeiro termo representa a contribuição do espalhamento Compton e o segundo termo representa a absorção fotoelétrica.

A relação entre a seção de choque efetiva total e o coeficiente de atenuação linear é dada pela Equação (2.17):

$$\mu = N_A \frac{\rho}{A} \sigma \quad (2.17)$$

em que $N_A = 6,022 \times 10^{23}$ é o número de Avogrado, ρ é a densidade e A é a massa atômica (ou molecular) do material (EVANS, 1955; JUSSIANI; APPOLONI, 2015; PRABHU *et al.*, 2021).

Medindo o coeficiente de atenuação linear de um material desconhecido em duas energias diferentes e usando as Equações (2.16) e (2.17), pode-se montar um sistema de duas equações, nas incógnitas ρ e Z ,

$$\left\{ \begin{array}{l} \mu_L = (a_L Z + b_L Z^{c_L}) N_A \rho / A \\ \mu_H = (a_H Z + b_H Z^{c_H}) N_A \rho / A \end{array} \right. \quad (2.18)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \mu_L = (a_L Z + b_L Z^{c_L}) N_A \rho / A \\ \mu_H = (a_H Z + b_H Z^{c_H}) N_A \rho / A \end{array} \right. \quad (2.19)$$

Os coeficientes a_L , b_L , c_L , a_H , b_H e c_H podem ser determinados pelo método dos mínimos quadrados para ajuste dos valores teóricos das seções transversais totais as Equações (2.18) e (2.19).

Rizescu; Besliu; Jipa, (2001) utilizaram o parâmetro k para representar a razão dos coeficientes de atenuação linear para os dois níveis energéticos.

$$k = \frac{\mu_L}{\mu_H} = \frac{\sigma_L}{\sigma_H} = \frac{\mu_{mL}}{\mu_{mH}} \quad (2.20)$$

O fator k é uma função monótona crescente do número atômico efetivo. Desta forma, o fator k é determinado exclusivamente para uma determinada composição de material.

Este método implica a modelagem do fator k em função do número atômico Z . Rizescu; Besliu; Jipa, (2001), utilizaram a função:

$$k = \frac{p_1 + q_1 Z + r_1 Z^2}{p_2 + q_2 Z + r_2 Z^2} \quad (2.21)$$

determinando completamente a dependência do fator k em função do número atômico. Além disso, essa dependência é utilizada para determinar o número atômico dos materiais investigados usando os valores do fator k resultantes das imagens tomográficas.

O número de massa é determinado em função do número atômico efetivo. Rizescu; Besliu; Jipa, (2001) empregaram uma função polinomial de grau 7 na variável $\ln(Z)$:

$$A = \sum_{i=0}^7 t_i (\ln Z)^i \quad (2.22)$$

Após a determinação do número atômico e da massa atômica, a densidade pode ser obtida a partir do Sistema de Equações (2.18) - (2.19).

3. MATERIAIS E MÉTODOS

3.1 TOMOGRAFIA COMPUTADORIZADA

Nesta seção, são apresentadas as características do tomógrafo de transmissão de raios gama e do microtomógrafo de raios X, utilizados nas etapas experimentais.

3.1.1 Tomógrafo de raios gama

Os ensaios experimentais de tomografia de raios gama foram realizados no Tomógrafo Gama Computadorizado Industrial de 1ª Geração (TGCI – 1ªG), pertencente ao Laboratório Prof. Dr. Cornelius Keller do Departamento de Energia Nuclear (DEN), do Centro de Tecnologia e Geociências, da Universidade Federal de Pernambuco (UFPE), apresentado na Figura 5.

Figura 5 – Tomógrafo computadorizado de raios gama de 1ª geração (TGCI - 1ªG).



Fonte: O autor (2025).

Neste estudo utilizamos duas fontes isotrópicas de radiação gama, amerício (^{241}Am) e césio (^{137}Cs) de espectros discretos com energias de 59,5 keV e 662 keV,

respectivamente. A fonte de amerício tem meia-vida de 432,2 anos e atividade de $7,4 \times 10^9$ Bq, enquanto que a fonte de césio tem meia vida de 30,1 anos e atividade $3,70 \times 10^9$ Bq.

O sistema de detecção do TGCI – 1^a G é composto por um cristal cintilador de NaI(Tl) acoplado diretamente a uma fotomultiplicadora, conectado a um Analisador Multicanal (MCA) modelo Osprey fabricado pela Canberra Inc. Tanto a fonte quanto o detector são blindados com colimadores de chumbo, apresentando um orifício circular de 5,5 mm de diâmetro e comprimento de 73 mm. A geometria do sistema permite uma distância máxima entre fonte e detector de 344 mm.

O controle do TGCI – 1^a G é realizado por um programa desenvolvido em LabVIEW, que oferece uma interface gráfica para configuração de parâmetros como passo linear, tempo de contagem e posições inicial e final do escaneamento. O sistema realiza uma varredura completa da região definida pelo usuário, seguindo um algoritmo que coordena o acionamento do sistema de detecção e o translado da mesa. Os dados de contagem da radiação são armazenados em um arquivo para análise posterior, com as contagens sendo realizadas na área do fotópico.

3.1.2 Tomógrafo de raios X

Além do tomógrafo de raios gama TGCI – 1^a G, será utilizado nos experimentos um tomógrafo computadorizado industrial de microfoco de Raios X (μ TC-RX), modelo XT H 225 da Nikon Metrology. Este equipamento opera com uma potência de 225 W, e suporta uma tensão máxima de 225 kV e uma corrente de 1000 μ A. Ele é equipado com um ânodo de tungstênio e uma janela de berílio de 500 μ m de espessura. O μ TC-RX ilustrado na Figura 6, é composto por quatro componentes principais: (1) fonte de raios X, (2) detector, (3) porta amostras e (4) computador responsável pela aquisição de dados, execução de algoritmos de reconstrução e análise de imagens. O tomógrafo está localizado no Laboratório de Tomografia Computadorizada de Raios X (LTC-RX) do DEN da UFPE.

Figura 6 – Tomógrafo de terceira geração com fonte de radiação de raios X do DEN da UFPE.



Fonte: O autor (2025).

A Tabela 1 apresenta os parâmetros de escaneamento utilizados nas duas aquisições distintas.

Tabela 1 – Parâmetros de escaneamento.

Parâmetros	Valores
Tensão (kV)	130 / 180
Corrente (μA)	42 / 55
Matriz (pixels)	2880×2880
Tamanho do pixel (μm)	40
Filtro de cobre (mm)	0,5 / 1,5

Fonte: O autor (2025).

3.2 AMOSTRAS

Nesta seção, são apresentadas as amostras utilizadas no decorrer deste trabalho. Estas dividem-se em amostras de materiais elementares, como C e Al, materiais não elementares, H₂O e C₂F₄ por exemplo e amostras geológicas de rochas carbonáticas.

3.2.1 Materiais para curvas de calibração

Os materiais elementares selecionados para a elaboração das curvas de calibração são listados na Tabela 2. A seleção desses materiais foi realizada de modo a cobrir uma ampla faixa de números atômicos efetivos, correspondente às amostras a serem analisadas. Essa escolha inclui diversos elementos, assegurando que as curvas representem adequadamente as características dos materiais estudados.

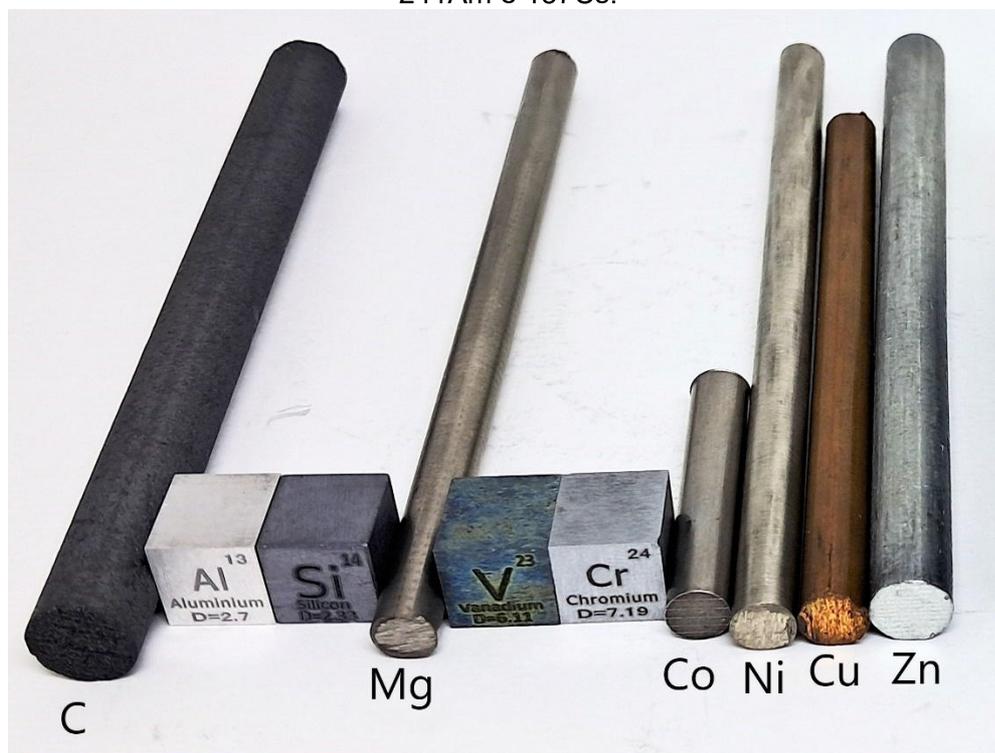
Para elaboração das curvas de calibração com experimentos realizados com o tomógrafo de transmissão de raios gama foram utilizados os 10 materiais elementares da Tabela 2, os quais estão exibidos na Figura 7.

Tabela 2 – Propriedades físicas dos materiais de calibração para o método de dupla energia usando as fontes de ²⁴¹Am e ¹³⁷Cs.

Item	Material	Número Atômico	ρ (g/cm ³)
1	Grafite	6	1,70
2	Alumínio	13	2,70
3	Silício	14	2,33
4	Titânio	22	4,54
5	Vanádio	23	6,11
6	Cromo	24	7,18
7	Cobalto	27	8,90
8	Níquel	28	8,90
9	Cobre	29	8,96
10	Zinco	30	7,13

Fonte: NIST XCOM database (BERGER *et al.*, 2010).

Figura 7 – Materiais de calibração para o método de energia dupla usando as fontes de ^{241}Am e ^{137}Cs .



Fonte: O autor (2025).

Para obtenção das curvas de calibração a partir de projeções provenientes de escaneamentos realizados com o tomógrafo de raios x, foram escaneadas as amostras de materiais elementares exibidas na Figura 8.

Figura 8 – Materiais de calibração para o método de energia dupla usando o $\mu\text{TC-RX}$.



Fonte: O autor (2025).

3.2.2 Materiais elementares para validação do método de dupla energia com radiação gama

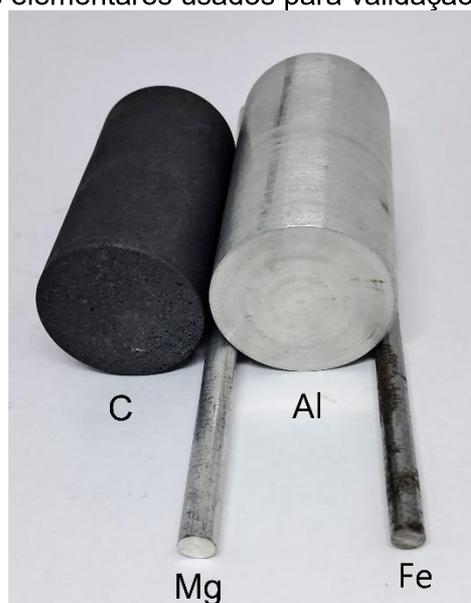
A Tabela 3 contém os materiais elementares (Figura 9) utilizadas na etapa de validação do modelo proposto, com o uso do tomógrafo de transmissão gama.

Tabela 3 – Propriedades físicas das amostras usadas para validação do modelo proposto.

Item	Material	Número Atômico	ρ (g/cm ³)
1	Grafite	6	1,70
2	Magnésio	12	1,74
3	Alumínio	13	2,70
4	Ferro	26	7,87

Fonte: NIST XCOM database (BERGER *et al.*, 2010).

Figura 9 – Materiais elementares usados para validação do modelo proposto.

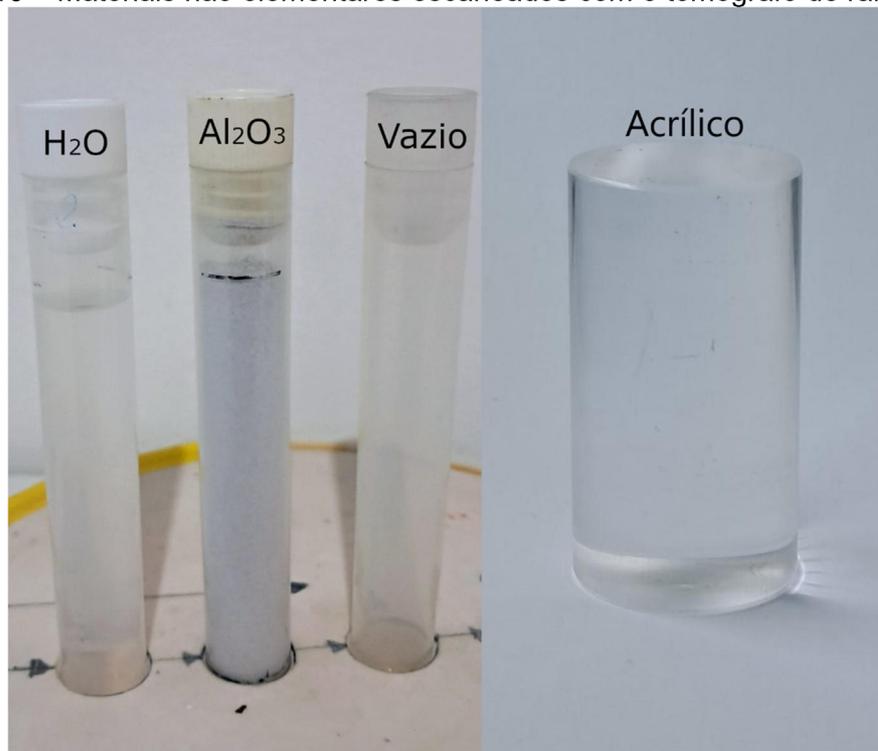


Fonte: O autor (2025).

3.2.3 Phantoms

Para avaliar a precisão da técnica de tomografia computadorizada de dupla energia (TCDE) na identificação de materiais não elementares com o tomógrafo de transmissão de raios gama foi utilizado um phantom cilíndrico homogêneo de acrílico e tubos de acrílico contendo água, óxido de alumínio (Al_2O_3) e um tubo vazio, como pode ser visto na Figura 10.

Figura 10 – Materiais não elementares escaneados com o tomógrafo de raios gama.



Fonte: O autor (2025).

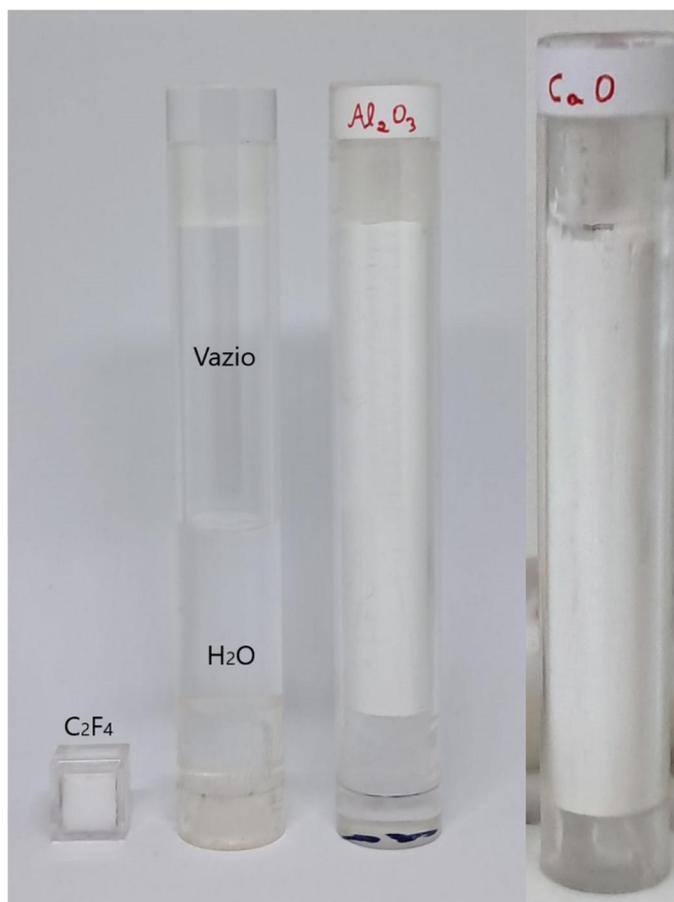
Por sua vez, para avaliação da técnica com o microtomógrafo de raios X, foi utilizado um cubo de C_2F_4 e tubos de acrílico contendo água, óxido de alumínio (Al_2O_3) e óxido de cálcio (CaO), conforme Figura 11.

A Tabela 4 mostra as composições químicas e densidades para os materiais não elementares usados como referências neste estudo, além de indicar o tomógrafo no qual a amostra foi escaneada.

Tabela 4 – Propriedades físicas dos phantoms.

Nome	Fórmula química	Densidade ρ (g/cm ³)	Tomógrafo
Acrílico	$C_5O_2H_8$	1,19	Gama / X
Água	H_2O	1,00	Gama / X
Óxido de Alumínio	Al_2O_3	2,01	Gama
Óxido de Alumínio	Al_2O_3	1,93	X
Óxido de Cálcio	CaO	1,05	X
Teflon	C_2F_4	2,20	X

Fonte: O autor (2025).

Figura 11 – Materiais não elementares escaneados com o μ TC-RX.

Fonte: O autor (2025).

3.2.4 Amostras Geológicas

Neste estudo, foram selecionadas três amostras de rochas carbonáticas, conforme ilustrado na Figura 12. Estas amostras são provenientes de um afloramento calcário recifal localizado no município de Conde, Paraíba, ao sul da capital João Pessoa (NOVA, 2020). Análises prévias realizadas por Carvalho, (2023), utilizando Difração de Raios X (DRX) e Fluorescência de Raios X (FRX), determinaram que a composição mineralógica dessas amostras consiste predominantemente em calcita (CaCO_3) e dolomita ($\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2$). A composição dessas amostras é apresentada na Tabela 5.

Rochas carbonáticas são rochas sedimentares formadas por uma combinação de processos biológicos, químicos e físicos, incluindo acumulação, precipitação, cimentação e diagênese de minerais carbonáticos. Os principais mecanismos de formação dessas rochas incluem a acumulação de restos de

organismos marinhos, a precipitação química direta, a atividade microbiana e a cimentação. Os carbonatos, que constituem as rochas carbonáticas, formam-se in situ e são compostos por diversos minerais, dos quais a dolomita e a calcita são os mais predominantes (NOVA, 2020).

Figura 12 – Amostras de rochas carbonáticas.



Fonte: (CARVALHO, 2023).

Tabela 5 – Amostras de rochas carbonáticas.

Amostra	Composição (%)		ρ (g/cm ³)
	CaCO ₃	CaMg(CO ₃) ₂	
I (VN01)	1,00	99,00	2,38
II (VN02)	2,30	97,70	2,31
III (VN04)	0,20	99,80	2,62

Fonte: O autor (2025).

Vale destacar que as amostras analisadas neste estudo pertencem à Formação Tambaba e apresentam características análogas às rochas do pré-sal, o que destaca sua importância para a compreensão dos reservatórios sedimentares.

3.3 DETERMINAÇÃO DA ATENUAÇÃO DA RADIAÇÃO

A atenuação de um feixe estreito de radiação no material analisado é descrito pela equação de Beer-Lambert (3.1),

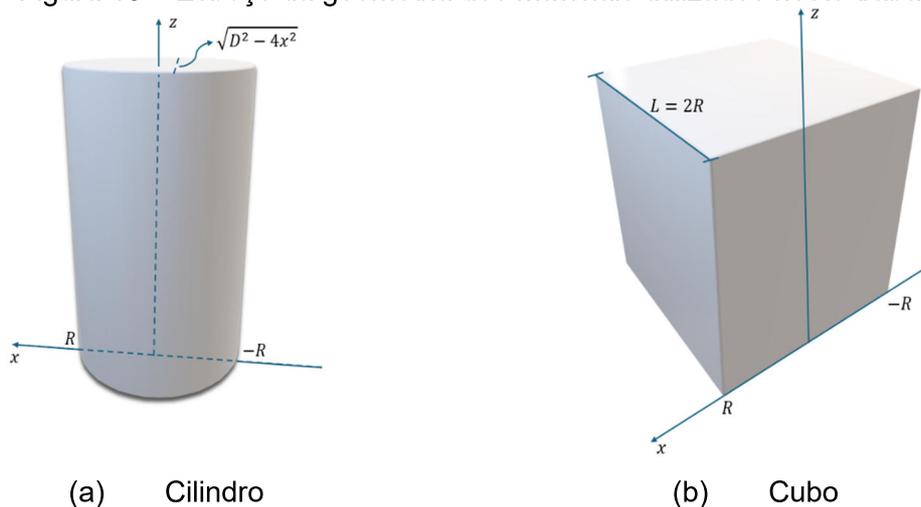
$$I(x) = I_0 e^{-\mu(x)t(x)} \quad (3.1)$$

em que I_0 é intensidade incidente, $\mu(x)$ o coeficiente de atenuação linear do material e $t(x)$ a espessura do objeto atravessado pelo feixe na posição x (ALI et al., 2024; ALSAAB; ZEGHIB, 2023; DANTAS et al., 2013; HERNANDEZ-MURILLO et al., 2022; SIM et al., 2021; YAVUZKANAT; ŞAHMARAN; SARAÇ, 2024).

A intensidade incidente, I_0 , é determinada medindo a quantidade de fótons que chega ao detector, sem material entre a fonte e o detector. A intensidade $I(x)$ é obtida medindo a quantidade de fótons que chega ao detector após atravessar o objeto com espessura $t(x)$ (GOUDA et al., 2023).

Na Figura 13, é apresentado o esboço das formas geométricas dos materiais utilizados neste trabalho.

Figura 13 – Esboço da geometria dos materiais utilizados neste trabalho.



Fonte: O autor (2025).

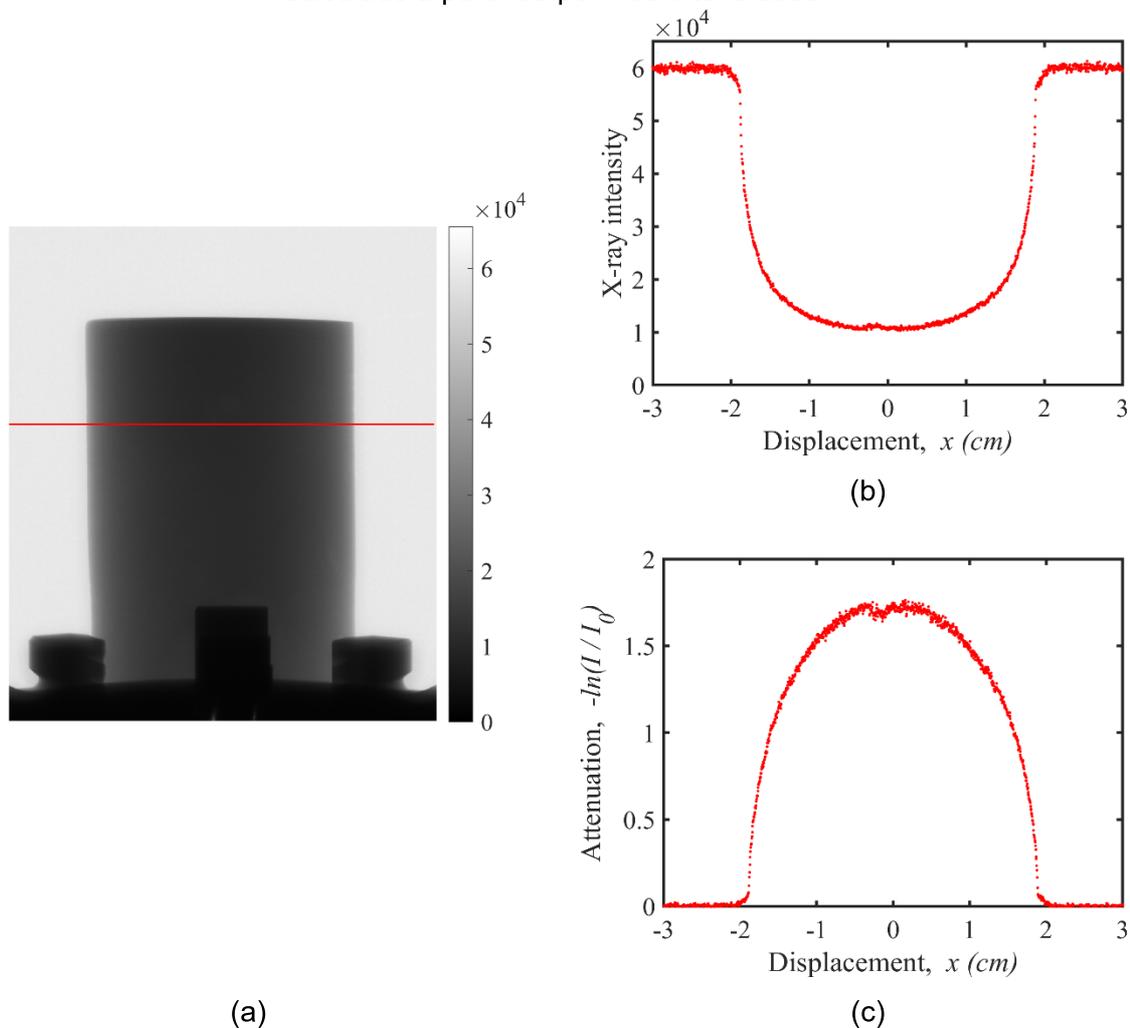
Reescrevendo a Equação (3.1), pode-se expressar a atenuação da radiação por

$$-\ln\left(\frac{I(x)}{I_0}\right) = \mu \cdot t(x) \quad (3.2)$$

Na Figura 14(a), pode-se observar a projeção de uma amostra com uma linha vermelha indicando a seção transversal analisada. O perfil de intensidade correspondente é exibido na Figura 14(b), mostrando variações na intensidade devido à espessura da amostra e a partir desse perfil, foi determinado o perfil de

atenuação apresentado na Figura 14(c), ilustrando a absorção de radiação ao longo da mesma linha de análise.

Figura 14 – (a) Projeção da amostra I(VN01) obtida com a tensão de 180kV. (b) Gráfico de intensidade da radiação ao longo da linha indicada na Figura 3(a). (c) Perfil de atenuação calculado a partir do perfil de intensidade.

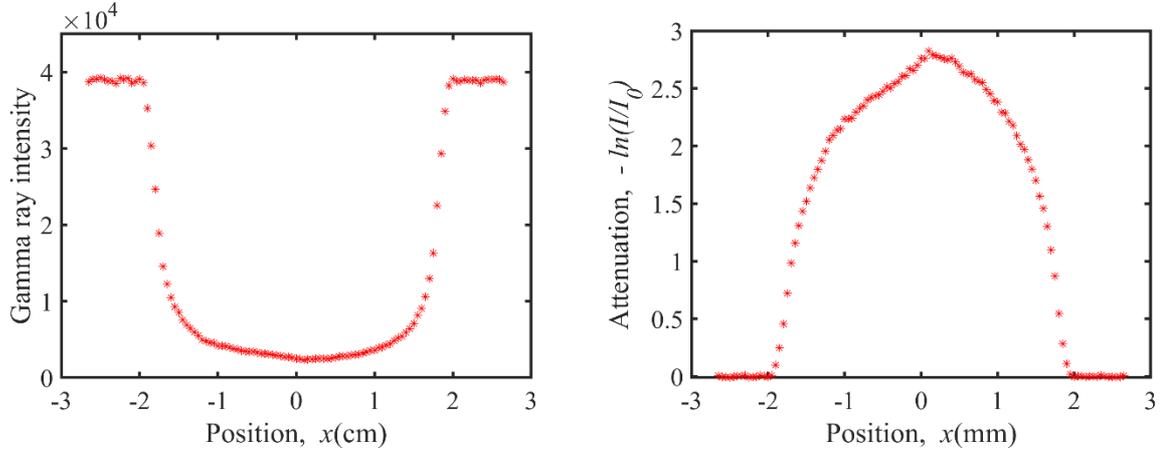


Fonte: O autor (2025).

Para cada linha da projeção, pode-se determinar um perfil de atenuação, da mesma forma que foi determinado e exibido o perfil da Figura 14(c).

Utilizando o tomógrafo gama, foi obtido um único perfil de atenuação para cada escaneamento. Na Figura 15(a) e 15(b) são exibidos os perfis de intensidade e de atenuação, respectivamente, para a mesma amostra apresentada na Figura 14.

Figura 15 – (a) Intensidade da radiação para a amostra VN01 com a fonte de ^{241}Am . (b) Perfil de atenuação calculado a partir do perfil de intensidade.



Fonte: O autor (2025).

A espessura do material ($t(x)$) em função do diâmetro do tarugo (D) ou da aresta do cubo (L) ao longo do deslocamento na direção radial x , é expressa por:

$$t(x) = \begin{cases} \sqrt{D^2 - 4x^2}, & \text{para } -R < x < R \text{ (cilindro)} \\ L, & \text{para } -R < x < R \text{ (cubo)} \end{cases} \quad (3.3)$$

Deste modo, a partir da Equação (3.2) determina-se o perfil do coeficiente de atenuação linear ao longo do deslocamento em x da amostra (AKKURT *et al.*, 2023; GOUDA *et al.*, 2023; ZUBER *et al.*, 2021), que é expresso por:

$$\mu(x) = \frac{1}{t(x)} \ln\left(\frac{I_0}{I(x)}\right), \text{ para } -R \leq x \leq R. \quad (3.4)$$

Por fim, determinamos o coeficiente de atenuação linear do material como a média, Equação (3.5), dos coeficientes obtidos na equação (3.4).

$$\mu = \frac{1}{n} \sum_i^n \mu(x_i) \quad (3.5)$$

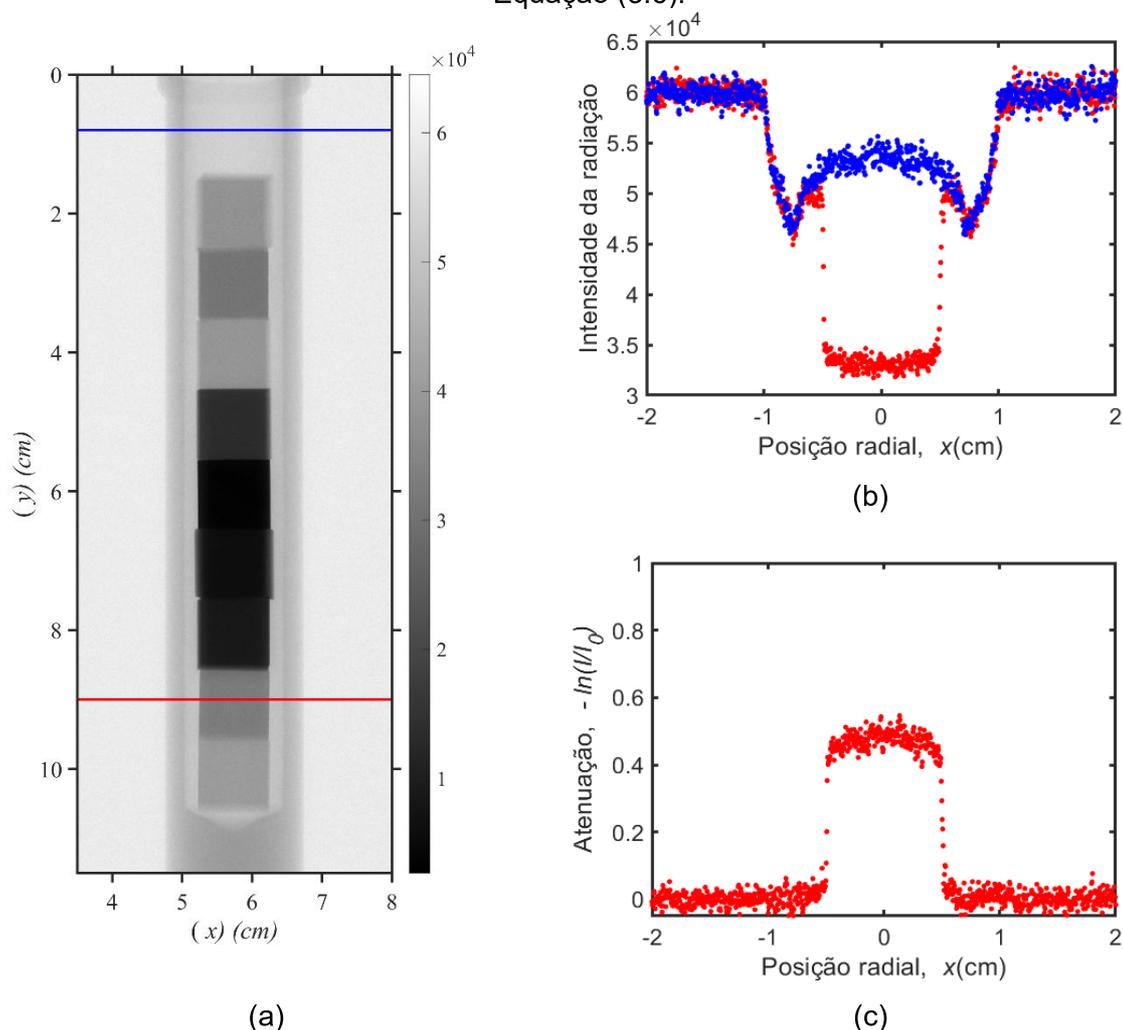
3.3.1 Atenuação da radiação: descrição para materiais confinados em tubos

Alguns phantoms e materiais de calibração utilizados foram acondicionados em tubos de acrílico. Neste caso, as intensidades da radiação nas condições sem material (tubo vazio), I_v , e com material a ser analisado, I , são utilizadas na determinação da atenuação produzida por esses materiais, conforme a Equação (3.6)

$$-\ln\left(\frac{I(x)}{I_v(x)}\right) = \mu \cdot t(x), \quad \text{para } -R_i \leq x \leq R_i \quad (3.6)$$

onde R_i é o raio interno do tubo (FONSECA *et al.*, 2019). A Figura 16(a) mostra uma projeção de um tubo de acrílico contendo diversos materiais, realizada com uma tensão de 180kV. As linhas azul e vermelha indicam as regiões analisadas. Na Figura 16(b), são apresentadas as intensidades da radiação que atravessa o tubo em uma região sem material (linha azul), representando $I_v(x)$, e a intensidade ao atravessar um cubo de silício dentro do tubo (linha vermelha), representando $I(x)$. Na Figura 16(c) observa-se a atenuação da radiação dada pela Equação (3.6).

Figura 16 – (a) Projeção de um tubo de acrílico contendo diversos materiais, obtida com tensão de 180 kV. (b) Intensidade da radiação. (c) Atenuação da radiação dada pela Equação (3.6).

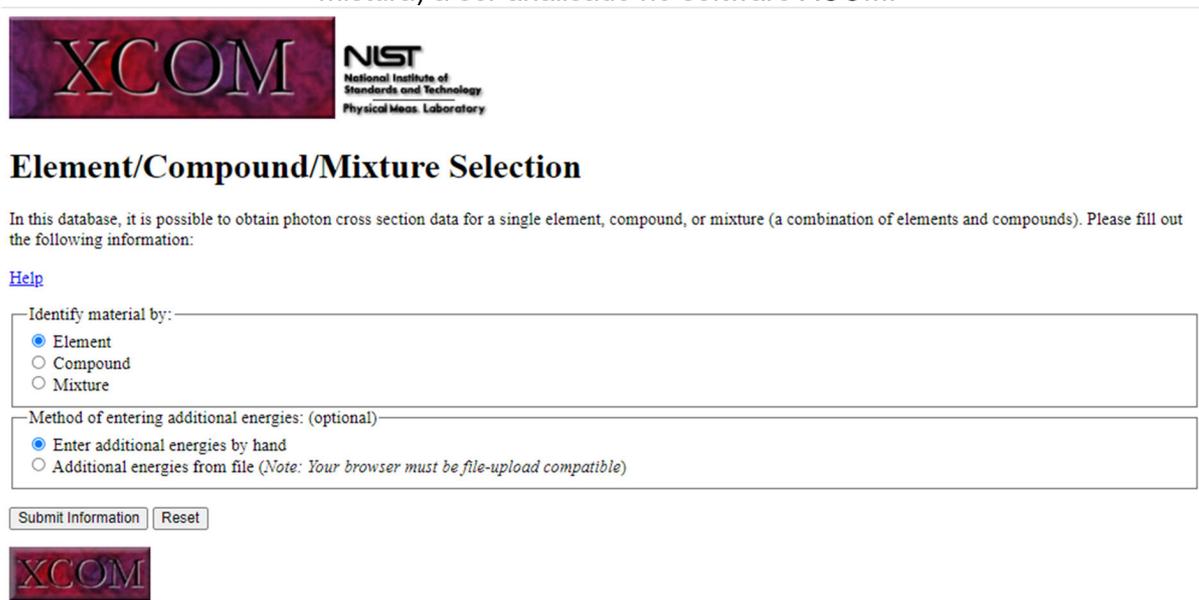


Fonte: O autor (2025).

3.4 COEFICIENTES DE ATENUAÇÃO OBTIDOS COM O XCOM

O software XCOM é um banco de dados da web, desenvolvido pela NIST (National Institute of Standards and Technology), que permite calcular seções transversais de choque de espalhamentos incoerentes e coerentes, efeitos fotoelétricos, produções de pares e coeficientes de atenuação total de qualquer elemento ($Z < 100$), composto ou mistura, com energias de 1 keV até 100 GeV, conforme exibido nas Figuras 17 e 18.

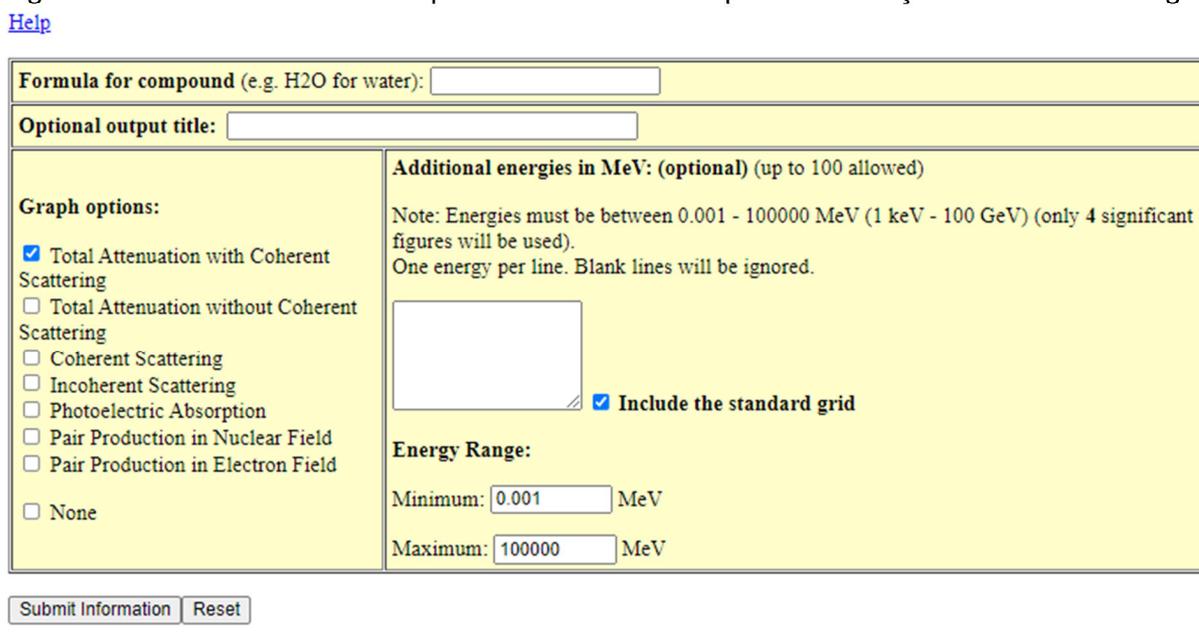
Figura 17 – Interface de entrada para seleção do tipo de material (elemento, composto ou mistura) a ser analisado no software XCOM.



The screenshot shows the XCOM software interface. At the top left is the XCOM logo, and to its right is the NIST logo (National Institute of Standards and Technology, Physical Meas. Laboratory). Below the logos is the title "Element/Compound/Mixture Selection". A paragraph of text explains that the database provides photon cross section data for single elements, compounds, or mixtures, and asks the user to provide identifying information. A "Help" link is provided. The main form has two sections: "Identify material by:" with radio buttons for "Element" (selected), "Compound", and "Mixture"; and "Method of entering additional energies: (optional)" with radio buttons for "Enter additional energies by hand" (selected) and "Additional energies from file (Note: Your browser must be file-upload compatible)". At the bottom of the form are "Submit Information" and "Reset" buttons. Below the form is another XCOM logo.

Fonte: NIST XCOM database (BERGER *et al.*, 2010).

Figura 18 – Interface de entrada para a fórmula do composto e definição da faixa de energia.



The screenshot shows the XCOM software interface for defining a compound and energy range. It features a "Formula for compound (e.g. H2O for water):" input field and an "Optional output title:" input field. Below these are two columns of options. The left column, "Graph options:", includes checkboxes for "Total Attenuation with Coherent Scattering" (checked), "Total Attenuation without Coherent Scattering", "Coherent Scattering", "Incoherent Scattering", "Photoelectric Absorption", "Pair Production in Nuclear Field", "Pair Production in Electron Field", and "None". The right column, "Additional energies in MeV: (optional) (up to 100 allowed)", includes a note about energy ranges (0.001 - 100000 MeV), a text area for entering energies, and a checked checkbox for "Include the standard grid". Below this is the "Energy Range:" section with input fields for "Minimum: 0.001 MeV" and "Maximum: 100000 MeV". At the bottom are "Submit Information" and "Reset" buttons.

Return to [previous](#) document.

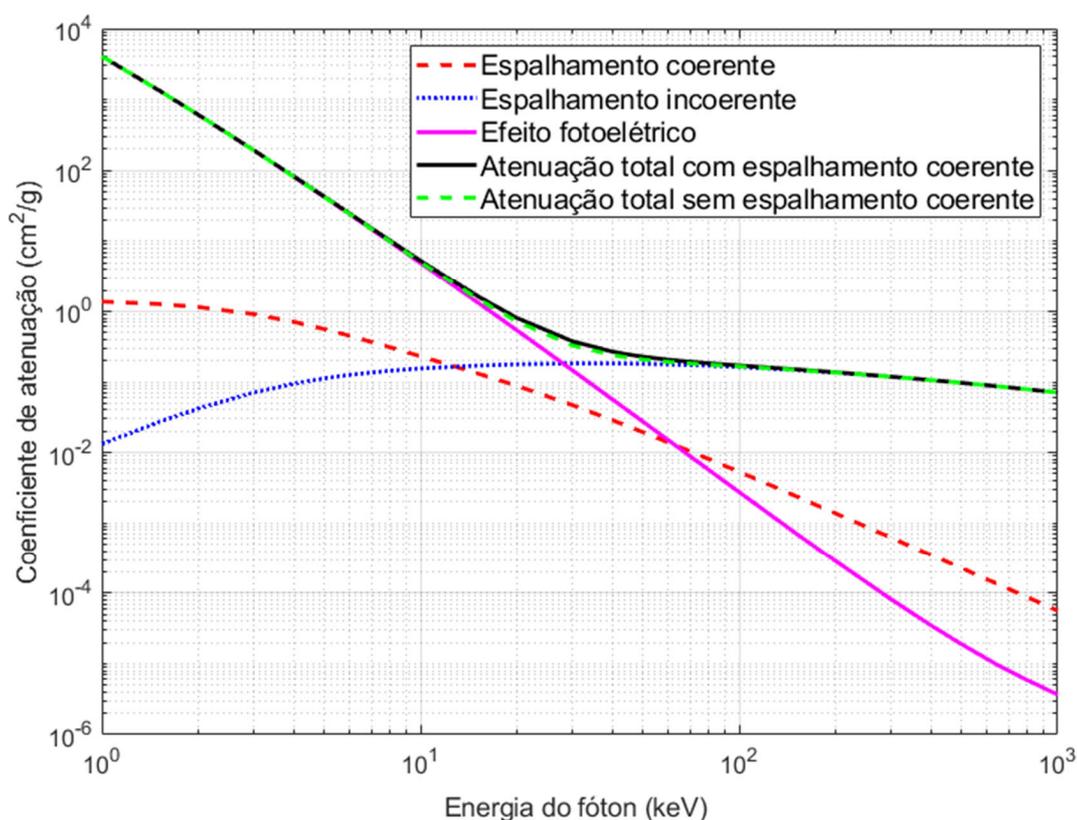
Fonte: NIST XCOM database (BERGER *et al.*, 2010).

Definidas as variáveis de entrada no software XCOM, que são o número atômico do elemento, ou a composição química de um material ou as frações mássicas da composição da mistura e a faixa de energia em estudo, são calculados

os valores dos coeficientes de atenuações mássicos: total com ou sem espalhamento; para o efeito fotoelétrico; para o efeito espalhamento Rayleigh (coerente) e Compton (incoerente); e produção de pares no campo do núcleo ou elétron.

Na Figura 19 estão exibidas as contribuições dos espalhamentos coerentes e incoerentes e do efeito fotoelétrico para a atenuação de fótons com energia de 1 a 1000 keV pela água. Também estão exibidos a atenuação total com e sem espalhamento coerente.

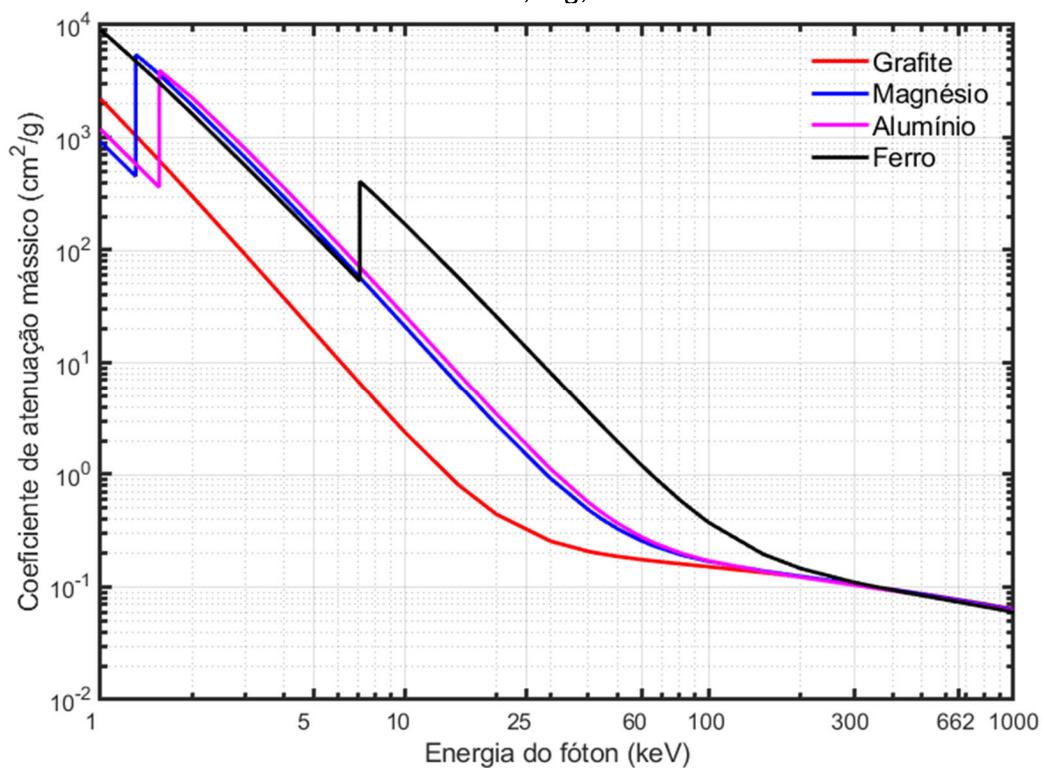
Figura 19 – Coeficientes de atenuação de massa da água para energias de 1 a 1000 keV.



Fonte: O autor (2025).

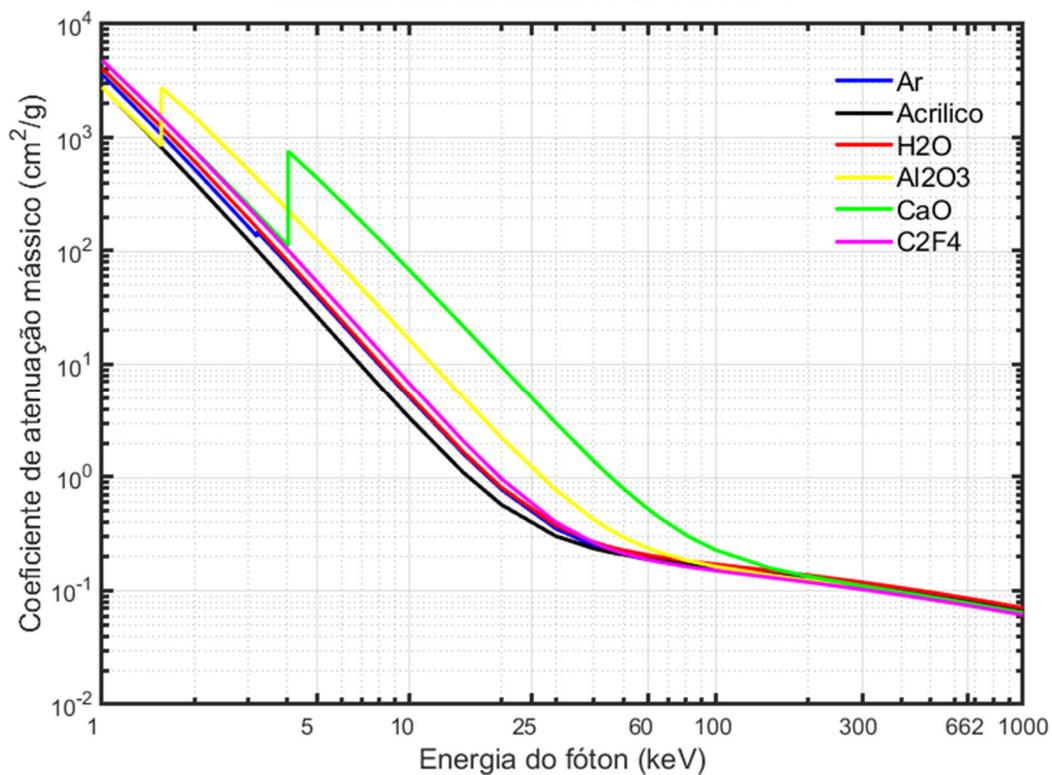
Nas Figuras 20, 21 e 22 exibimos os perfis dos coeficientes de atenuações mássicos totais com espalhamento coerente em função da energia, para os materiais de validação: elementares (Tabela 3), não elementares (Tabela 4) e amostras geológicas (Tabela 5).

Figura 20 – Perfis dos coeficientes de atenuação mássico em função da energia para os elementos C, Mg, Al e Fe.



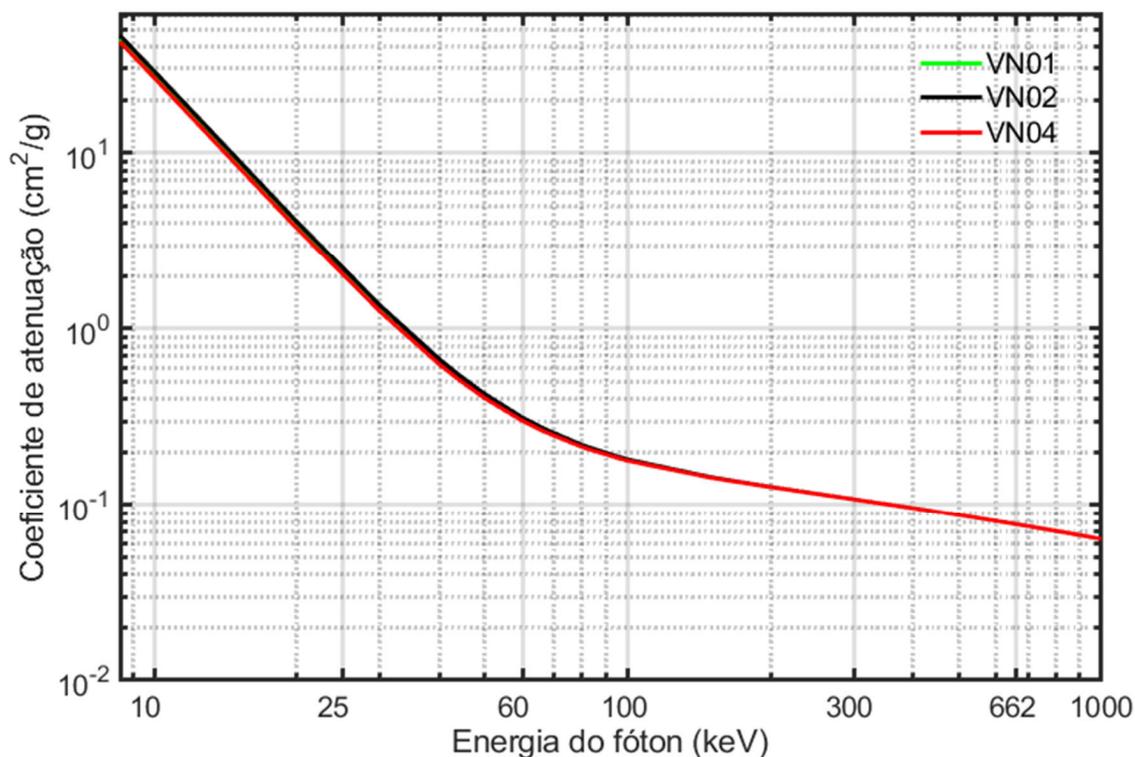
Fonte: O autor (2025).

Figura 21 – Perfis dos coeficientes de atenuação mássico em função da energia para os materiais não elementares da Tabela 4.



Fonte: O autor (2025).

Figura 22 – Perfis dos coeficientes de atenuação mássico em função da energia para as amostras geológicas da Tabela 5.



3.5 MODELO PARA SEÇÃO DE CHOQUE TOTAL

O coeficiente de atenuação linear é a probabilidade de interação por unidade de caminho e se relaciona com a seção de choque efetiva total pela Equação (3.7):

$$\mu = N_A \frac{\rho}{A} \sigma \quad (3.7)$$

A seção de choque efetiva total definida pela Equação (3.7), pode ser modelada matematicamente em função da energia e da composição química dos materiais investigados, pela Equação (3.8):

$$\sigma(E, Z_{eff}) = a(E)Z_{eff} + b(E)Z_{eff}^{c(E)} \quad (3.8)$$

onde E é a energia da radiação e Z_{eff} é o número atômico ou número atômico efetivo, no caso de materiais não elementares. Os coeficientes a , b e c dependem

apenas da energia (sendo desprezada sua dependência material). O primeiro termo da Equação (7) representa a contribuição do espalhamento Compton e o segundo termo representa a absorção fotoelétrica (GEET; SWENNEN; WEVERS, 2000; RIZESCU; BESLIU; JIPA, 2001).

Considerando a Equação (3.8) para duas energias distintas, obtemos as Equações (3.9) e (3.10)

$$\sigma_L = a_L Z_{eff} + b_L Z_{eff}^{c_L} \quad (3.9)$$

$$\sigma_H = a_H Z_{eff} + b_H Z_{eff}^{c_H} \quad (3.10)$$

em que $\sigma_L = \sigma(E_L, Z_{eff})$ e $\sigma_H = \sigma(E_H, Z_{eff})$. Analisando cada uma destas equações para um conjunto de materiais (calibração), pode-se estimar numericamente, pelo método dos mínimos quadrados, os valores de a_L, b_L, c_L, a_H, b_H e c_H , ou seja, os parâmetros de ajuste ao modelo dado pela Equação (3.8).

3.6 MODELO DE DUPLA ENERGIA PROPOSTO

O método desenvolvido no presente trabalho baseia-se na obtenção do número atômico Z e da densidade ρ a partir da estimação de um fator R , que é definido como a razão entre os coeficientes de atenuação linear obtidos para duas energias de raios gama ou raios X. Para determinação dos valores de Z e ρ , define-se uma função de R em Z , considerando uma faixa de número atômicos e densidades que englobem os valores de Z e ρ dos materiais (amostras) que se pretende avaliar.

Medindo os coeficientes de atenuação linear μ do material em dois níveis energéticos distintos, sendo um em baixa energia (E_L) e outro em alta energia (E_H), defini-se a razão da atenuação:

$$R = \frac{\mu_L}{\mu_H} \quad (3.10)$$

em que μ_L e μ_H referem-se aos coeficientes de atenuação linear do material obtidos em baixa energia (E_L) e alta energia (E_H), respectivamente. A razão R é uma função monótona crescente do número atômico. Desta forma, o fator R é determinado exclusivamente para uma determinada composição do material (AZEVEDO *et al.*, 2016; FONSECA *et al.*, 2019; RIZESCU; BESLIU; JIPA, 2001).

Outros autores, tais como Abbasi; Mohammadzadeh; Zamzamian, (2019), Ghaebi; Tajik; Azimirad, (2023), Turturica et al., (2020) e Yalçin; Reyhancan, (2022), definem a razão de atenuação como o quociente entre os coeficientes de atenuação em alta e baixa energia de um feixe de radiação gama ou raios x, ou seja,

$$\tilde{R} = \frac{\mu_H}{\mu_L} \quad (3.11)$$

3.6.1 Modelo para o número atômico efetivo

O modelo matemático proposto neste trabalho, trata-se de uma função algébrica para estimar o número atômico efetivo de um material, em função a razão da atenuação:

$$Z_{eff} = \frac{p_1 + p_2 R + p_3 R^{p_4}}{q_1 + q_2 R + R^{q_3}} \quad (3.12)$$

em que $p_1, p_2, p_3, p_4, q_1, q_2$ e q_3 são os parâmetros de ajuste do modelo.

Nos últimos anos, vários artigos abordaram diversos modelos para expressar o número atômico em função da razão entre os coeficientes de atenuação. Yalçin; Reyhancan, (2022) testaram modelos linear, exponencial e polinomiais de 2ª e 4ª ordem para definir qual melhor ajustava-se ao sistema e materiais utilizados, obtendo, neste caso, o modelo exponencial como o mais adequado. Martini et al., (2021) adotaram um modelo quadrático para a relação entre Z_{eff} e R . Já Rizescu; Besliu; Jipa, (2001) usaram um quociente de polinômios quadráticos para expressar a razão R em função do número atômico efetivo Z_{eff} . Na Tabela 6, tem-se o resumo dos modelos adotados por estes autores, os quais serão comparados com o modelo proposto.

Tabela 6 – Equações de predição do número atômico utilizando o método de dupla energia.

Fonte	Modelo	Função	Equação
Rizescu; Besliu; Jipa, (2001)	Racional Quadrático	$R = \frac{p_1 + q_1Z + r_1Z^2}{p_2 + q_2Z + r_2Z^2}$	(3.13)
Martini et al., (2021)	Quadrático	$Z = a + bR + cR^2$	(3.14)
Yalçin; Reyhancan, (2022)	Exponencial	$Z = ae^{b\bar{R}}$	(3.15)
O autor (2025)	Algébrico	$Z = \frac{p_1 + p_2R + p_3R^{p_4}}{q_1 + q_2R + R^{q_3}}$	(3.12)

Fonte: O autor (2025).

3.6.2 Modelo para densidade

A partir das Equações (3.7), (3.9) e (3.10) os coeficientes de atenuação linear para as energias consideradas podem ser expressos no sistema de Equações (3.16):

$$\begin{cases} \mu_L = (a_L Z_{eff} + b_L Z_{eff}^{c_L}) N_A \frac{\rho}{A} \\ \mu_H = (a_H Z_{eff} + b_H Z_{eff}^{c_H}) N_A \frac{\rho}{A} \end{cases} \quad (3.16)$$

A massa atômica será determinada em função do número atômico por meio de um ajuste. Liu et al., (2023) propuseram um ajuste polinomial de terceira ordem para estimar a massa atômica das amostras. Neste trabalho, será utilizado o ajuste proposto por Rizescu; Besliu; Jipa, (2001):

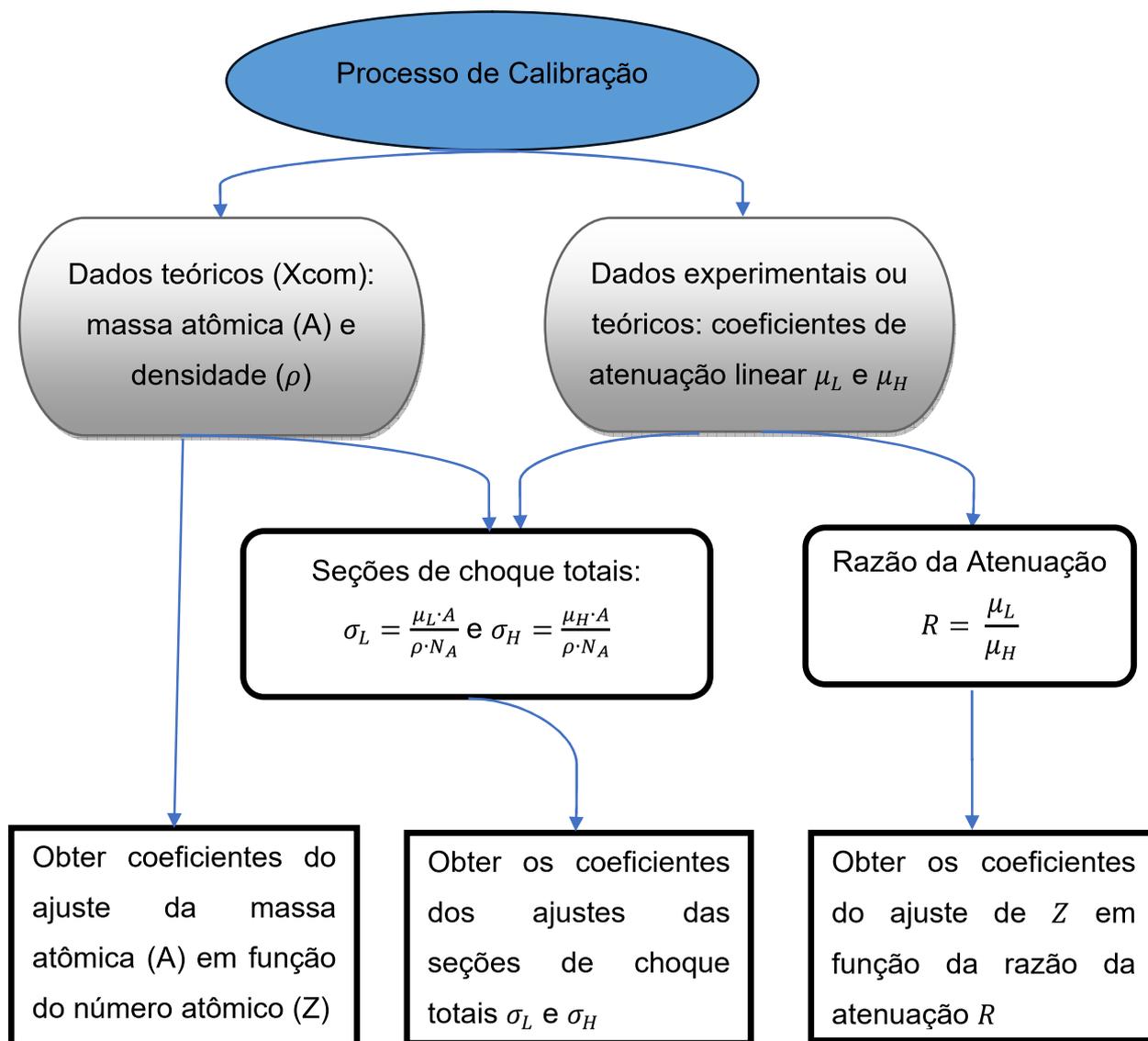
$$A = \sum_{i=0}^7 t_i (\ln Z_{eff})^i \quad (3.17)$$

Por fim, deve-se resolver o Sistema de Equações (3.16) para determinar a densidade da amostra, ρ . Para a resolução do Sistema de Equações (3.16), pode-se utilizar, por exemplo, as funções *mldivide* ou *lsqlin* do MATLAB, que retornam uma solução, mesmo para sistemas sem solução exata, minimizando os resíduos

(MARRERO, 2016). A função *mldivide*, também representada pelo operador “\”, utiliza uma abordagem de mínimos quadrados para sistemas sobredeterminados, oferecendo uma solução eficiente e direta (MARRERO, 2018). Por outro lado, a função *lsqlin* resolve problemas de mínimos quadrados lineares com restrições, permitindo a imposição de limites físicos.

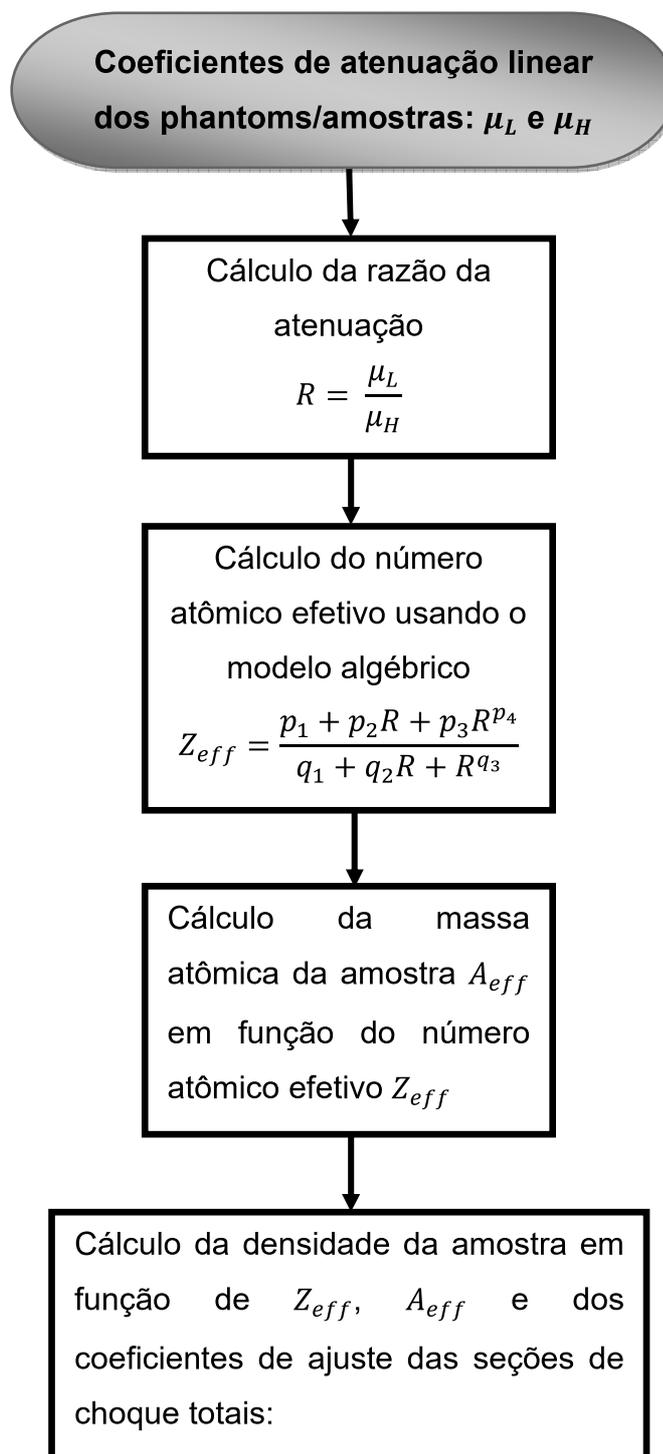
Os Fluxogramas 1 e 2 apresentam, respectivamente, o processo de calibração e o processo de determinação do número atômico e da densidade utilizando o método de dupla energia.

Fluxograma 1 – Processo de calibração do método de dupla energia proposto.



Fonte: O autor (2025).

Fluxograma 2 – Processo de determinação do número atômico e densidade com o método de dupla energia.



Fonte: O autor (2025).

3.7 REGRESSÃO NÃO LINEAR

Da mesma forma que a regressão linear, a regressão não linear é baseada na determinação dos valores de parâmetros que minimizem a soma dos quadrados dos resíduos (S_r) entre os valores y medidos e os valores \hat{y} preditos com o modelo proposto (DEVORE, 2006).

$$S_r = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (3.18)$$

Neste trabalho, para o processo de ajuste, adotou-se a função *lsqcurvefit*, que é usada para ajustar dados a um modelo não-linear usando o método dos mínimos quadrados. A seguir tem-se alguns exemplos da sintaxe da função *lsqcurvefit*:

- $x = \text{lsqcurvefit}(\text{fun}, x_0, \text{xdata}, \text{ydata})$
- $x = \text{lsqcurvefit}(\text{fun}, x_0, \text{xdata}, \text{ydata}, \text{lb}, \text{ub})$
- $[x, \text{resnorm}, \text{residual}, \text{exitflag}, \text{output}] = \text{lsqcurvefit}(\text{fun}, x_0, \text{xdata}, \text{ydata}, \text{lb}, \text{ub}, \text{options})$

No Apêndice A são apresentados detalhes dos argumentos de entrada e saída para a função *lsqcurvefit*.

3.7.1 Qualidade do ajuste

A qualidade dos ajustes dos modelos matemáticos aos dados teóricos ou experimentais será avaliada pelas métricas de regressão: Raiz do Erro Quadrático Médio (RMSE) e R-quadrado (Coeficiente de Determinação). Estas métricas de regressão quantificam a precisão dos modelos preditivos medindo a diferença entre os valores previstos e reais. Além destas métricas, também utilizaremos a análise de variância da regressão.

3.7.1.1 Raiz do Erro Quadrático Médio (RMSE)

O RMSE é uma medida estatística amplamente utilizada para avaliar a precisão de um modelo de ajuste de curvas (ZHAN; CHONG, 2021). Para calcular o

RMSE, seguimos estes passos: a) Calcular o erro para cada ponto (diferença entre o valor real e o valor previsto) b) Elevar cada erro ao quadrado c) Calcular a média desses erros quadráticos d) Determinar a raiz quadrada dessa média. Matematicamente, é representado pela Equação (3.19)

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (3.19)$$

Quanto menor o valor do RMSE, melhor é o ajuste do modelo aos dados. O RMSE é expresso na mesma unidade das variáveis originais, o que facilita sua interpretação. Tem a vantagem de ser sensível a outliers, o que pode ser útil para identificar modelos que produzem erros grandes ocasionalmente. O RMSE penaliza erros maiores mais severamente que erros menores devido ao termo quadrático.

3.7.1.2 Coeficiente de Determinação (R^2 , R -quadrado ou R -dois)

A métrica R^2 , também conhecida Coeficiente de Determinação (R^2 , R -quadrado ou R -dois), representa o percentual da variância dos dados que é explicado pelo modelo (DEVORE, 2006). Os resultados variam de 0 a 1, geralmente também são expressos em termos percentuais, ou seja, variando entre 0% e 100%. Quanto maior é o valor de R^2 , mais explicativo é o modelo em relação aos dados previstos. Na Equação (3.20) é mostrado o cálculo desta métrica.

$$R^2 = 1 - \frac{\text{Variação Residual}}{\text{Variação Total}} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad (3.20)$$

onde y_i e \hat{y}_i representam os valores reais (observados) e preditos, respectivamente, e \bar{y} a média dos valores reais.

3.7.1.3 Análise de variância da regressão

A Análise de Variância (ANOVA) da regressão é uma técnica estatística utilizada para avaliar a significância de um modelo de regressão. Ela determina se o modelo explica uma quantidade significativa da variação nos dados em comparação com a variação não explicada (erro). A ANOVA de regressão decompõe a soma dos quadrados em componentes que são associados à regressão e ao erro, permitindo uma avaliação detalhada do ajuste do modelo, a qual é geralmente apresentada como na Tabela 7 (DEVORE, 2006; MAGALHÃES; LIMA, 2002):

Tabela 7: Tabela ANOVA.

Fonte de Variação	G.L.	S.Q.	Q.M.	F	p-valor
Regressão	$p - 1$	SQ_{reg}	$SQ_{reg} / (p - 1)$	QMreg / QMres	
Resíduos	$n - p$	SQ_{res}	$SQ_{res} / (n - p)$		
Total	$n - 1$	SQ_{total}	$SQ_{total} / (n - 1)$		

Fonte: O autor (2025).

A seguir apresentamos os elementos da Tabela ANOVA:

- Fonte de variação: Identifica os componentes da variação nos dados:
 - Regressão: Variação explicada pelo modelo.
 - Resíduos: Variação não explicada pelo modelo (erro).
 - Total: Variação total nos dados.
- Graus de Liberdade (G.L.):
 - Regressão ($p-1$): Onde p é o número de parâmetros do modelo. Reflete a quantidade de informação utilizada para estimar os parâmetros do modelo.
 - Resíduos ($n-p$): Onde n é o número de observações. Reflete a quantidade de informação não explicada pelo modelo.
 - Total ($n-1$): Reflete a variação total nos dados.
- Soma dos Quadrados (S.Q.):
 - SQ_{reg} (Regressão): Mede a variação explicada pelo modelo.
 - SQ_{res} (Resíduos): Mede a variação não explicada pelo modelo.

- *SQtotal* (Total): Soma dos quadrados total, que é a soma de *SQreg* e *SQres*.
- Quadrados Médios (Q.M.):
 - *QMreg* (Regressão): É o *SQreg* dividido pelos graus de liberdade da regressão ($p-1$).
 - *QMres* (Resíduos): É o *SQres* dividido pelos graus de liberdade dos resíduos ($n-p$).
- Estatística *F*: Calculada como a razão entre o *QMreg* e *QMres*. Um valor de *F* elevado indica que a variação explicada pelo modelo é significativamente maior do que a variação não explicada.
- *p*-valor: Indica a probabilidade de observar um valor de *F* tão extremo quanto o obtido, assumindo que a hipótese nula (de que o modelo não é significativo) é verdadeira. Um *p*-valor baixo (geralmente menor que 0,05) indica que o modelo é estatisticamente significativo.

A análise de variância da regressão fornece uma visão detalhada da qualidade do ajuste do modelo. Um valor de *F* elevado e um *p*-valor baixo indicam que o modelo de regressão é eficaz em explicar a variação nos dados, além de ser estatisticamente significativo. Esta análise complementa as métricas RMSE e R^2 , oferecendo uma compreensão abrangente da qualidade do modelo e de sua capacidade preditiva.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 TOMOGRAFIA GAMA

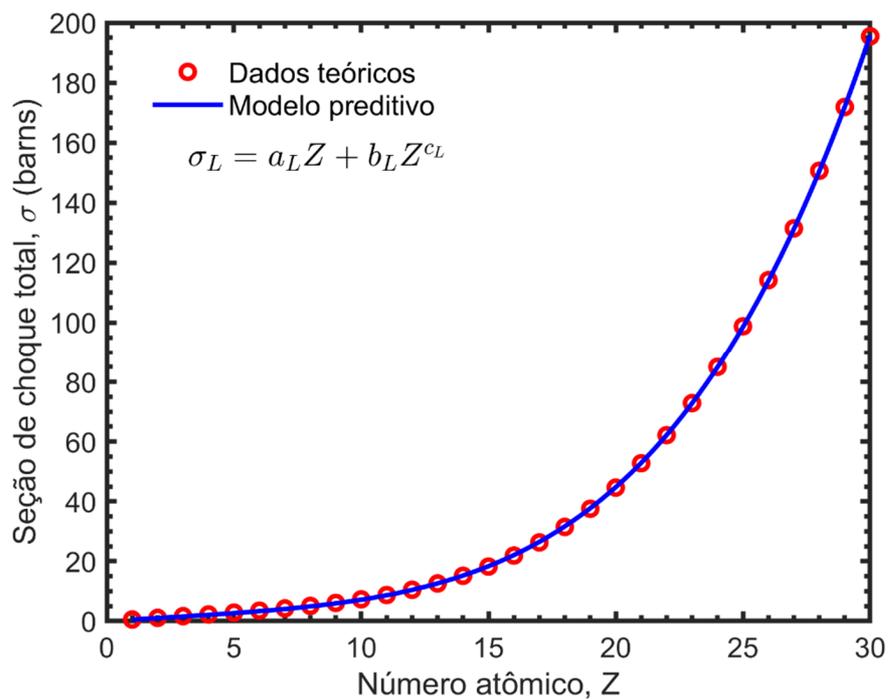
Nesta seção, serão apresentados e discutidos os resultados da determinação do número atômico e densidade utilizando tomografia de transmissão de raios gama de dupla energia. Inicialmente, na subseção 4.1.1, é detalhada a construção das curvas de calibração teóricas, empregando dados do NIST XCOM para elementos com número atômico $Z \leq 30$. Em seguida, essas curvas de calibração teóricas são aplicadas para determinar o número atômico e a densidade das amostras de validação.

A subseção 4.1.2 apresenta uma análise comparativa da razão de atenuação obtida experimentalmente e teoricamente para os materiais de calibração. Na subseção 4.1.3, são destacadas as curvas de calibração experimentais, demonstrando o ajuste do modelo preditivo para as seções de choque e os dados obtidos em laboratório. A subseção 4.1.4, avalia o desempenho do modelo algébrico em comparação com outros modelos da literatura, para determinar o número atômico. Por fim, na subseção 4.1.5, o modelo proposto é utilizado para determinar o número atômico e a densidade dos phantoms e amostras geológicas.

4.1.1 Curva de Calibração Teórica

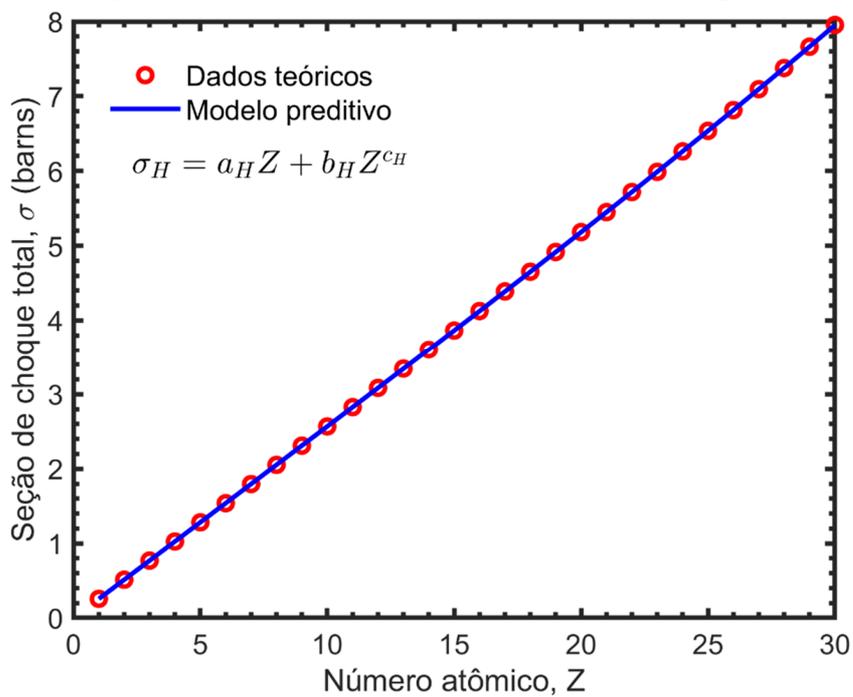
Uma primeira avaliação do método proposto na Seção 3.6 foi realizada usando os elementos químicos com número atômico $Z \in [1, 30]$. Nas Figuras 23 e 24 estão exibidos os valores teóricos das seções de choque totais (σ) para as energias de 59,5 keV e 662 keV, com respectivos ajustes pelo método dos mínimos quadrados. Estes valores das seções de choque, foram obtidos utilizando a Equação (3.7), a partir dos coeficientes de atenuação de massa disponíveis no banco de dados XCOM do NIST (National Institute of Standards and Technology) (BERGER *et al.*, 2010). Os ajustes dos valores de σ foram realizados com a função `lsqcurvefit` (least squares curve fit) do software MATLAB, permitindo determinar os valores dos coeficientes a_L, b_L, c_L, a_H, b_H e c_H , mostrados na Tabela 8.

Figura 23 – Ajuste das seções de choque totais para a energia de 59,5 keV.



Fonte: O autor (2025).

Figura 24 – Ajuste das seções de choque totais para a energia de 662 keV.



Fonte: O autor (2025).

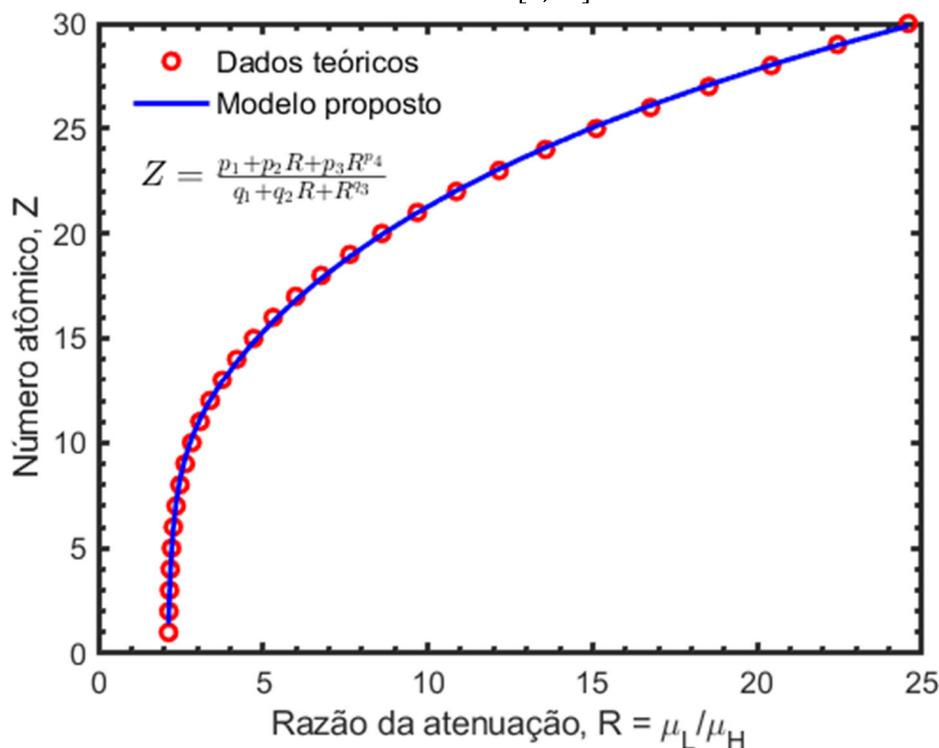
Tabela 8 – Coeficientes obtidos pelo ajuste das seções de choque totais às Equações (3.9) e (3.10).

Coeficiente	Valor	Coeficiente	Valor
a_L	0,5117	a_H	0,2565
b_L	$1,7062 \cdot 10^{-4}$	b_H	$3,4178 \cdot 10^{-7}$
c_L	4,0783	c_H	3,9735

Fonte: O autor (2025).

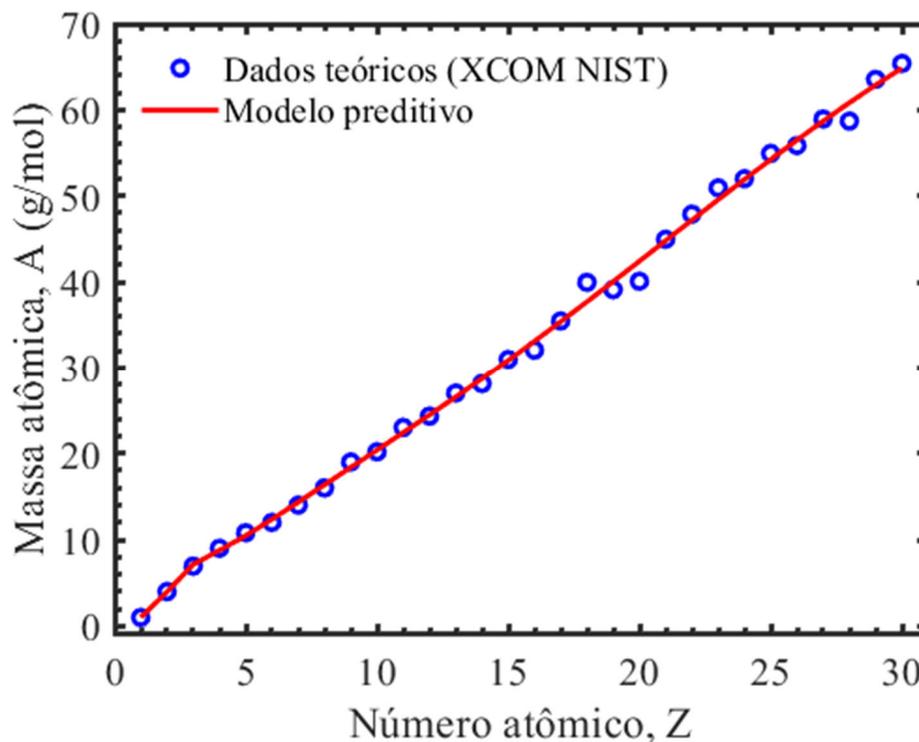
A razão da atenuação R , para os níveis energéticos do ^{241}Am e do ^{137}Cs , para os elementos com número atômico $Z \in [1,30]$, é apresentada na Figura 25. Nesta mesma figura, é mostrado o ajuste dos valores teóricos ao modelo proposto, conforme a Equação (3.12), cujos coeficientes obtidos estão listados na Tabela 9. O ajuste para a massa atômica em função do número atômico, Equação (3.17), é apresentado na Figura 26, com coeficientes exibidos na Tabela 9.

Figura 25 – Número atômico em função da razão (R) para todos os elementos com número atômico $Z \in [1,30]$.



Fonte: O autor (2025).

Figura 26 – Massa atômica (A) em função do número atômico (Z).



Fonte: O autor (2025).

Tabela 9 – Valores dos coeficientes de ajustes das Equações (3.12) e (3.17) para cálculos do número atômico e da massa atômica.

Coeficiente	Z	Coeficiente	A
	Valor		Valor
p_1	$9,8974 \cdot 10^{-3}$	t_0	1,0094
p_2	-4,4571	t_1	-36,0165
p_3	4,4199	t_2	144,3615
p_4	1,0098	t_3	-198,8996
q_1	$-7,4972 \cdot 10^{-3}$	t_4	139,0003
q_2	$3,7890 \cdot 10^{-3}$	t_5	-52,1800
q_3	-15,4284	t_6	10,1006
		t_7	-0,7873

Fonte: O autor (2025).

Para os ajustes das seções de choque σ_L e σ_H em função do número atômico Z , de Z em função da razão da atenuação R , e da massa atômica A em função do número atômico Z , foram encontrados coeficientes de determinação $R^2 \geq 0,9996$, indicando que os modelos explicam no mínimo 99,96% da variação nos dados. Além

disso, a análise de variância (ANOVA) mostrou que os modelos adotados são estatisticamente significativos ao nível de 99%, com valores de F elevados e valores- p menores que 0,0001, reforçando que os modelos ajustados são eficazes e adequados para capturar as relações entre as variáveis estudadas (RAPOSO, 2016).

4.1.1.1 Determinação do número atômico e densidade

Os valores dos coeficientes de atenuação obtidos experimentalmente por transmissão gama, para as amostras (C, Mg, Al, Fe), foram utilizados para obtenção dos valores da razão da atenuação R . A partir do ajuste para o número atômico, mostrado na Figura 25, foram determinados os valores do número atômico dos quatro elementos selecionados para validação, cujos resultados estão exibidos na Tabela 10. Além disso, os valores teóricos de R , obtidos a partir do banco de dados NIST XCOM, foram utilizados para as mesmas amostras de validação, estimando os valores de Z de maneira análoga ao procedimento realizado com os dados experimentais.

Tabela 10 – Valores teóricos (Teo) e experimentais (Exp) para a razão R e o número atômico (Z) das amostras de validação, obtidos com o método de dupla energia proposto.

Elemento	R		Z				
	Teo	Exp	Ref	Teo	ER	Exp	ER
C	2,2787	2,2755	6	5,98	0,33%	5,91	1,50%
Mg	3,3945	3,5355	12	12,02	0,17%	12,38	3,17%
Al	3,7627	3,8740	13	12,93	0,54%	13,18	1,38%
Fe	16,7599	16,4365	26	26,10	0,38%	25,92	0,31%

Fonte: O autor (2025).

Os valores da densidade dos quatro elementos selecionados para validação, obtidos resolvendo o Sistema de Equações (3.16), estão apresentados na Tabela 11.

Tabela 11 – Valores de densidade obtidos com o método de dupla energia, a partir de dados teóricos (Teo) e experimentais (Exp) para as amostras de validação.

Elemento	ρ (g/cm ³)				
	Ref	Teo	ER	Exp	ER
C	1,70	1,83	-7,65%	1,85	-8,82%
Mg	1,74	1,75	-0,57%	1,63	6,32%
Al	2,70	2,67	1,11%	2,66	1,48%
Fe	7,87	7,90	-0,38%	7,67	2,54%

Fonte: O autor (2025).

Os resultados apresentados nas Tabelas 10 e 11 indicam uma boa concordância entre os valores preditos e os de referência, especialmente para o número atômico. As diferenças percentuais para Z foram inferiores a 1,00% considerando dados teóricos e a 3,20% para valores experimentais. Para a densidade, as diferenças são ligeiramente maiores, com o carbono apresentando as maiores discrepâncias: -7,65% a partir de dados teóricos e -8,82% para os dados experimentais. Os outros elementos mostraram diferenças variando de -0,38% a 1,11% para dados teóricos, e de 1,48% a 6,32% para dados experimentais. Estes resultados foram avaliados com o uso de métricas estatísticas, mais precisamente pela análise dos valores dos coeficientes de determinação R^2 e dos erros quadráticos médios (RMSE) para as relações entre os valores de Z e ρ de referência e os valores preditos com o modelo, a partir das razões das atenuações teóricas e experimentais.

Os valores obtidos para R^2 e RMSE, exibidos na Tabela 12 indicam a alta precisão do modelo algébrico proposto para determinação do número atômico. Notadamente, os valores das métricas indicam uma melhor concordância entre os valores de Z e ρ de referência e os preditos teoricamente, isto pode ser explicado pelos erros intrínsecos subjacentes ao processo de obtenção dos coeficientes de atenuação com o tomógrafo de raios gama.

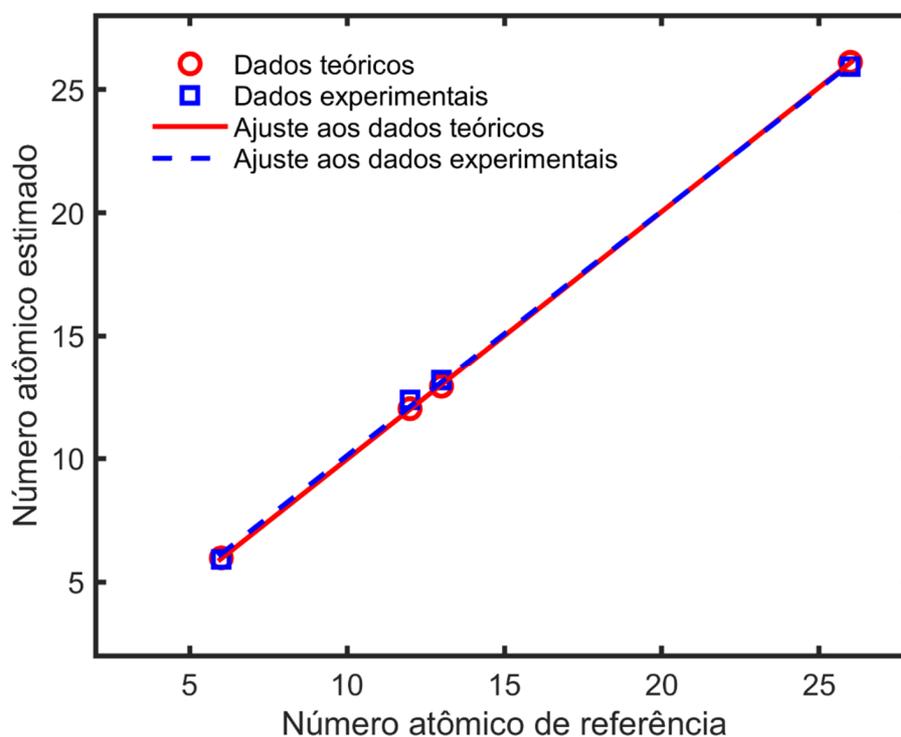
Tabela 12 - Métricas para avaliação das previsões do número atômico e densidade a partir de valores de R teóricos e experimentais.

	Z		ρ	
	Experimental	Teórico	Experimental	Teórico
R^2	0,9993	1,0000	0,9986	0,9995
RMSE	0,2698	0,0570	0,1304	0,0817

Fonte: O autor (2025).

A Figura 27 ilustra graficamente a relação entre valores preditos e de referência para o número atômico, utilizando dados teóricos e experimentais. Observa-se uma excelente concordância, com pontos distribuídos muito próximos às curvas de ajuste, indicando alta precisão na determinação. A ligeira diferença entre as curvas para dados teóricos e experimentais reflete as incertezas inerentes às medições práticas.

Figura 27 - Comparação de resultados preditos com os valores de referência para o número atômico.



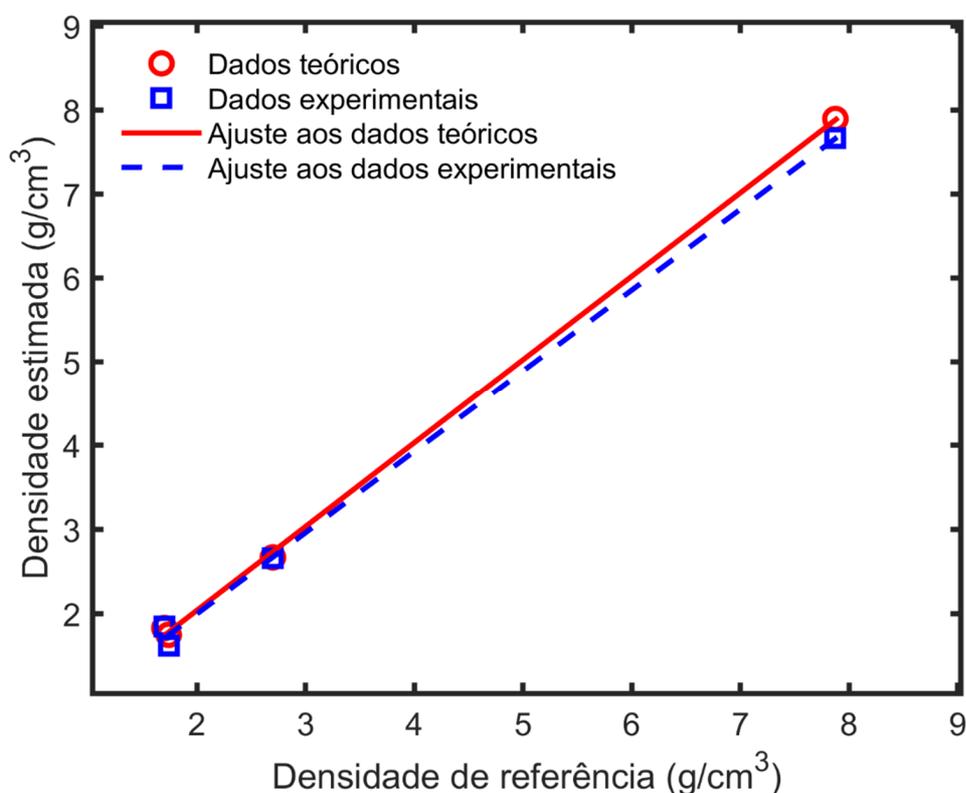
Fonte: O autor (2025).

Para ρ (Figura 28), nota-se uma correlação forte, embora com uma dispersão um pouco maior que para Z . As curvas de ajuste em ambos os gráficos demonstram

a capacidade do modelo em capturar a tendência dos dados em toda a faixa de valores analisados.

Por fim, estes resultados indicam que mesmo utilizando dados teóricos para construção das curvas de calibração, os resultados para o número atômico e densidade, obtidos com valores experimentais da razão R são satisfatórios, com discrepâncias inferiores a 4% em relação aos valores de referência para o número atômico e inferiores a 9% para a densidade.

Figura 28 - Comparação de resultados preditos com os valores de referência para a densidade.



Fonte: O autor (2025).

4.1.2 Razão da atenuação

A Tabela 13 apresenta uma comparação entre os valores da razão de atenuação, R , obtidos a partir do banco de dados NIST XCOM e os valores obtidos de forma experimental com medições dos coeficientes de atenuação, utilizando a técnica de tomografia de transmissão de radiação gama para duas energias (59,5 keV e 662 keV) emitidas de duas diferentes fontes radioativas (²⁴¹Am e ¹³⁷Cs), para os seguintes materiais de calibração: C, Al, Si, Ti, V, Cr, Co, Ni, Cu e Zn. Esses

materiais foram utilizados para obtenção de curvas de calibração definidas pelas Equações (3.9), (3.10) e (3.12).

Os dados exibidos na Tabela 13 indicam uma boa concordância entre os valores teóricos (R_{teo}) e experimentais (R_{exp}) da razão de atenuação. As diferenças percentuais relativas variam de 0,20% para o Carbono até 4,05% para o Níquel. Ressalta-se que 8 dos 10 materiais analisados apresentam erro relativo abaixo de 3%, indicando alta precisão nas medições experimentais.

Tabela 13 - Comparação da Razão da atenuação teórica (R_{teo}) e experimental (R_{exp}) para o método de dupla energia para os materiais de calibração (C, Al, Si, Ti, V, Cr, Co, Ni, Cu, Zn).

Item	Materiais	R		ER
		Teórico	Experimental	
1	Carbono	2,2787	2,2834	0,20%
2	Alumínio	3,7627	3,7520	0,29%
3	Silício	4,2020	4,1479	1,29%
4	Titânio	10,8689	10,8967	0,26%
5	Vanádio	12,1674	12,0890	0,64%
6	Cromo	13,5735	13,1675	2,99%
7	Cobalto	18,5302	18,3122	1,18%
8	Níquel	20,4243	19,5977	4,05%
9	Cobre	22,4361	21,6555	3,48%
10	Zinco	24,5799	23,9659	2,50%

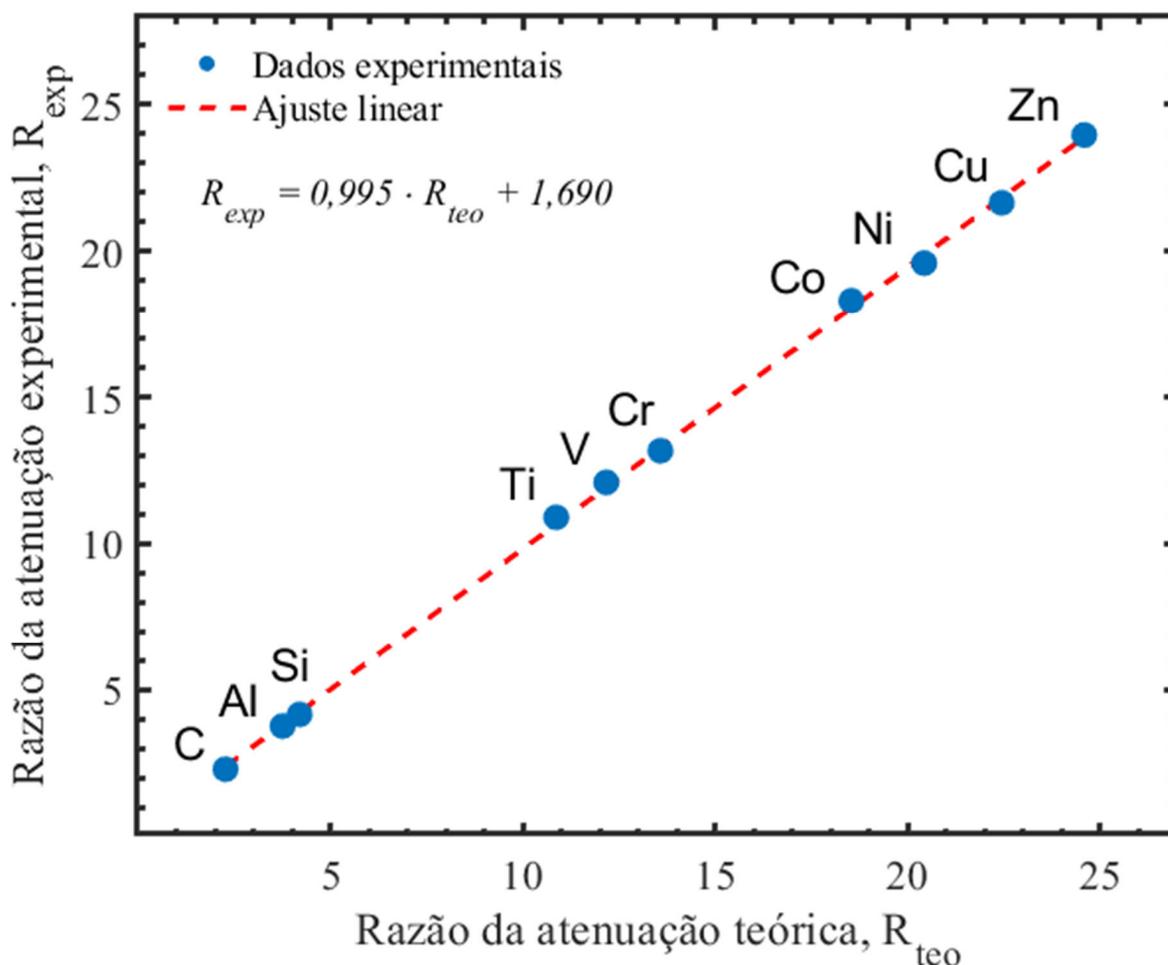
Fonte: O autor (2025).

A Figura 29 apresenta a regressão de R_{exp} em função de R_{teo} , onde o gráfico de dispersão mostra uma correlação muito forte ($R^2 = 0,9995$, $p < 0,01$) entre os valores teóricos (R_{teo}) e experimentais (R_{exp}). Observa-se uma boa concordância entre os resultados experimentais e os valores teóricos, o que está em linha com outros trabalhos experimentais que utilizam tomografia de raios gama, como os de Garba et al., (2024) e Günoğlu et al. (2024).

A análise dos resultados apresentados na Tabela 13 e na Figura 29 evidencia a eficácia da técnica de tomografia de transmissão de radiação gama empregada neste estudo. O método proposto mostra-se capaz de produzir medições precisas da

razão de atenuação para uma ampla gama de materiais, abrangendo desde elementos leves como o carbono até elementos mais pesados como o zinco.

Figura 29 - Comparação dos valores teóricos (R_{teo}) com os resultados experimentais (R_{exp}) da razão da atenuação para os materiais da calibração.



Fonte: O autor (2025).

4.1.3 Curvas de calibração experimentais

As Figuras 30 e 31 ilustram o ajuste do modelo preditivo para as seções de choque e os dados experimentais obtidos com a técnica de transmissão de raios gama para as energias de 59,5keV e 662keV, respectivamente.

As Figuras 32 e 33 mostram os valores observados (mensurados) e os preditivos estimados pelas Equações (3.9) e (3.10), com erro percentual absoluto médio inferior a 0,02% para ambos os níveis de energia. Os ajustes entre os valores medidos e estimados para as energias de 59,5keV e 662keV apresentaram

coeficientes de determinação de 0,9996 e 0,9980, respectivamente, com valores de $p < 0,001$, indicando a alta precisão do modelo calibrado com dados experimentais.

Figura 30 – Curva de ajuste para a seção de choque total, baseada nos elementos de calibração, para a energia de 59,5 keV.

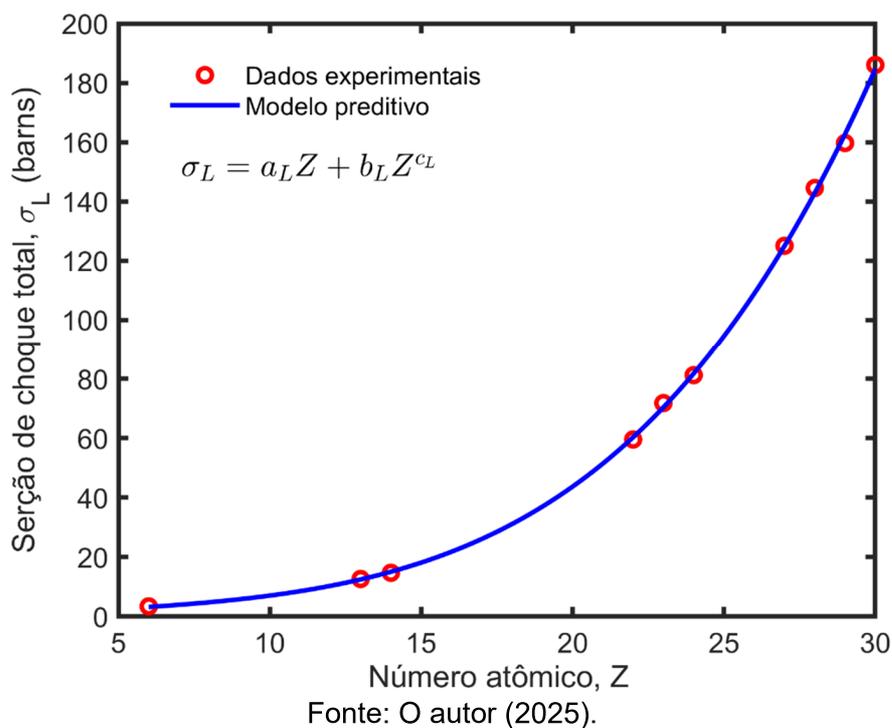


Figura 31 – Curva de ajuste para a seção de choque total, baseada nos elementos de calibração, para a energia de 662 keV.

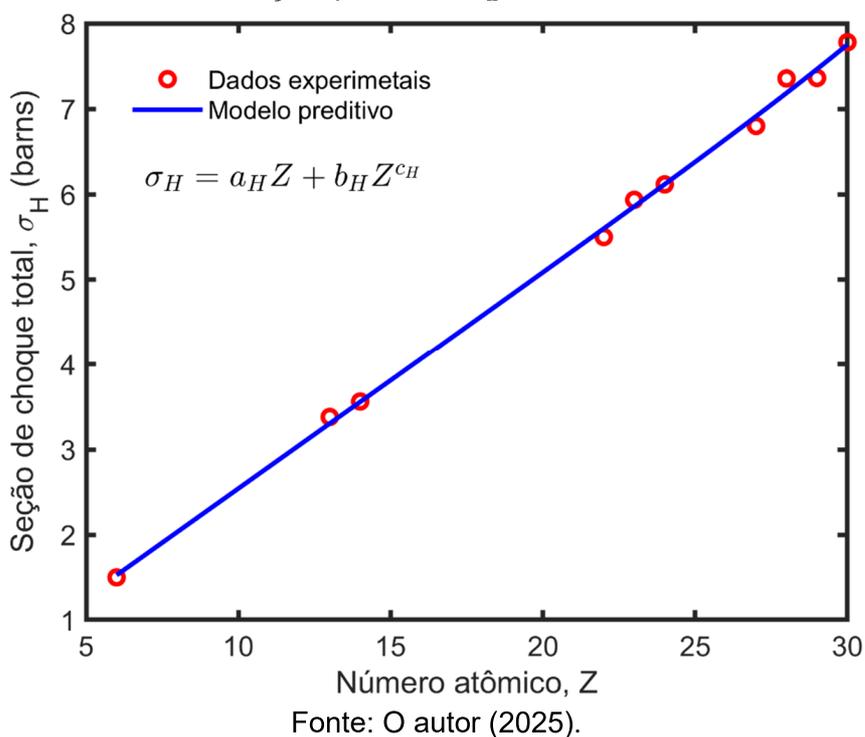
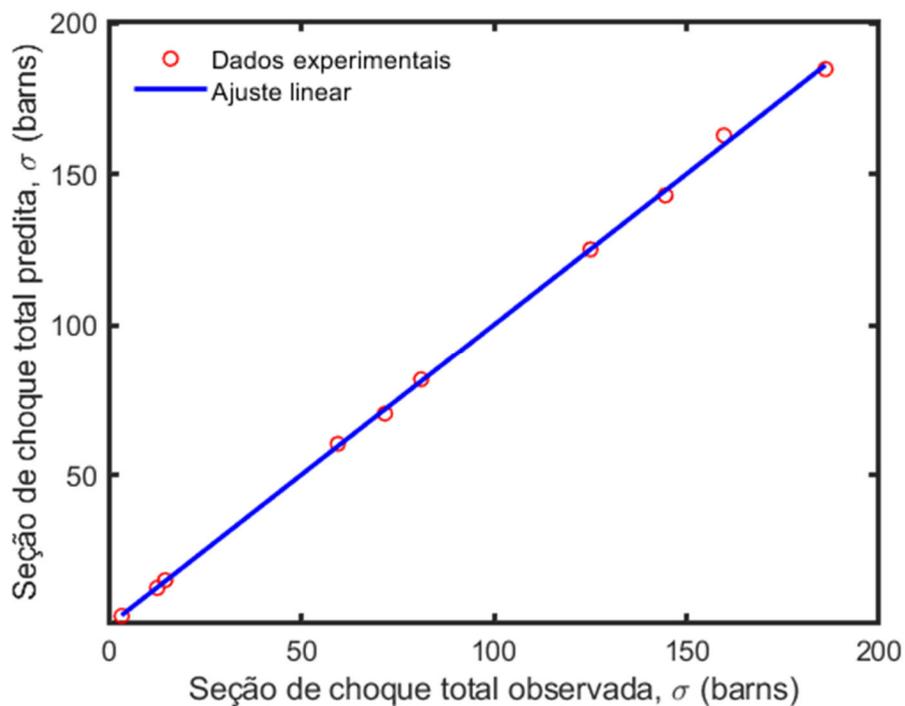
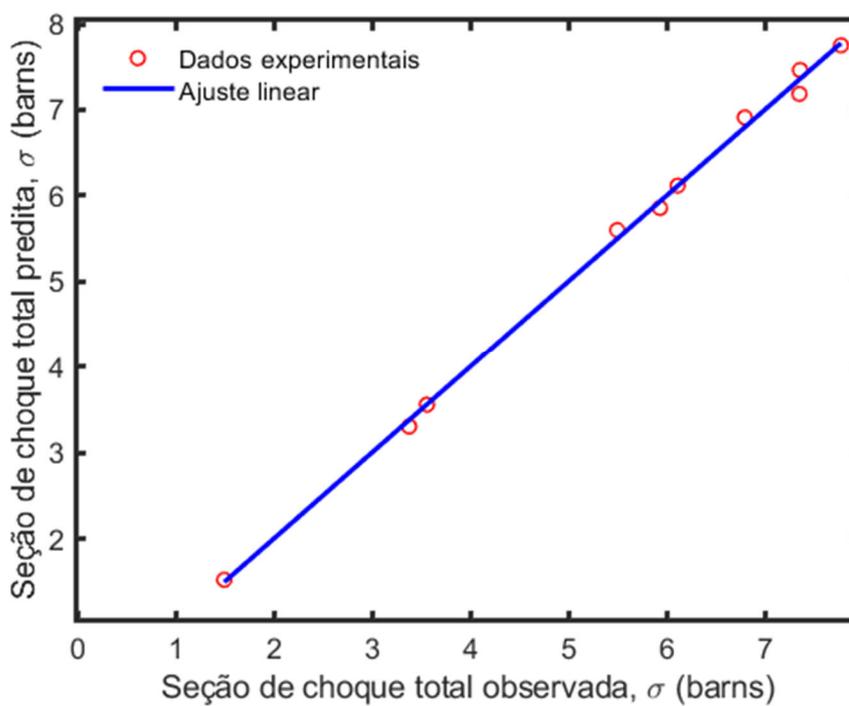


Figura 32 – Comparação entre os valores das seções de choque totais preditos e mensurados para a energia de 59,5 keV.



Fonte: O autor (2025).

Figura 33 – Comparação entre os valores das seções de choque totais preditos e mensurados para a energia de 662 keV.



Fonte: O autor (2025).

A Tabela 14 apresenta os coeficientes dos ajustes das seções de choque totais para os materiais de calibração, utilizando o modelo definido pela Equação (3.8), para as energias de 59,5keV e 662keV. Observa-se uma variação significativa nos valores entre as duas energias, particularmente no coeficiente 'b', que difere em nove ordens de magnitude ($2,2090 \times 10^{-4}$ para 59,5keV e $4,0779 \times 10^{-13}$ para 662keV). Esta diferença reflete a transição na dominância dos processos de interação para a faixa de números atômicos estudados ($Z = 6$ a $Z = 30$). Em 59,5keV, o efeito fotoelétrico é significativo, tornando-se predominante para elementos com Z mais elevado dentro desta faixa. Em contraste, em 662keV, o espalhamento Compton é o processo dominante para toda a faixa de Z considerada. Os coeficientes 'a' e 'c' também apresentam variações significativas entre as duas energias. O coeficiente 'a' diminui aproximadamente pela metade, enquanto 'c' praticamente dobra de 59,5keV para 662keV. Essas mudanças refletem as alterações nas contribuições relativas dos termos linear e exponencial do modelo, respectivamente, adaptando-se às características específicas das interações da radiação em cada regime energético. Estas diferenças demonstram a capacidade do modelo em capturar as nuances das interações da radiação em diferentes regimes energéticos e números atômicos.

Tabela 14 – Coeficientes dos ajustes das seções de choque totais para os materiais de calibração.

Coeficiente	Valor	Coeficiente	Valor
a_L	0,4988	a_H	0,2545
b_L	$2,2090 \times 10^{-4}$	b_H	$4,0779 \times 10^{-13}$
c_L	3,9846	c_H	7,7690

Fonte: O autor (2025).

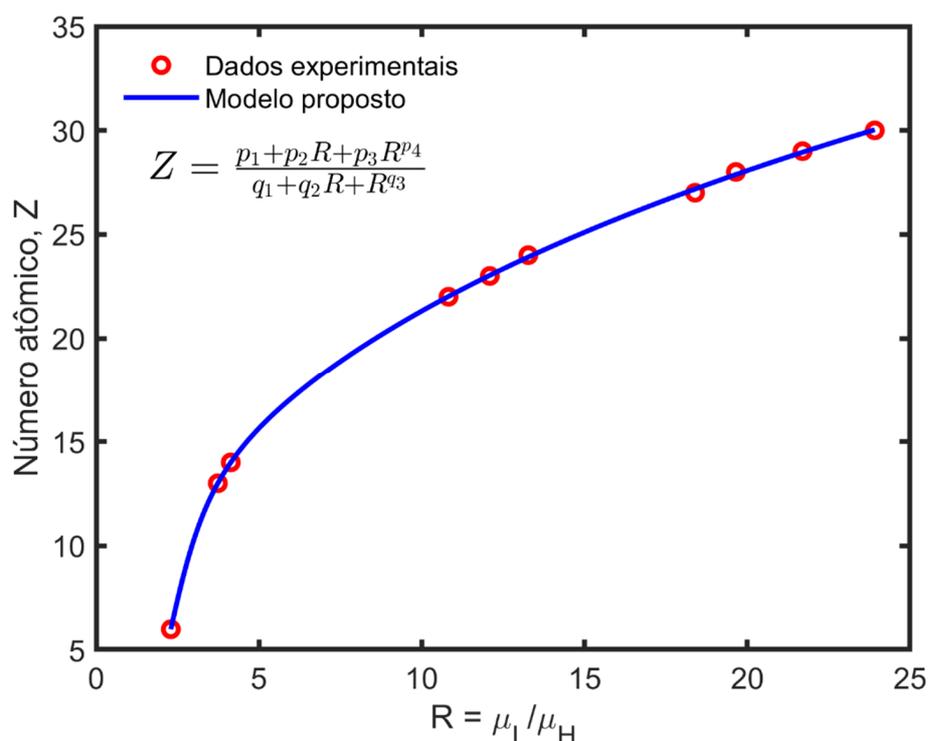
Na Figura 34 temos os pares (R, Z) para os valores de R obtidos experimentalmente, conforme Tabela 13, juntamente com a curva de ajuste ao modelo descrito pela Equação (3.12), realizado utilizando a função *lsqcurvefit* do software MATLAB, cujos coeficientes obtidos estão listados na Tabela 15. Observa-se uma forte correlação entre a razão R e o número atômico Z , indicando a eficácia do método na determinação do número atômico efetivo.

Tabela 15 – Valores dos coeficientes do modelo algébrico (Equação (3.12)) para mensurar o número atômico, utilizando o método de dupla energia de transmissão de raios gama.

Coeficiente	Valor	Coeficiente	Valor
p_1	0,2886	q_1	$1,5536 \times 10^{-2}$
p_2	- 21,6350	q_2	$5,8103 \times 10^{-3}$
p_3	21,6213	q_3	- 4,1174
p_4	1,0028		

Fonte: O autor (2025).

Figura 34 – Ajuste do modelo proposto aos dados experimentais de transmissão gama utilizando o método de dual energia.



Fonte: O autor (2025).

Determinadas as curvas de ajuste aos dados experimentais para os elementos de calibração (C, Al, Si, Ti, V, Cr, Co, Ni, Cu, Zn), podemos utilizar estas curvas juntamente com o Sistema de Equações (3.16), para estimar Z e ρ para as amostras elementares (C, Mg, Al, Fe). Os valores dos números atômicos e das densidades obtidos as amostras de validação podem ser vistos na Tabela 16. Para o carbono, o método apresenta boa precisão no cálculo de Z , mas uma discrepância de 10,04% na densidade, indicando uma limitação para elementos leves. No caso do magnésio e do alumínio, as diferenças são moderadas, com variações de até 5,99% na densidade. O ferro, por outro lado, apresenta uma excelente concordância, com

diferenças de apenas 0,27% em Z e 0,14% na densidade. Estes resultados demonstram a aplicabilidade do método proposto na determinação do número atômico e da densidade, especialmente para elementos de número atômico mais elevado dentro da faixa estudada.

Tabela 16 – Comparação entre o número atômico e densidade calculados com método proposto, para valores de R obtidos experimentalmente, e os valores de referência.

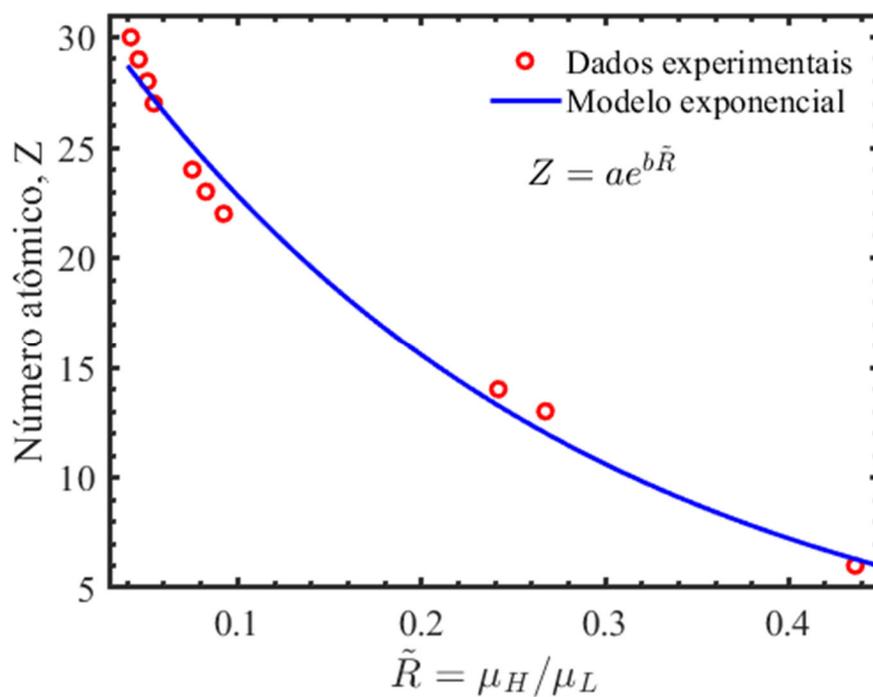
Elemento	R	Z			$\rho(g/cm^3)$		
		Ref.	Predito	ER	Ref.	Predito	ER
C	2,2755	6	5,94	1,00%	1,70	1,87	-10,00%
Mg	3,5355	12	12,37	3,08%	1,74	1,64	5,75%
Al	3,8740	13	13,34	2,62%	2,70	2,63	2,59%
Fe	16,4365	26	26,07	0,27%	7,87	7,89	-0,25%

Fonte: O autor (2025).

4.1.4 Validação e Comparação de Modelos para Cálculo do Número Atômico Efetivo

Nesta subseção, comparamos o desempenho do modelo algébrico com três modelos da literatura, na determinação do número atômico das amostras de validação (C, Mg, Al, Fe). Além do modelo algébrico, analisamos os modelos exponencial, quadrático e racional quadrático utilizados por Yalçin; Reyhancan, (2022), Martini et al., (2021) e Rizescu; Besliu; Jipa, (2001), respectivamente. Na Figura 35 estão os pontos (\tilde{R}, Z) correspondentes aos valores de \tilde{R} obtidos experimentalmente, juntamente com a curva de ajuste ao modelo exponencial.

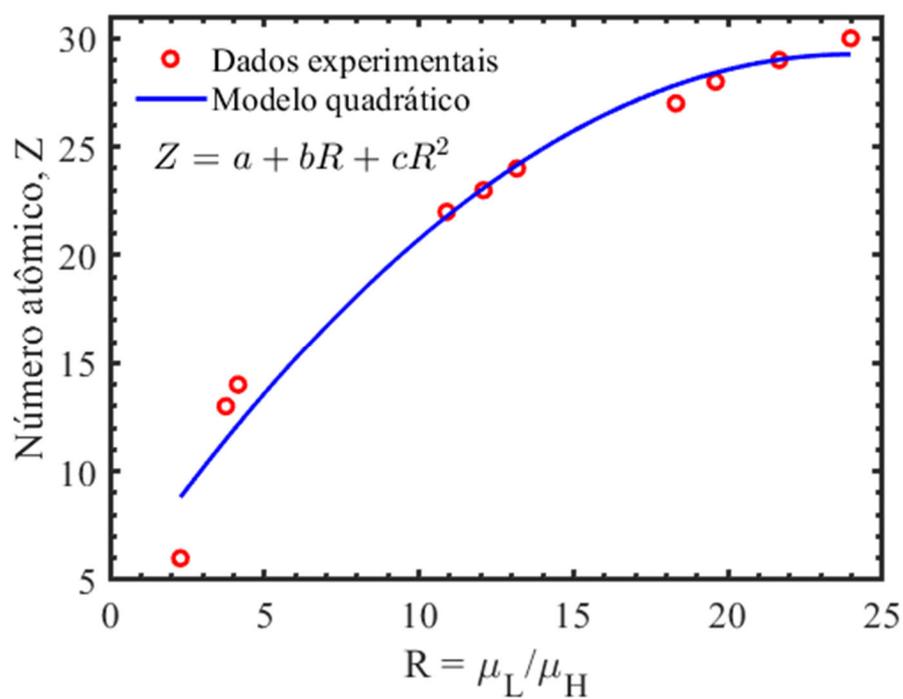
Figura 35 – Modelo exponencial.



Fonte: O autor (2025).

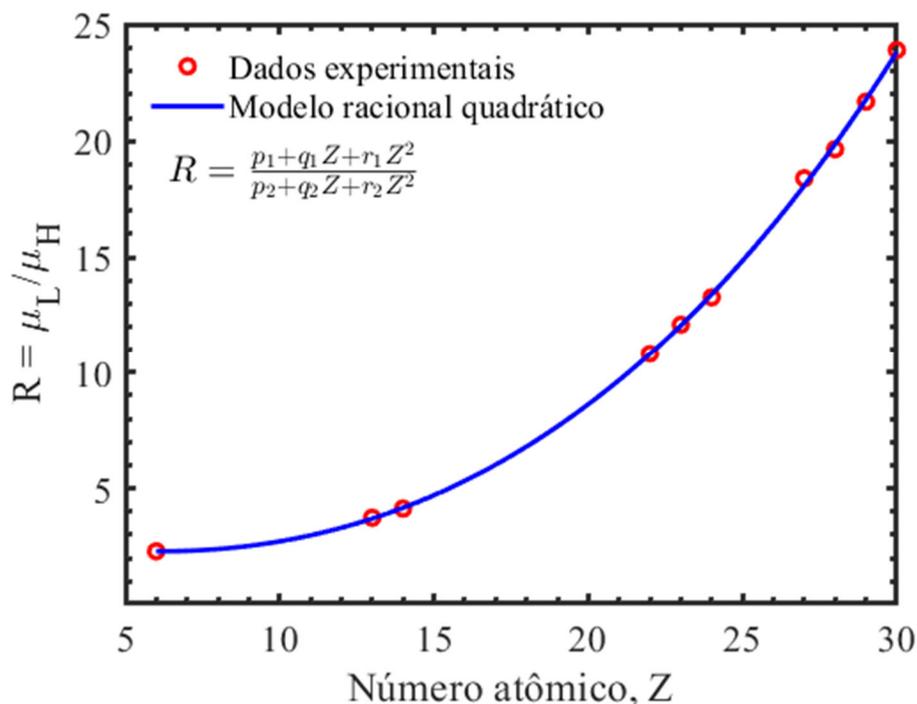
Nas Figuras 36 e 37 temos os pares (R, Z) e (Z, R) para os valores de R obtidos experimentalmente, assim como as curvas de ajuste aos modelos quadrático e racional quadrático, respectivamente.

Figura 36 – Modelo quadrático.



Fonte: O autor (2025).

Figura 37 – Modelo racional quadrático.



Fonte: O autor (2025).

A Tabela 17 apresenta uma comparação entre os valores de referência do número atômico Z e os preditos usando os modelos: algébrico, racional quadrático, exponencial e quadrático. O modelo algébrico proposto demonstra o melhor desempenho, com erros variando de 0,27% a 3,08%, seguido pelo racional quadrático (0,27% a 5,08%) e exponencial (2,00% a 5,75%). O modelo quadrático mostra-se inadequado, especialmente para elementos leves, com erros de até 46,50%.

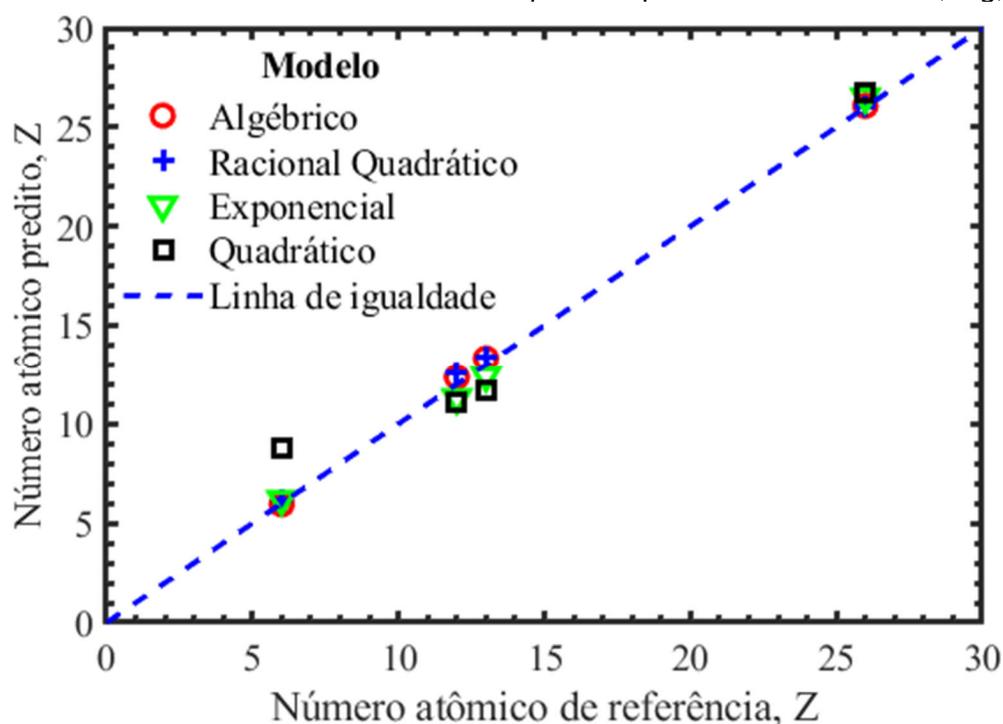
Tabela 17 – Comparação entre números atômicos de referência e preditos por diferentes modelos para amostras de C, Mg, Al e Fe.

Elemento	Z				
	Ref.	Algébrico	Racional Quadrático	Exponencial	Quadrático
C	6	5,94 (1,00%)	6,14 (2,33%)	6,20 (3,33%)	8,79 (46,50%)
Mg	12	12,37 (3,08%)	12,61 (5,08%)	11,31 (5,75%)	11,09 (7,58%)
Al	13	13,34 (2,62%)	13,36 (2,77%)	12,44 (4,31%)	11,68 (10,15%)
Fe	26	26,07 (0,27%)	26,07 (0,27%)	26,52 (2,00%)	26,76 (2,92%)

Fonte: O autor (2025).

Na Figura 38, observa-se o desempenho dos quatro modelos avaliados na predição de números atômicos. O modelo algébrico proposto demonstra excelente concordância com a linha de referência em toda a faixa de números atômicos, indicando alta precisão e consistência. O modelo racional quadrático também apresenta um desempenho muito bom, com predições próximas aos valores de referência ao longo de toda a faixa de números atômicos analisada, exibindo apenas pequenos desvios. O modelo exponencial exibe desvios mais notáveis que os dois primeiros modelos. O modelo quadrático apresenta discrepâncias significativas, particularmente para números atômicos baixos, confirmando sua inadequação para esta aplicação.

Figura 38 – Números atômicos observados e preditos para as amostras de C, Mg, Al e Fe.



Fonte: O autor (2025).

Na Tabela 18 tem-se os valores das métricas R^2 e RMSE, cujos resultados, reforçam a boa adequação dos modelos algébrico e racional quadrático, com o melhor desempenho para modelo algébrico.

Tabela 18 – Métricas para avaliação das previsões do número atômico para os modelos algébrico, racional quadrático, exponencial e quadrático.

	Algébrico	Racional Quadrático	Exponencial	Quadrático
R^2	0,9994	0,9992	0,9964	0,9508
RMSE	0,2517	0,2814	0,6400	2,2327

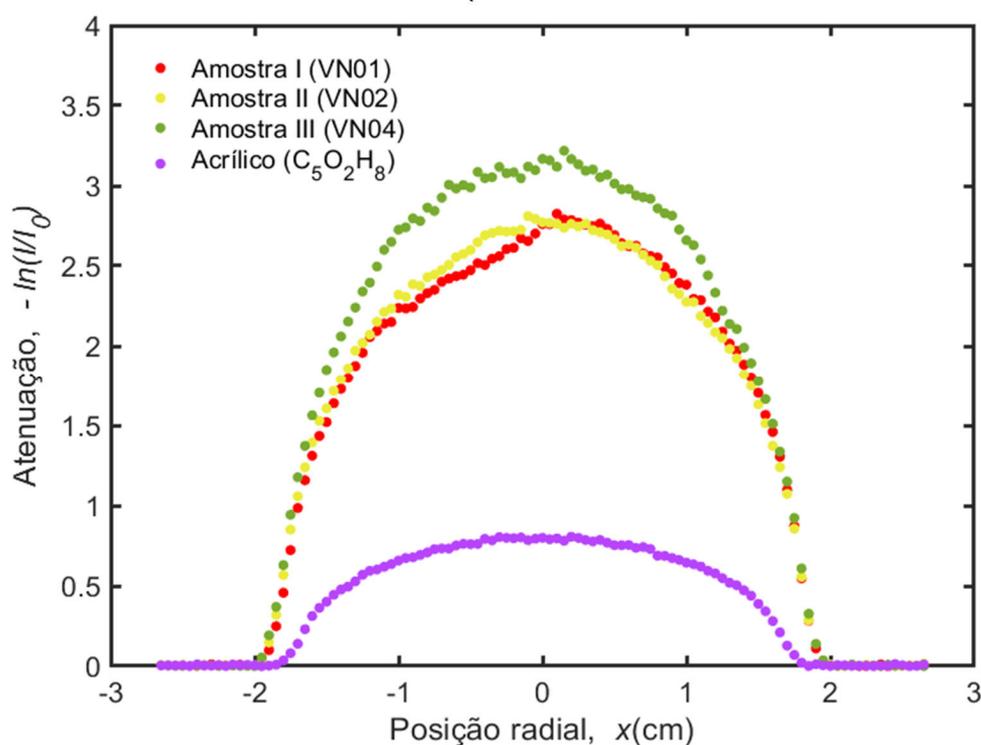
Fonte: O autor (2025).

4.1.5 Avaliação de phantoms e amostras geológicas

4.1.5.1 Perfis de atenuação

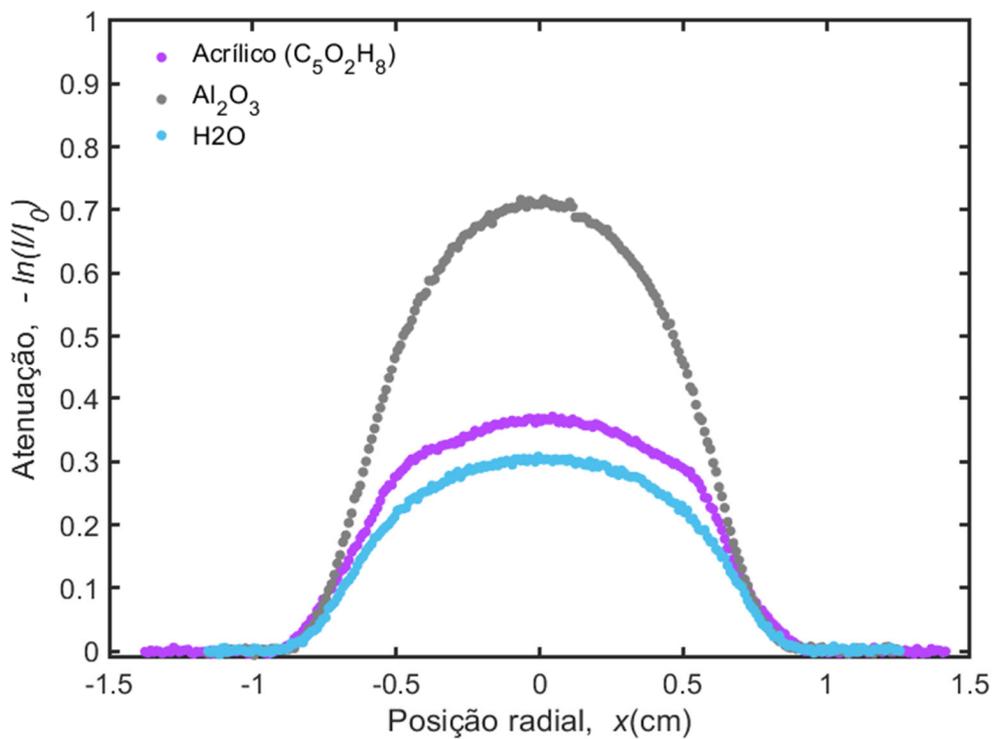
Nesta subseção, são apresentados os perfis de atenuação de raios gama para as fontes monoenergéticas de amerício-241 e césio-137, analisando amostras de rochas e os phantoms de acrílico, óxido de alumínio e água. As Figuras 39 e 40 ilustram a atenuação obtida pela técnica de tomografia de raios gama com a fonte de amerício, enquanto nas Figuras 41 e 42, tem-se as atenuações obtidas com a fonte de césio. A partir das curvas de atenuação, foram calculados os coeficientes de atenuação linear, que estão listados na Tabela 19.

Figura 39 – Atenuação de raios gama obtida com a fonte de amerício para amostras de rocha e um phantom de acrílico.



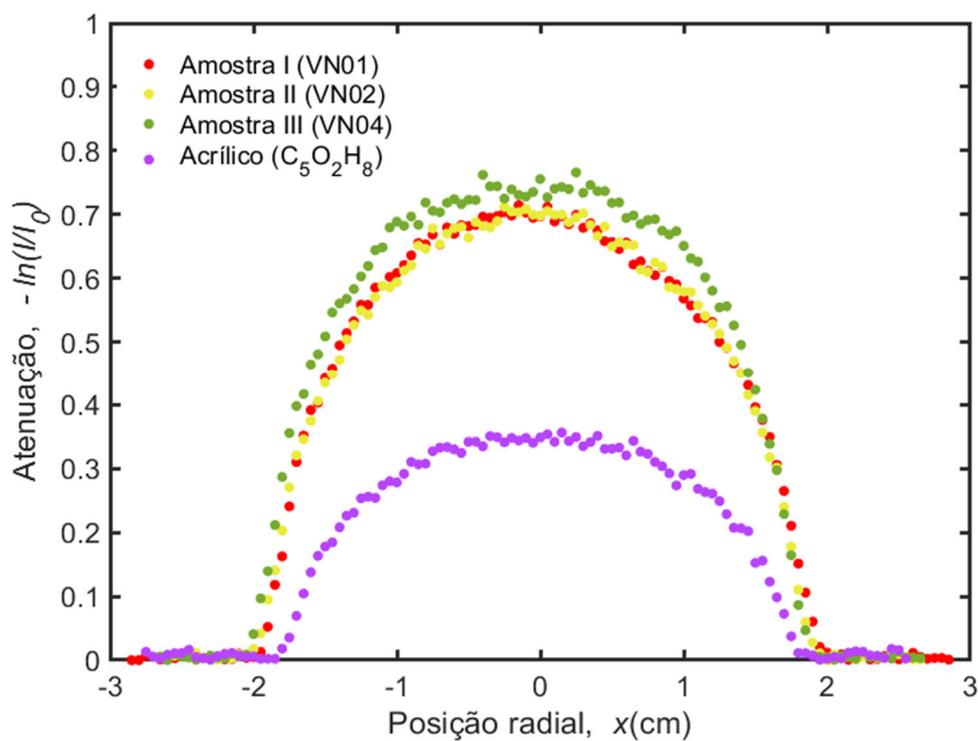
Fonte: O autor (2025).

Figura 40 – Atenuação de raios gama obtida com a fonte de amerício para amostras de água, óxido de alumínio e acrílico.



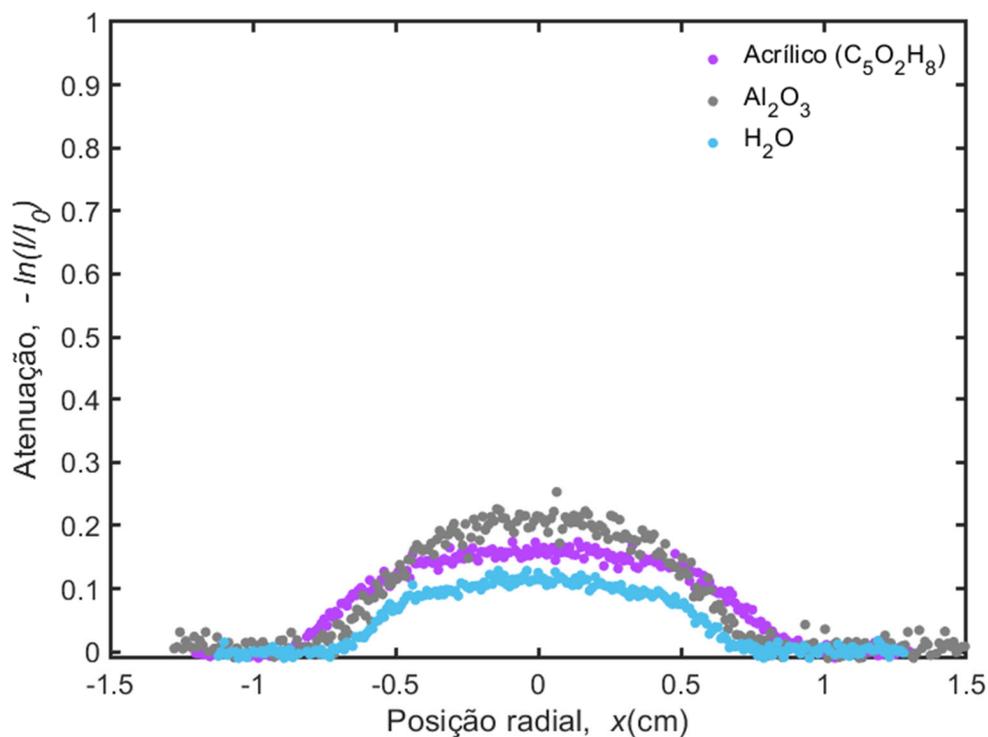
Fonte: O autor (2025).

Figura 41 – Atenuação de raios gama obtida com a fonte de césio para amostras de rocha e um phantom de acrílico.



Fonte: O autor (2025).

Figura 42 – Atenuação de raios gama obtida com a fonte de cézio para amostras de água, óxido de alumínio e acrílico.



Fonte: O autor (2025).

Tabela 19 – Coeficientes de atenuação linear obtidos pela técnica de tomografia gama com o uso das fontes de amerício e cézio.

Amostra	μ (cm^{-1})		R
	$E_L = 59,5$ keV	$E_H = 662$ keV	
I (VN01)	0,7318	0,1900	3,8516
II (VN02)	0,7327	0,1866	3,9266
III (VN04)	0,8338	0,1993	4,1836
Acrílico ($C_5O_2H_8$)	0,2289	0,0983	2,3286
Al_2O_3	0,4886	0,1562	3,1280
H_2O	0,2030	0,0873	2,3468

Fonte: O autor (2025).

4.1.5.2 Obtenção do número atômico efetivo e densidade

Os valores de R são utilizados para determinar o número atômico efetivo (Z_{eff}) dos phantoms e das amostras geológicas, aplicando o ajuste não linear exibido na Figura 34. Para determinar a densidade dos materiais, é necessário resolver o Sistema de Equações (3.16), sendo os valores de a_L, b_L, c_L, a_H, b_H e c_H provenientes dos ajustes das seções de choque exibidas nas Figuras 30 e 31 e o valor do número de massa (A) é calculado utilizando a Equação de Ajuste (3.17), com base no Z_{eff} previamente determinado. Os resultados obtidos para o número atômico efetivo e a densidade estão exibidos na Tabela 20.

Tabela 20 – Comparação dos números atômicos efetivos e das densidades obtidas pela técnica CT- γ de dupla energia com os valores de referência

Amostras	Z_{eff}			ρ (g/cm ³)		
	Ref.	Exp.	ER	Ref.	Exp.	ER
I (VN01)	13,96	13,28	4,87%	2,38	2,50	-5,04%
II (VN02)	13,99	13,47	3,72%	2,31	2,45	-6,06%
III (VN04)	13,94	14,06	0,86%	2,62	2,61	0,38%
Acrílico (C ₅ O ₂ H ₈)	6,60	6,31	4,39%	1,19	1,40	-17,65%
Al ₂ O ₃	11,34	10,85	4,32%	2,01	2,14	-6,47%
H ₂ O	7,54	6,43	14,71%	1,00	1,23	-23,00%

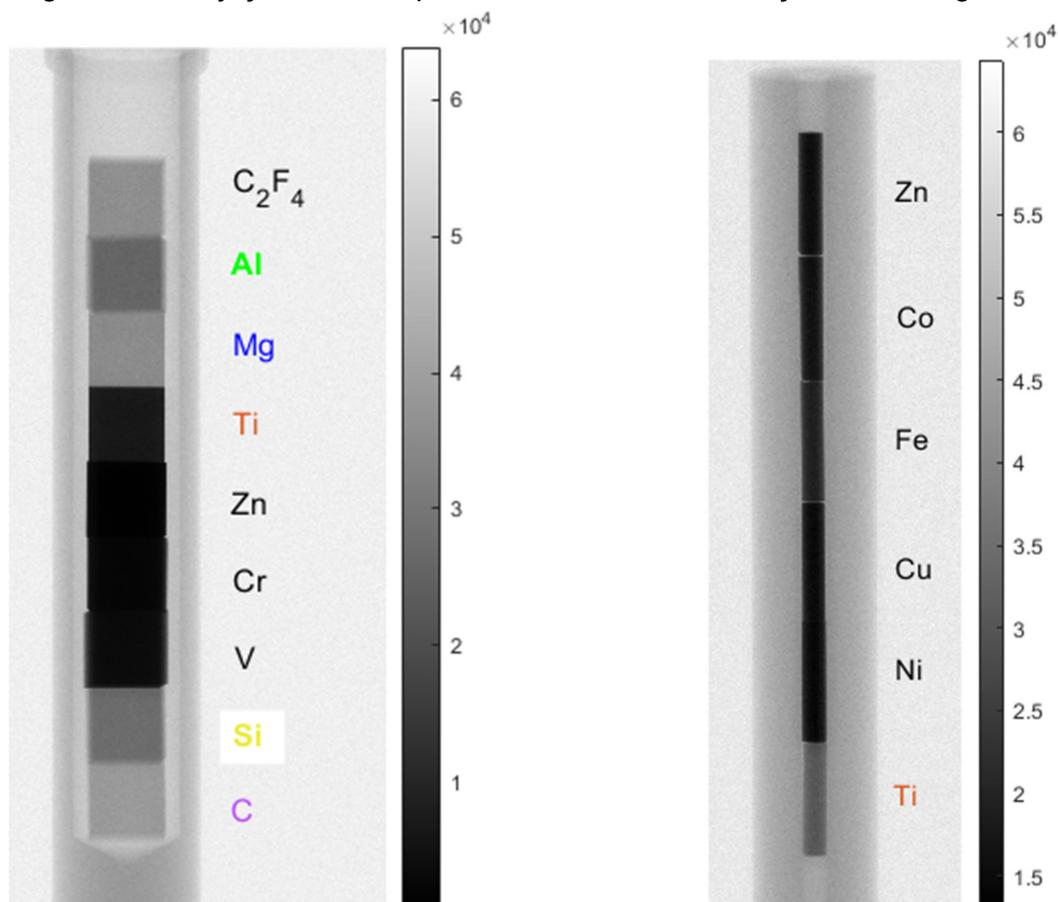
Fonte: O autor (2025).

O modelo utilizado demonstra um bom desempenho na previsão do número atômico efetivo (Z_{eff}), utilizando a razão dos coeficientes de atenuação. Além disso, o modelo para a densidade é eficaz na análise de materiais compostos, especialmente quando a densidade dos materiais está dentro da faixa dos elementos usados para calibração, que varia de 1,70 g/cm³ a 8,96 g/cm³. No entanto, surgem desafios na previsão da densidade de materiais como água e acrílico, onde se observa uma superestimação. Embora esses materiais apresentem números atômicos efetivos dentro da faixa dos materiais de calibração, que varia de 6 a 30, suas densidades não se enquadram na mesma faixa, o que contribui para as discrepâncias observadas.

4.2 PROJEÇÕES POR RAIOS X

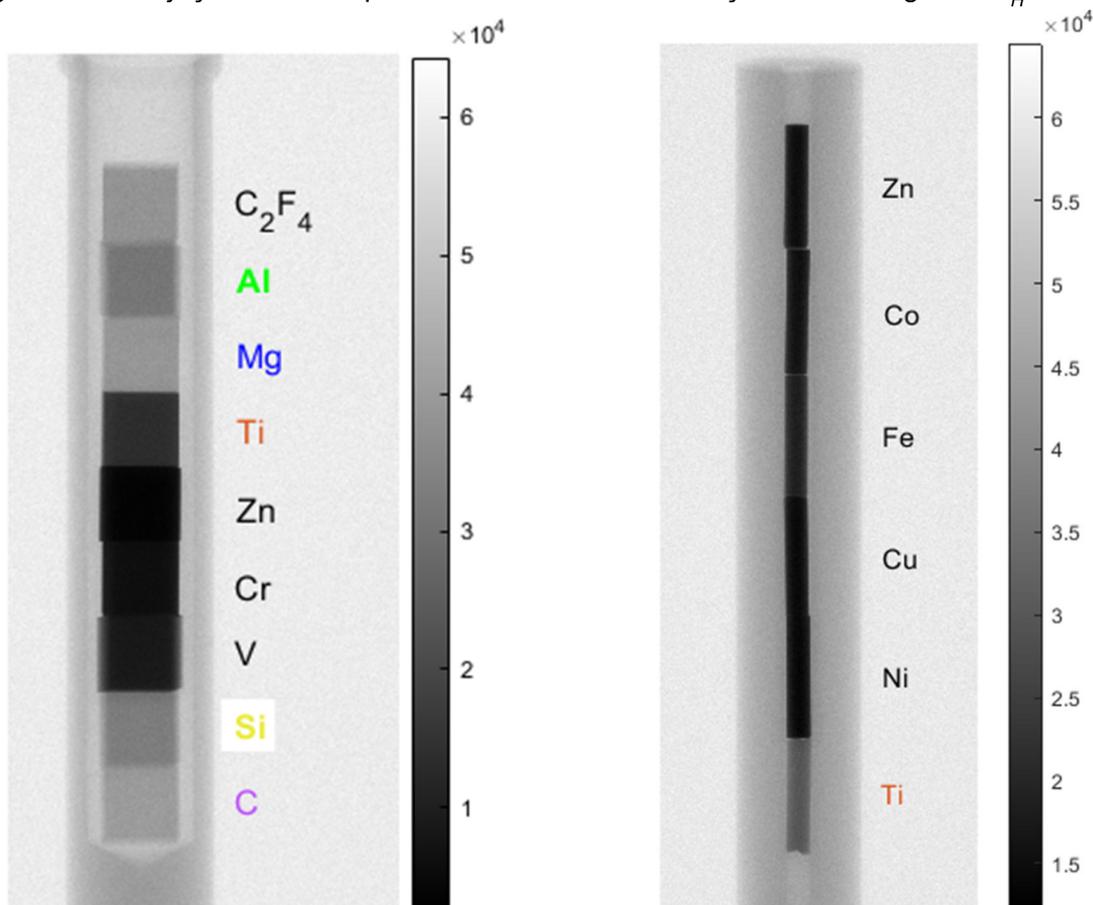
Os dados apresentados nesta seção foram obtidos a partir de projeções adquiridas com o μ TC-RX nas condições especificadas na Tabela 1. As Figuras 43 e 44 mostram projeções das amostras usadas para calibração do método de dupla energia, obtidas com energias de $E_L = 130\text{kV}$ e $E_H = 180\text{kV}$, respectivamente.

Figura 43 – Projeções obtidas para os materiais de calibração com energia de $E_L = 130\text{kV}$.



Fonte: O autor (2025).

Figura 44 – Projeções obtidas para os materiais de calibração com energia de $E_H = 180\text{kV}$.



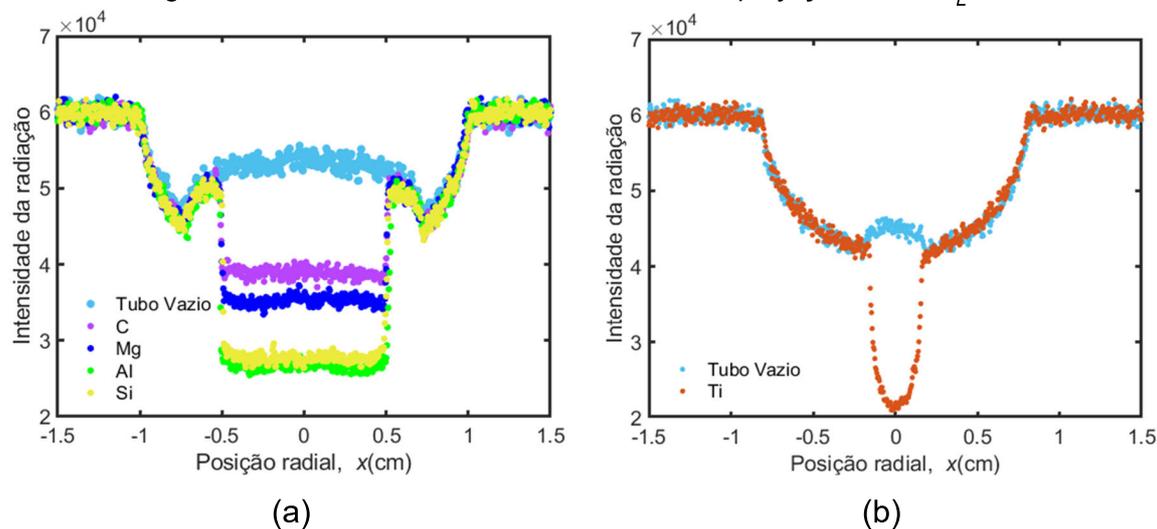
Fonte: O autor (2025).

Nas Figuras 45 e 46 tem-se os perfis da intensidade da radiação obtidos a partir das projeções das amostras de calibração (C, Mg, Al, Si e Ti) e dos tubos vazios com as energias de $E_L = 130\text{kV}$ e $E_H = 180\text{kV}$, respectivamente. As Figuras 47 e 48 apresentam os perfis de atenuação da radiação pelas amostras de calibração para as mesmas energias.

Na calibração foram utilizados apenas materiais elementares. O teflon (C_2F_4), embora presente nas projeções, não foi incluído nas curvas de calibração, sendo analisado a posteriori a partir de tais curvas. Contudo, os cálculos dos coeficientes de atenuação para a energia de 130 kV revelaram resultados insatisfatórios para as amostras de vanádio, cromo, ferro, cobalto, níquel, cobre e zinco. Conseqüentemente, esses elementos foram excluídos da determinação das curvas de calibração para o método algébrico de dupla energia a partir das projeções de raios X. As Figuras 45 a 48 ilustram um único perfil por amostra e por energia

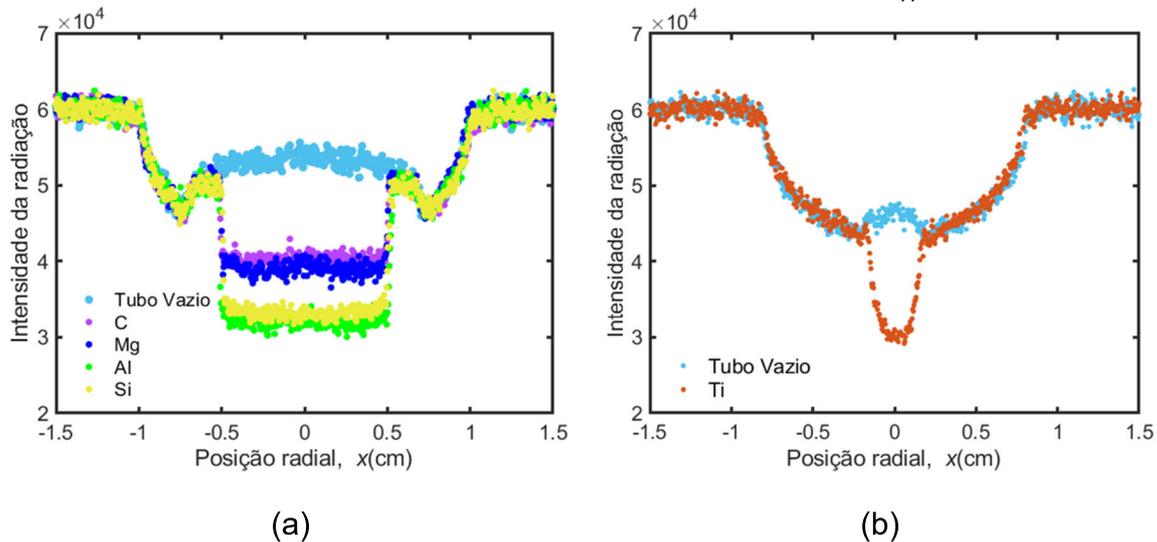
considerada; entretanto, para o cálculo dos coeficientes de atenuação, empregaram-se 100 perfis de cada uma das quatro projeções utilizadas em cada caso.

Figura 45 – Perfis da intensidade obtidos das projeções com $E_L = 130\text{kV}$.

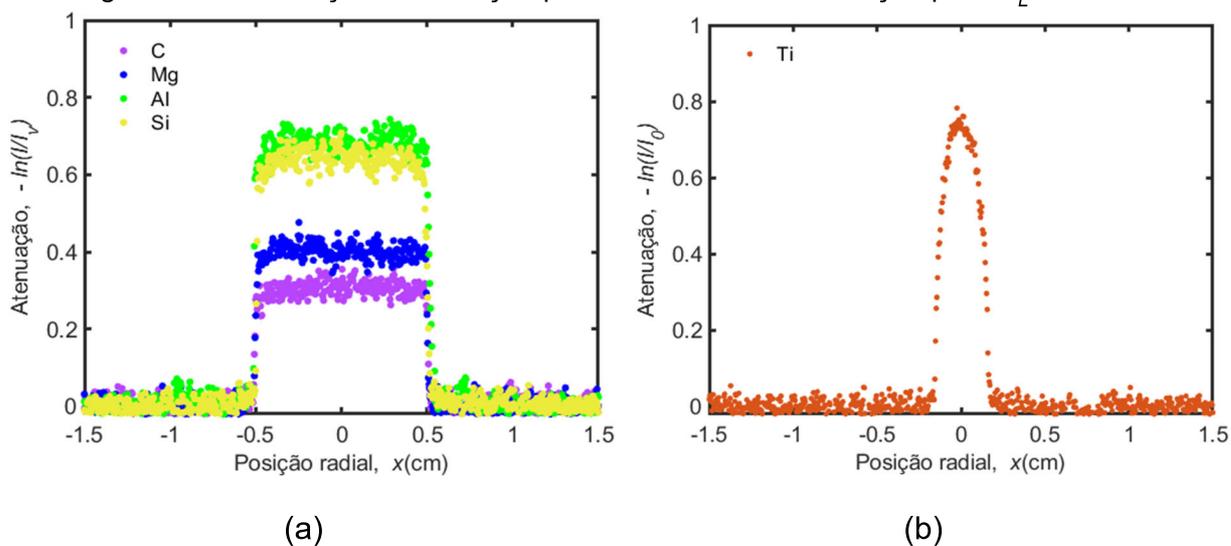


Fonte: O autor (2025).

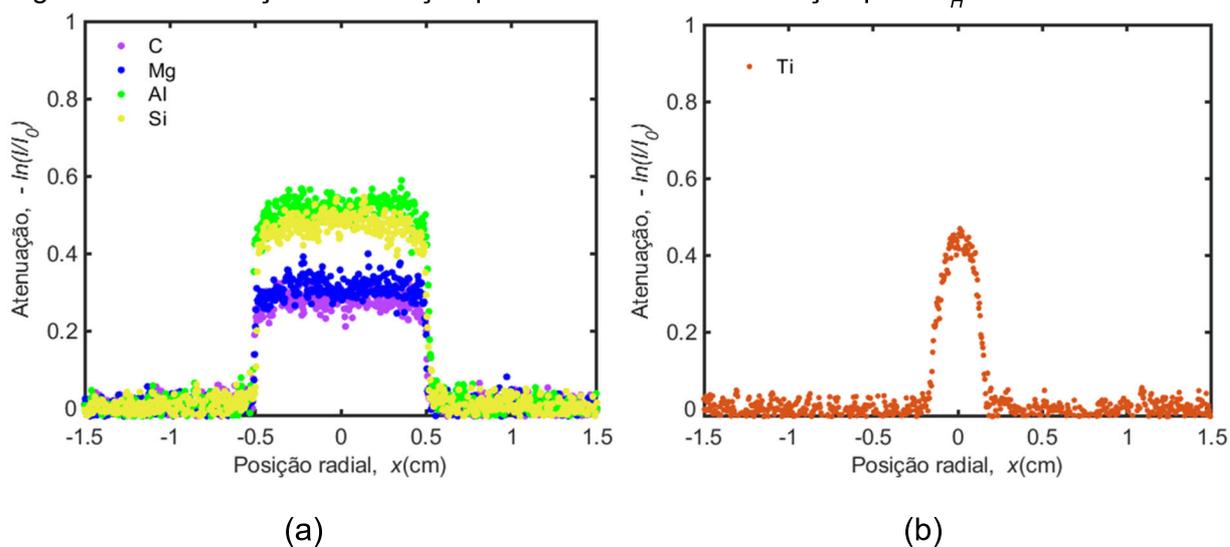
Figura 46 – Perfis da intensidade obtidos das projeções com $E_H = 180\text{kV}$.



Fonte: O autor (2025).

Figura 47 – Atenuação da radiação pelos materiais de calibração para $E_L = 130\text{kV}$ 

Fonte: O autor (2025).

Figura 48 – Atenuação da radiação pelos materiais de calibração para $E_H = 180\text{kV}$.

Fonte: O autor (2025).

4.2.1 Curvas de calibração experimentais

As curvas de ajuste foram desenvolvidas para representar as seções de choque totais em função do número atômico (Figura 49) e para Z em função da razão de atenuação (Figura 50), a partir de experimentos realizados com os elementos: carbono, magnésio, alumínio, silício e titânio. Os coeficientes das curvas de ajustes estão exibidos nas Tabelas 21 e 22. Na Tabela 21 tem-se os coeficientes

obtidos para os ajustes das seções de choque totais e, na Tabela 22 os coeficientes para o ajuste do número atômico.

Figura 49 – Ajuste das seções de choque totais em função do número atômico para as energias $E_L = 130\text{kV}$ e $E_H = 180\text{kV}$.

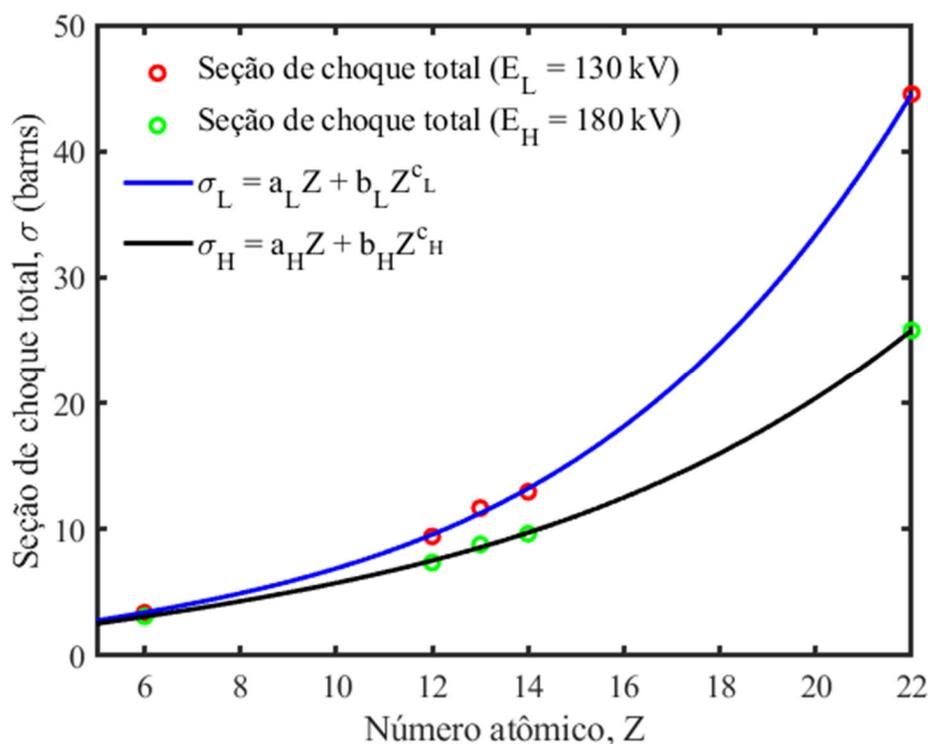
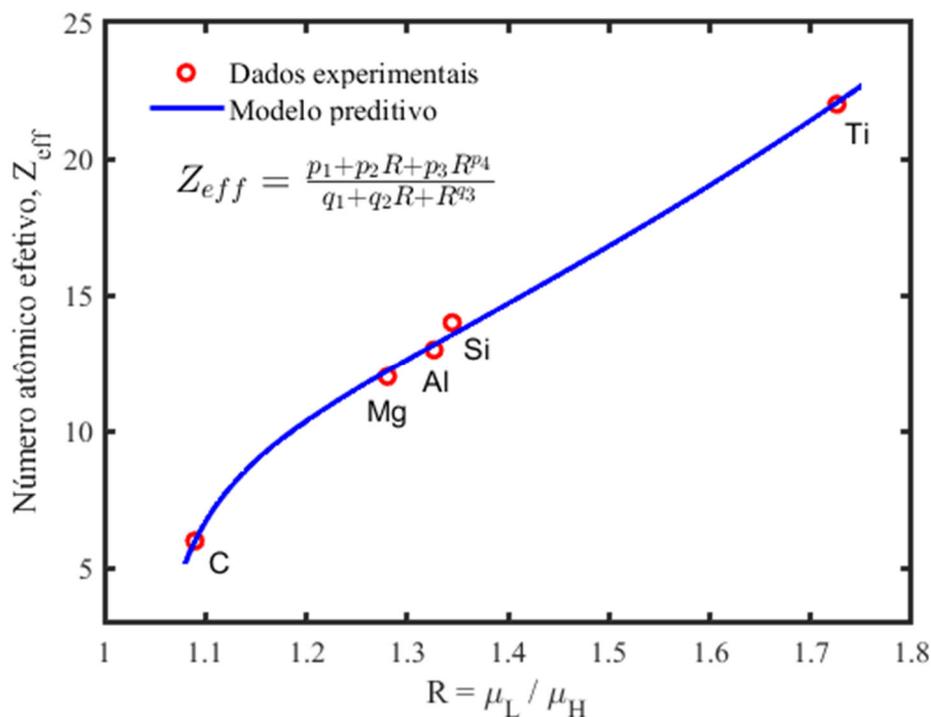


Tabela 21 – Coeficientes dos ajustes das seções de choque totais para os materiais de calibração (C, Mg, Al, Si, Ti) utilizados com o tomógrafo de raios X.

Coeficiente	Valor	Coeficiente	Valor
a_L	0,5339	a_H	0,4948
b_L	$2,2073 \times 10^{-4}$	b_H	$1,6288 \times 10^{-4}$
c_L	3,8526	c_H	3,6961

Fonte: O autor (2025).

Figura 50 – Ajuste do número atômico em função da razão R.



Fonte: O autor (2025).

Tabela 22 – Valores dos coeficientes de ajuste do modelo algébrico para mensurar o número atômico.

Coefficiente	Valor	Coefficiente	Valor
p_1	$-2,1637 \times 10^3$	q_1	$-5,7475 \times 10^2$
p_2	$6,3054 \times 10^2$	q_2	$5,6671 \times 10^2$
p_3	$1,2543 \times 10^3$	q_3	0,3014
p_4	3,8030		

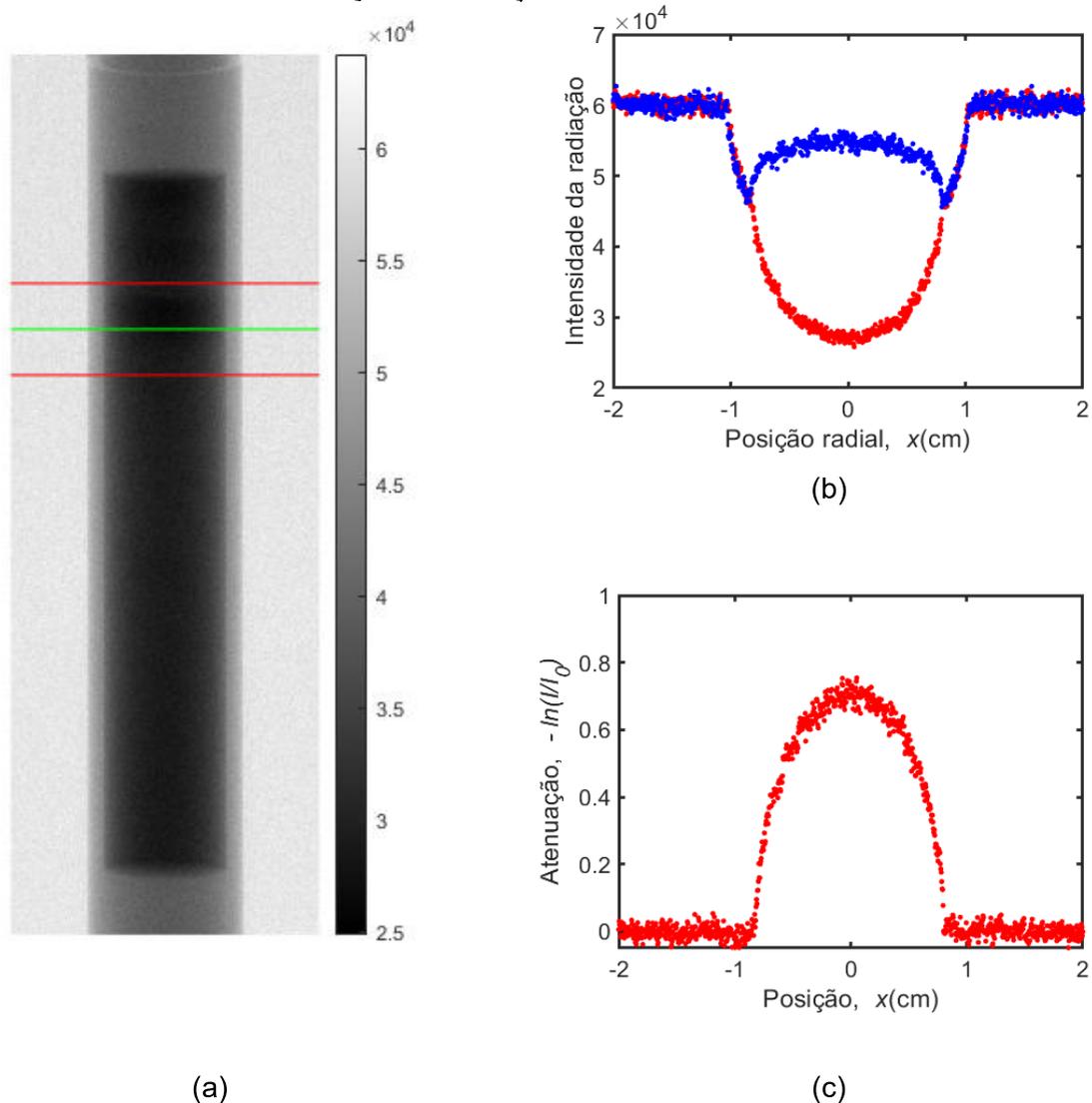
Fonte: O autor (2025)

4.2.2 Avaliação de phantoms e amostras geológicas.

4.2.2.1 Perfis de atenuação

Na Figura 51(a) está indicada a região do tubo contendo Al_2O_3 que foi analisada para determinação do coeficiente de atenuação. Esta região corresponde a 300 linhas da projeção obtidas com a energia de 130 kV. A intensidade da radiação para a linha central (verde) representada na Figura 51(b) juntamente com a intensidade da radiação para uma linha de projeção obtida com o tubo vazio.

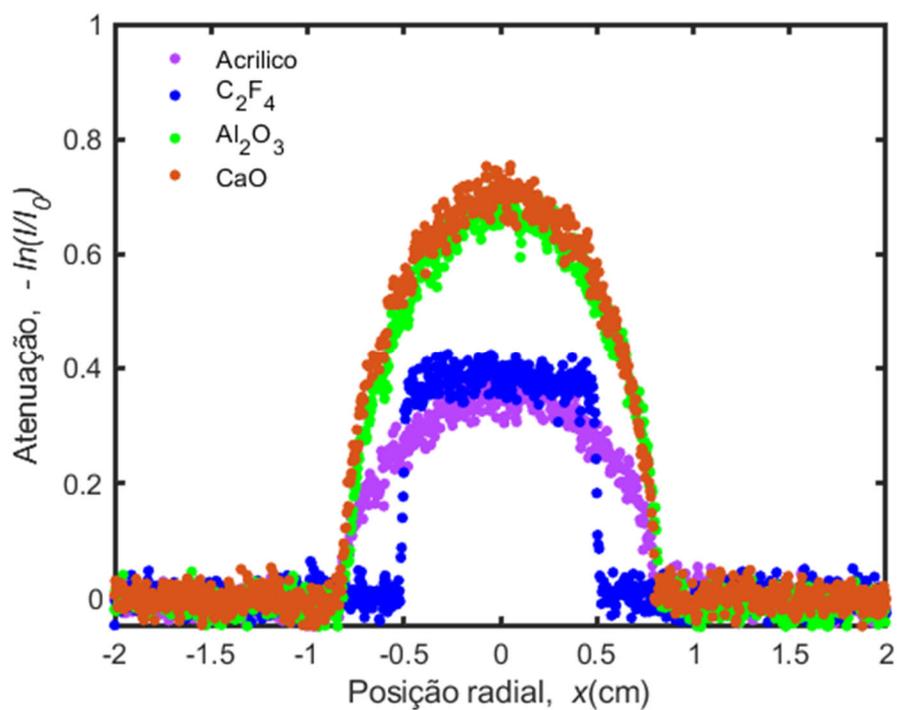
Figura 51 – (a) Projeção de um tubo com óxido de alumínio com 130 kV. (b) Intensidade da radiação que atravessando o tubo vazio (em azul) e o tubo com Al_2O_3 (em vermelho). (c) Atenuação da radiação devido ao Al_2O_3 .



Fonte: O autor (2025).

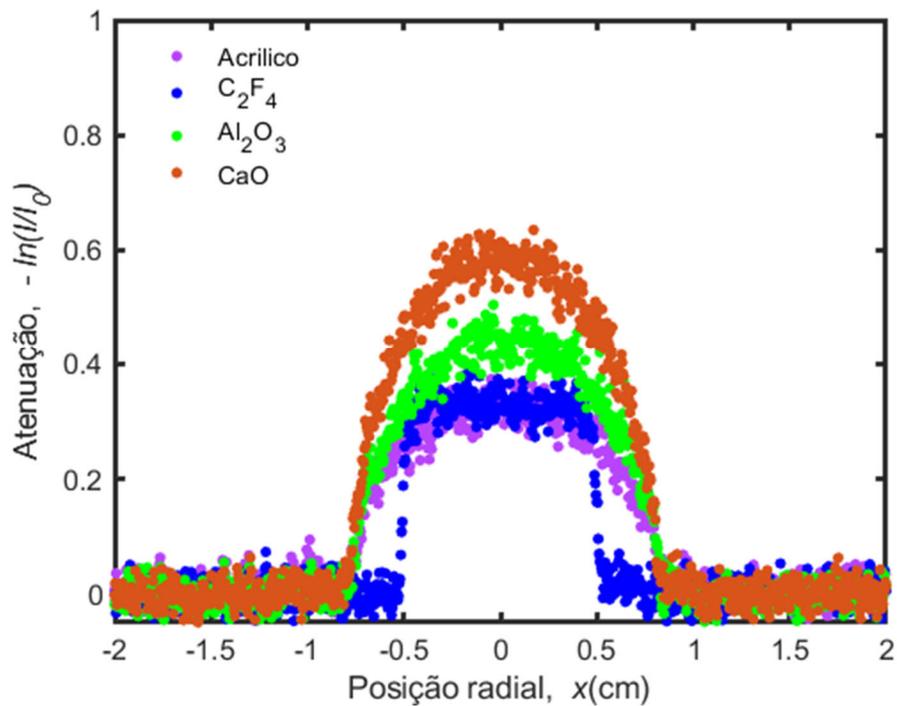
O procedimento realizado com o óxido de alumínio foi repetido para as demais amostras, conforme os gráficos apresentados no Apêndice C. Os perfis de atenuação dos phantoms para as energias de $E_L = 130$ kV e $E_H = 180$ kV são apresentados nas Figuras 52 e 53. De forma análoga aos materiais de calibração, os coeficientes de atenuação para os phantoms e amostras geológicas foram determinados a partir de quatro projeções

Figura 52 – Perfis da atenuação da radiação dos phantoms para a energia de 130kV.



Fonte: O autor (2025).

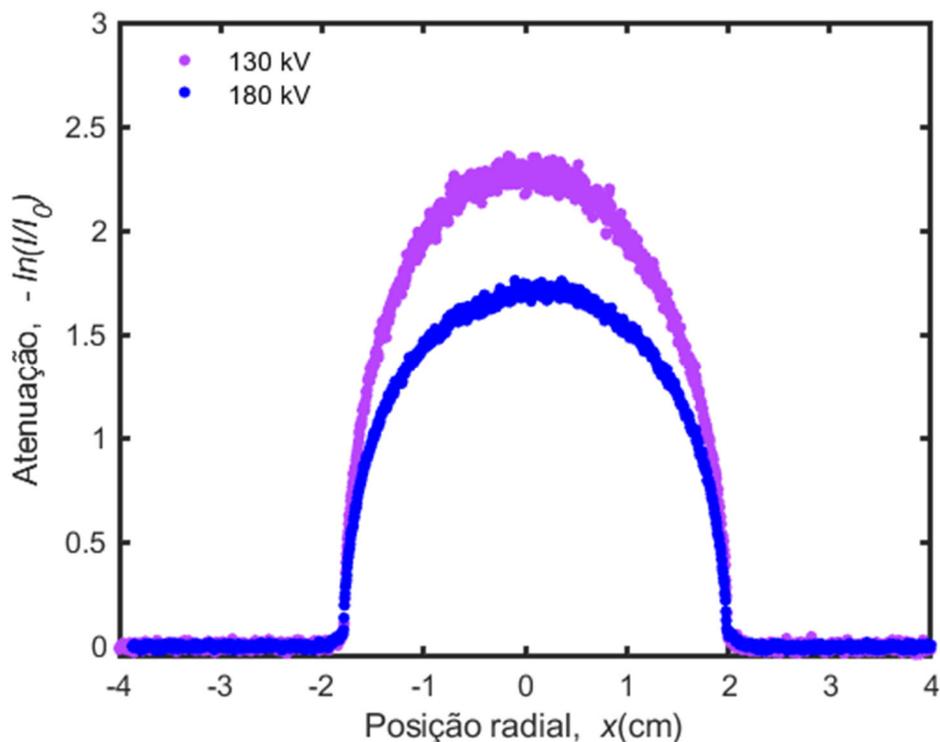
Figura 53 – Perfis da atenuação da radiação dos phantoms para a energia de 180kV.



Fonte: O autor (2025).

Na Figura 54 estão exibidos os perfis de atenuação para a amostra de rocha carbonática VN01 para as energias $E_L = 130\text{kV}$ e $E_H = 180\text{kV}$.

Figura 54 – Perfis da atenuação da radiação da rocha VN01 para as energias de 180kV e 130 kV.



Fonte: O autor (2025).

4.2.2.2 Obtenção do número atômico e densidade

Na Tabela 23 apresentamos os valores dos números atômicos efetivos e das densidades obtidas a partir dos ajustes das Figuras 49 e 50 e do Sistema de Equações (3.16), considerando os coeficientes de atenuação linear obtidos a partir de projeções adquiridas de escaneamentos realizados com 130 kV e 180 kV.

Tabela 23 – Comparação dos números atômicos efetivos e das densidades obtidas pela técnica μ CT de dupla energia com os números atômicos efetivos e as densidades de referência.

Amostras	Z_{eff}			ρ (g/cm ³)		
	Ref.	Exp.	ER(%)	Ref.	Exp.	ER(%)
Acrílico (C ₅ O ₂ H ₈)	6,60	6,94	-5,15%	1,19	1,32	-10,92%
C ₂ F ₄	8,50	8,98	-5,65%	2,20	2,03	7,73%
Al ₂ O ₃	11,34	11,15	1,68%	1,93	1,92	0,52%
I (VN01)	13,96	12,78	8,45%	2,38	2,46	-3,36%
CaO	18,36	16,33	11,06%	1,05	1,20	-14,29%

Fonte: O autor (2025).

Os valores dos números atômicos efetivos e das densidades, apresentados na Tabela 23, foram calculados considerando a média dos coeficientes de atenuação nas regiões analisadas. A tabela compara esses resultados com valores de referência, destacando a eficácia da técnica de μ CT de dupla energia para materiais dentro das faixas de calibração de Z (6 a 22) e ρ (1,7000 a 4,5400 g/cm³). A maior discrepância tanto para o número atômico efetivo quanto para a densidade ocorreu para o CaO, cuja densidade não se encontra dentro da faixa de calibração, destacando a necessidade de garantir que as propriedades dos materiais analisados estejam dentro desses limites para assegurar resultados precisos.

5. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste trabalho, desenvolveu-se uma metodologia para a caracterização de materiais por meio de técnicas de tomografia de dupla energia. Utilizando sistemas de transmissão de raios gama com fontes de amerício e césio, além de microtomografia de raios X, foi possível determinar com precisão o número atômico efetivo e a densidade de diversas amostras.

O modelo proposto, baseado em uma função algébrica para estimar o número atômico efetivo em função da razão de atenuação, foi inicialmente validado utilizando dados do NIST XCom e experimentos realizados com o tomógrafo de transmissão de raios gama, empregando fontes de amerício e césio. Para essa validação, foram utilizados dois conjuntos de materiais: um composto por 10 elementos para a determinação das curvas de calibração, e outro com 4 elementos (grafite, magnésio, alumínio e ferro) para testar as curvas de calibração teóricas e experimentais.

A eficácia do modelo foi evidenciada por meio de comparações com modelos exponencial, racional quadrático e quadrático empregados por outros autores. Utilizando curvas de calibração obtidas a partir de ensaios experimentais com o tomógrafo gama, o método algébrico proposto demonstrou-se eficiente na determinação dos números atômicos e densidades de elementos com número atômico entre 6 e 30, apresentando discrepâncias inferiores a 3,5% para o número atômico e um erro máximo de 10,04% para a densidade dos quatro materiais de teste utilizados. As curvas de calibração obtidas para os métodos exponencial e racional quadrático permitiram determinar o número atômico dos quatro materiais de teste com erro inferior a 6%. Em contraste, o modelo quadrático apresentou erros de até 46,44%, revelando-se inadequado para a identificação dos materiais com os níveis energéticos adotados neste estudo.

Além disso, foram realizados experimentos com phantoms e amostras de rochas carbonáticas utilizando tanto o tomógrafo gama quanto o tomógrafo de raios X, para validar a precisão e a confiabilidade das metodologias propostas. A análise dos phantoms, que incluíram materiais como acrílico e óxido de alumínio, permitiu avaliar a eficácia do método na determinação das propriedades de materiais não elementares. As amostras de rochas, provenientes de afloramentos calcários, foram analisadas para verificar a aplicabilidade do método em contextos geológicos.

Os resultados experimentais destacaram a importância de selecionar adequadamente os materiais de calibração para garantir a precisão dos cálculos de densidade e número atômico. Além disso, a análise de variância e as métricas de regressão utilizadas confirmaram a robustez do modelo algébrico em comparação com outros modelos.

Embora os resultados sejam promissores, o método apresenta limitações, especialmente na determinação da densidade de materiais com baixo número atômico. Esses desafios abrem caminho para refinamentos futuros, que podem incluir ajustes nos modelos matemáticos para ampliar a precisão e a aplicabilidade da metodologia.

REFERÊNCIAS

- ABBASI, S.; MOHAMMADZADEH, M.; ZAMZAMIAN, M. A novel dual high-energy X-ray imaging method for materials discrimination. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, A**, 2019. v. 930, p. 82–86.
- AKKURT, I. *et al.* Medical radiation shielding in terms of effective atomic numbers and electron densities of some glasses. **Radiation Physics and Chemistry**, 2023. v. 206.
- ALI, M. S. *et al.* Optimizing gamma-ray shielding for boron neutron capture therapy by using unglazed ceramic composites. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, B**, 2024. v. 554.
- ALSAAB, A. H.; ZEGHIB, S. Analysis of X-ray and gamma ray shielding performance of prepared polymer micro-composites. **Journal of Radiation Research and Applied Sciences**, 2023. v. 16.
- ALVAREZ, Robert E; MACOVSKI, Albert. Energy-selective reconstructions in X-ray computerised tomography. **Physics in Medicine & Biology** **PHYS. MED. BIOL.**, 1976. v. 21, n. 5, p. 733–744.
- ALVES, H. *et al.* Mineralogy evaluation and segmentation using dual-energy microtomography. **X-Ray Spectrometry**, 2015.
- ALVES, H.; LIMA, I.; LOPES, R. T. Methodology for attainment of density and effective atomic number through dual energy technique using microtomographic images. **Applied Radiation and Isotopes**, 2014. v. 89, p. 6–12.
- ATTIX, F. H. **Introduction to Radiological Physics and Radiation Dosimetry**. New York: John Wiley & Sons, Inc, 1986.
- AZEVEDO, S. G. *et al.* System-Independent Characterization of Materials Using Dual-Energy Computed Tomography. **IEEE Transactions on Nuclear Science**, 2016. v. 63, p. 341–350.
- BERGER, M. J. *et al.* XCOM: Photon Cross Sections Database -NIST Standard Reference Database 8 (XGAM). **NBSIR**, 2010.
- BONNIN, A. *et al.* Concept of effective atomic number and effective mass density in dual-energy X-ray computed tomography. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, B**, 2014. v. 318, p. 223–231.
- BRODY, William R. *et al.* A method for selective tissue and bone visualization using dual energy scanned projection radiography. **Med. Phys.**, 1981. v. 8, p. 353–357.
- CARVALHO, W. Da S. **Tomografia Computadorizada de Raios X e Gama Aplicada a Caracterização do Meio Poroso de Rochas Reservatórios de Petróleo**. Recife: UFPE, 2023.

CURRY III, T. S.; DOWDEY, J. E.; MURRY, R. C. **Christensen's Physics of Diagnostic Radiology**. 4th. ed. [S.l.]: Williams & Wilkins, 1990.

DANTAS, Carlos Costa *et al.* Data Evaluation and Visibility in Single Beam Scanner of Gamma Ray Tomography. **World Journal of Nuclear Science and Technology**, 2013. v. 03, p. 22–27.

DEVORE, J. L. **Probabilidade e estatística**. Trad. de Joaquim Pinheiro Da Silva. Sexta edição ed. São Paulo: Pioneira Thomson Learning, 2006.

EVANS, R. D. **The Atomic Nucleus**. 3. ed. New Delhi: McGraw-Hill, 1955.

FONSECA, A. C. G. *et al.* Precise determination of soil structure parameters in a X-ray and γ -ray CT combination methodology. **Progress in Nuclear Energy**, 2019. v. 114, p. 138–144.

FONSECA, A. C. G. DA. **Aplicação das Tomografias Computadorizadas de Raios-X e Gama na Análise de Solo Simulado**. Recife: UFPE, 2017.

GARBA, N. N. *et al.* Investigation of natural radionuclides and radiation shielding potential of some commonly used building materials in Northwestern Nigeria. **Scientific Reports**, 2024. v. 14.

GEET, M. Van; SWENNEN, R.; WEVERS, M. Quantitative analysis of reservoir rocks by microfocus X-ray computerised tomography. **Sedimentary Geology**, 2000. v. 132, p. 25–36. Disponível em: <www.elsevier.nl/locate/sedgeo>.

GHAEBI, M.; TAJIK, M.; AZIMIRAD, R. Investigating four algorithms for material discrimination in a simulated dual-energy radiography system. **Applied Radiation and Isotopes**, 2023. v. 199.

GOUDA, M. M. *et al.* Gamma-ray attenuation parameters of HDPE filled with different nano-size and Bulk WO₃. **Applied Radiation and Isotopes**, 2023. v. 197.

GÜNOĞLU, K.; AKKURT, I.; SAYYED, M. I. Radiation shielding properties of some igneous rocks in isparta province at different gamma energies: Experimental and theoretical study. **Journal of Radiation Research and Applied Sciences**, 2024. v. 17.

HAMPEL, U. X-ray computed tomography. *Em*: WANG, M. (Org.). **Industrial Tomography: Systems and Applications**. [S.l.]: Woodhead Publishing, 2015, p. 175–195.

HENRIKSEN, T.; MAILLIE, H. D. **Radiation and Health**. London: Taylor & Francis, 2003.

HERNANDEZ-MURILLO, C. G. *et al.* Characteristics, as a shield against ionizing photons, of concrete blocks used in the construction industry. **Applied Radiation and Isotopes**, 2022. v. 187.

HSIEH, J. **Computed Tomography: Principles, Design, Artifacts, and Recent Advances**. 2. ed. Bellingham: SPIE PRESS, 2009.

IOVEA, M. *et al.* Dual-energy X-ray computer axial tomography and digital radiography investigation of cores and other objects of geological interest. **Engineering Geology**, 2009. v. 103, p. 119–126.

JUSSIANI, E. I.; APPOLONI, C. R. Effective atomic number and density determination of rocks by X-ray microtomography. **Micron**, 2015. v. 70, p. 1–6.

KAPLAN, I. **Física Nuclear**. Trad. de José Goldemberg. 2. ed. Rio de Janeiro: Guanabara Dois, 1978.

KHAN, F. M. . **The physics of radiation therapy**. 3. ed. Philadelphia: Lippincott Williams & Wilkins, 2003.

LEHMANN, L. A. *et al.* Generalized image combinations in dual KVP digital radiography. **Med. Phys.**, 1981.

LIMA, M. G.; JUSSIANI, E. I. X-ray computed tomography for effective atomic number and density evaluation: A review. **Radiation Physics and Chemistry**, 2024. v. 225.

LIU, L. P. *et al.* Non-invasive mass and temperature quantifications with spectral CT. **Scientific Reports**, 2023. v. 13.

LIU, T.; HONG, G.; CAI, W. A comparative study of effective atomic number calculations for dual-energy CT. **Medical Physics**, 2021. p. 1–16.

MAGALHÃES, M. N.; LIMA, A. C. P. De. **Noções de Probabilidade e Estatística**. 5. ed. São Paulo: Editora da Universidade de São Paulo, 2002.

MARRERO, J. A. A reliable Givens-LU approach for solving opposite-bordered tridiagonal linear systems. **Computers and Mathematics with Applications**, 2018. v. 76, p. 2409–2420.

MARRERO, J. A. A numerical solver for general bordered tridiagonal matrix equations. **Computers and Mathematics with Applications**, 2016. v. 72, p. 2731–2740.

MARTINI, M. *et al.* Identification of Common Minerals Using Stoichiometric Calibration Method for Dual-Energy CT. **Geochemistry, Geophysics, Geosystems**, 2021. v. 22.

MAYNEORD, W. V. The significance of the roentgen. **Acta of the International Union against Cancer**, 1937. v. 2, p. 271–282.

MOSELEY, H. G. J. High-Frequency Spectra of the Elements. **Phil. Mag.**, 1913. v. 26, p. 1024–1034.

MOSHKBAR-BAKSHAYESH, K.; AFARIDEH, H.; AZIMIRAD, Rouhollah. Inspection of cargo using dual-energy X-ray radiography: A review. **Radiation Physics and Chemistry**, 2023. v. 212.

MURTY, R. C. Effective atomic numbers of heterogeneous materials. **Nature**, jul. 1965. v. 207, p. 398–399.

NOVA, A. A. V. **Quantificação da Porosidade em Rochas Calcárias por Meio de Tomografia Computadorizada de Raios X e de Raios Gama**. Recife: UFPE, 2020.

PEIXOTO, P. H. R. **Desenvolvimento de um modelo computacional para avaliações dosimétricas em ratos**. Recife: UFPE, 2008.

PRABHU, S. *et al.* A simple software for swift computation of photon and charged particle interaction parameters: PAGEX. **Applied Radiation and Isotopes**, 2021. v. 176.

RAPOSO, F. Evaluation of analytical calibration based on least-squares linear regression for instrumental techniques: A tutorial review. **Trends in Analytical Chemistry**, 2016. v. 77, p. 167–185.

RIZESCU, C.; BESLIU, C.; JIPA, A. Determination of local density and effective atomic number by the dual-energy computerized tomography method with the ¹⁹²Ir radioisotope. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A**, 2001. v. 465, p. 584–599.

RUTHERFORD, R. A.; PULLAN, B. R.; ISHERWOOD, I. Measurement of Effective Atomic Number and Electron Density Using an EMI Scanner. **Neuroradiology**, 1976. v. 11, p. 15–21.

SIM, S. *et al.* Incorporation of copper slag in cement brick production as a radiation shielding material. **Applied Radiation and Isotopes**, 2021. v. 176.

TAUHATA, L. *et al.* **Radioproteção e Dosimetria: Fundamentos**. Rio de Janeiro: IRD/CNEN, 2013.

TAYLOR, M. L. *et al.* The effective atomic number of dosimetric gels. **Australasian Physical & Engineering Sciences in Medicine**, 2008. v. 31.

TELES, A. P.; LIMA, I.; LOPES, R. T. Rock porosity quantification by dual-energy X-ray computed microtomography. **Micron**, 2016. v. 83, p. 72–78.

TURNER, J. E. **Atoms, Radiation, and Radiation Protection**. 3. ed. Weinheim: WILEY-VCH, 2007.

TURTURICA, G. V. *et al.* Effective Z evaluation using monoenergetic gamma rays and neural networks. **European Physical Journal Plus**, 2020. v. 140.

YALÇIN, O.; REYHANCAN, İ. A. Detection of explosive materials in dual-energy X-Ray security systems. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, A**, 2022. v. 1040.

YAVUZKANAT, N.; ŞAHMARAN, T.; SARAÇ, K. Chemical and physical analysis of synthesized coumarin compounds: Investigating responses to gamma and neutron radiations. **Radiation Physics and Chemistry**, 2024. v. 221.

ZHAN, S.; CHONG, A. Data requirements and performance evaluation of model predictive control in buildings: A modeling perspective. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, 2021. v. 142.

ZHANG, L.; YANGDAI, T. Determination of liquid's molecular interference function based on X-ray diffraction and dual-energy CT in security screening. **Applied Radiation and Isotopes**, 2016. v. 114, p. 179–187.

ZUBER, S. H. *et al.* Characterization of soy-lignin bonded Rhizophora spp. particleboard as substitute phantom material for radiation dosimetric studies – Investigation of CT number, mass attenuation coefficient and effective atomic number. **Applied Radiation and Isotopes**, 2021. v. 170.

APÊNDICE A – ARGUMENTOS DE ENTRADA E SAÍDA PARA A FUNÇÃO *LSQCURVEFIT*

Considerando a sintaxe para a função *lsqcurvefit*.

$$[x, resnorm, residual, exitflag, output] = lsqcurvefit(fun, x0, xdata, ydata, lb, ub, options)$$

temos os seguintes argumentos de entrada:

- Função do Modelo (*fun*): É a função que define o modelo matemático a ser ajustado aos dados. Esta função deve ser escrita de forma que receba os parâmetros do modelo e os dados de entrada, retornando os valores calculados pelo modelo.
- Estimativas Iniciais (*x0*): Um vetor que contém os valores iniciais dos parâmetros que serão ajustados. Estes valores são utilizados como ponto de partida para o algoritmo de otimização.
- Dados Independentes (*xdata*): O conjunto de dados que representa as variáveis independentes do modelo. Estes dados são passados para a função do modelo para calcular os valores previstos.
- Dados Dependentes (*ydata*): O conjunto de dados que representa as variáveis dependentes, ou seja, os valores observados que você deseja ajustar ao modelo.
- Limites Inferiores e Superiores (*lb, ub*): (Opcional) Vetores que especificam os limites inferiores e superiores para os parâmetros do modelo. Isso é útil para restringir a busca de parâmetros dentro de um intervalo fisicamente significativo. Se não especificados, assumem -inf e inf, respectivamente.
- Options (opcional): Uma estrutura de opções criada com *optimoptions* para controlar o algoritmo de otimização.

A seguir estão os argumentos de Saída para a função *lsqcurvefit*

- *x*: É um vetor que contém os coeficientes estimados que melhor ajustam o modelo aos dados.

- *resnorm*: É a norma residual ao quadrado, uma medida de quão bem o modelo ajustado se encaixa nos dados. Quanto menor o valor de *resnorm*, melhor o ajuste. Matematicamente, é a soma dos quadrados das diferenças entre os valores y dos dados (*ydata*) e os valores y previstos pelo modelo ajustado.
- *residual*: Vetor que contém os resíduos no ponto da solução. Os resíduos são as diferenças entre os valores y dos dados (*ydata*) e os valores y previstos pelo modelo ajustado.
- *exitflag*: Valor inteiro que descreve a condição de saída do algoritmo de otimização. Valores positivos indicam que o algoritmo convergiu para uma solução. Valores negativos indicam que o algoritmo não convergiu. Um valor de 0 geralmente indica que o número máximo de iterações ou avaliações de função foi atingido.
- *exitflag*: Código que indica o motivo pelo qual a função de ajuste foi interrompida (por exemplo, convergência ou número máximo de iterações).
- *output*: é uma estrutura que contém informações sobre o processo de otimização. Alguns campos comuns em *output* incluem:
 - ✓ *iterations*: O número de iterações realizadas.
 - ✓ *funcCount*: O número de avaliações da função objetivo.
 - ✓ *algorithm*: O algoritmo de otimização usado.
 - ✓ *message*: Uma mensagem descrevendo a condição de saída do algoritmo.

APÊNDICE B – COEFICIENTES DE ATENUAÇÃO DE MASSA DOS MATERIAIS DE CALIBRAÇÃO OBTIDOS COM O TOMÓGRAFO DE RAIOS GAMA

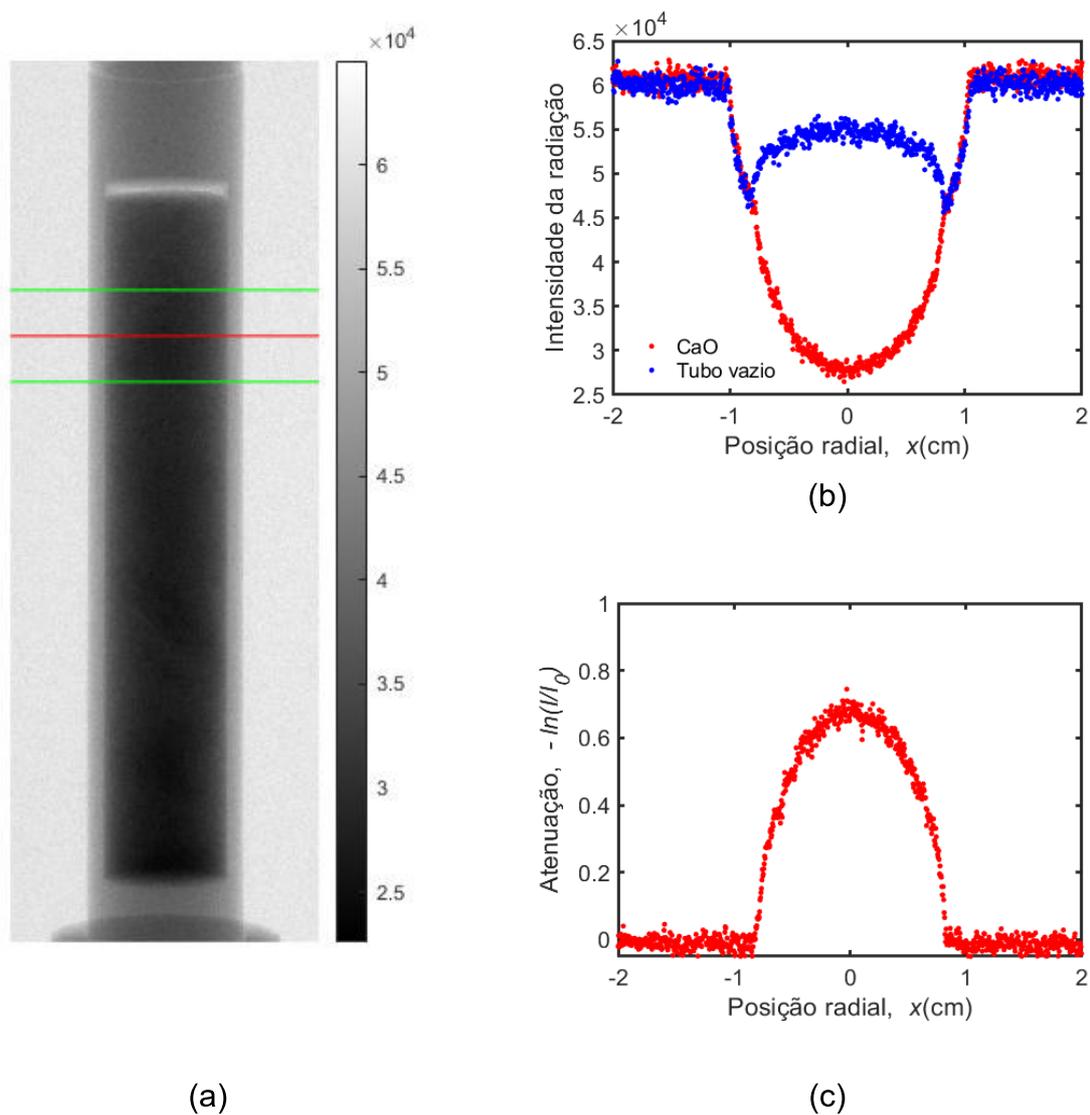
Tabela B1 – Coeficientes de atenuação de massa para os materiais de calibração, obtidos com o TC de raios gama para $E_L = 59,5$ keV e $E_H = 662$ keV.

Item	Amostra	$(\mu/\rho)_L$ (cm^2/g)	$(\mu/\rho)_H$ (cm^2/g)	$R = \frac{(\mu/\rho)_L}{(\mu/\rho)_H}$
1	Carbono	0,175470	0,076847	2,2834
2	Alumínio	0,281712	0,075084	3,7520
3	Silício	0,315615	0,076091	4,1479
4	Titânio	0,753638	0,069162	10,8967
5	Vanádio	0,848165	0,070160	12,0890
6	Cromo	0,939539	0,071353	13,1675
7	Cobalto	1,277625	0,069769	18,3122
8	Níquel	1,482648	0,075654	19,5977
9	Cobre	1,512965	0,069865	21,6555
10	Zinco	1,716389	0,071618	23,9659

Fonte: O autor (2025).

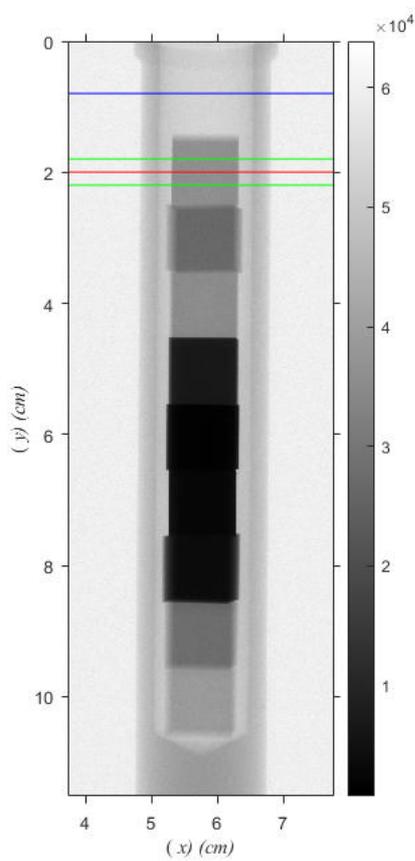
APÊNDICE C – PROJEÇÕES OBTIDAS COM O μ TC DE RAIOS X

Figura C1: (a) Projeção do tubo contendo óxido de cálcio com 130 kV. (b) Intensidade da radiação que atravessando o tubo vazio (em azul) e o tubo com CaO (em vermelho). (c) Atenuação da radiação devido ao CaO.

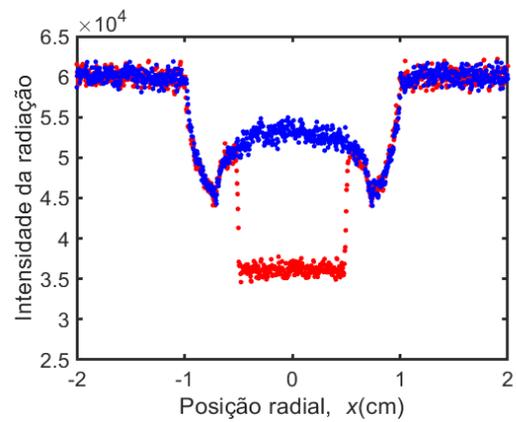


Fonte: O autor (2025).

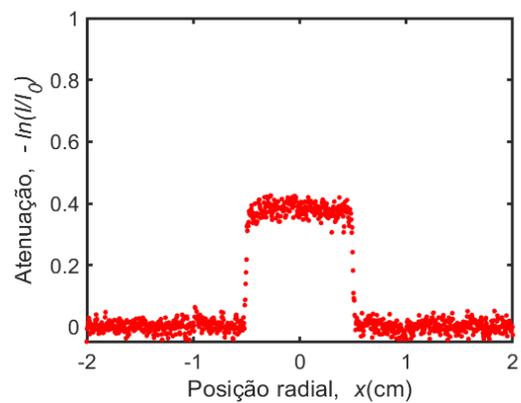
Figura C2: (a) Projeção do tubo contendo teflon (C_2F_4) com energia de 130 kV. (b) Intensidade da radiação que atravessando o tubo vazio (em azul) e o tubo com C_2F_4 (em vermelho). (c) Atenuação da radiação devido ao C_2F_4 .



(a)



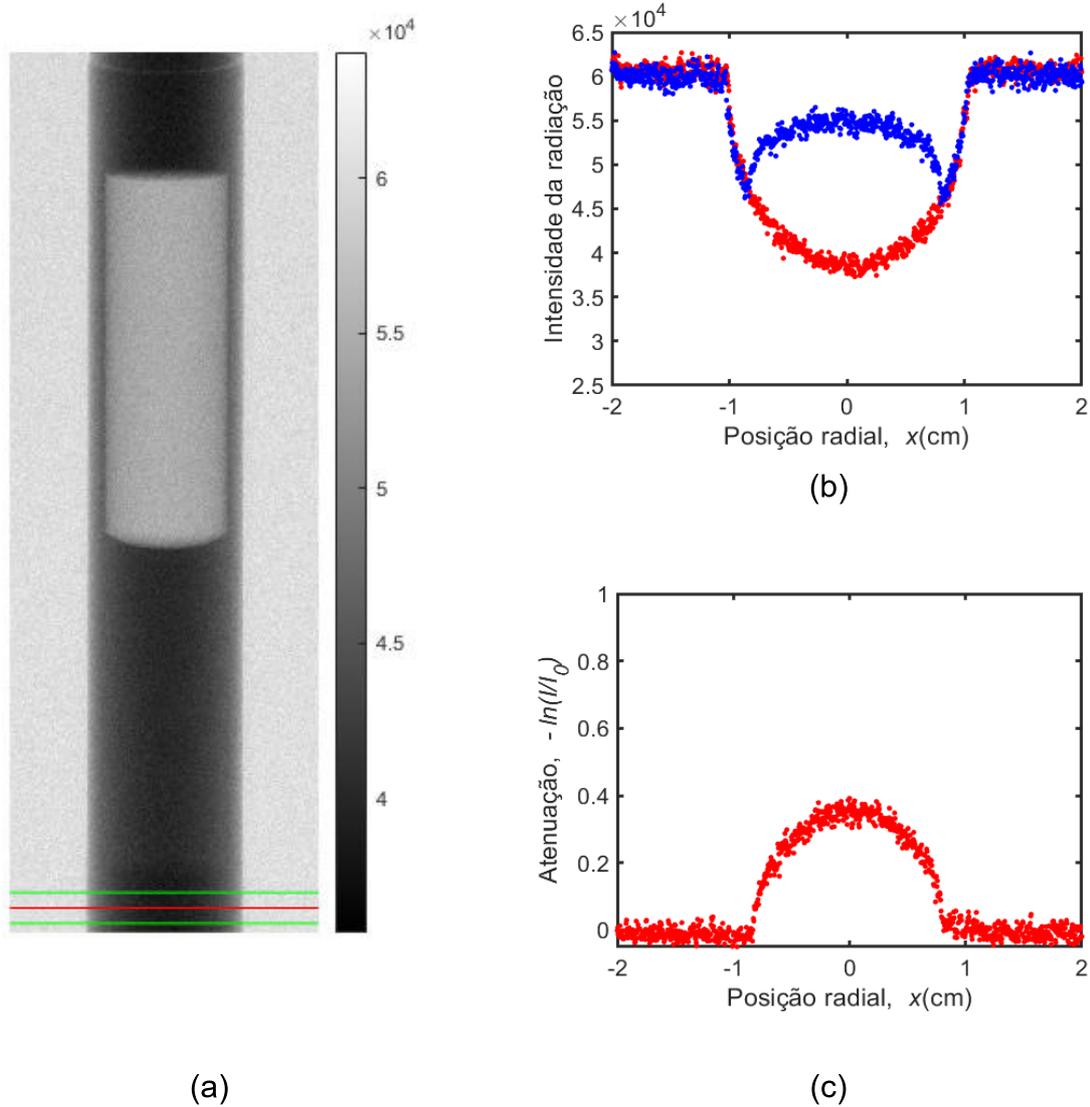
(b)



(c)

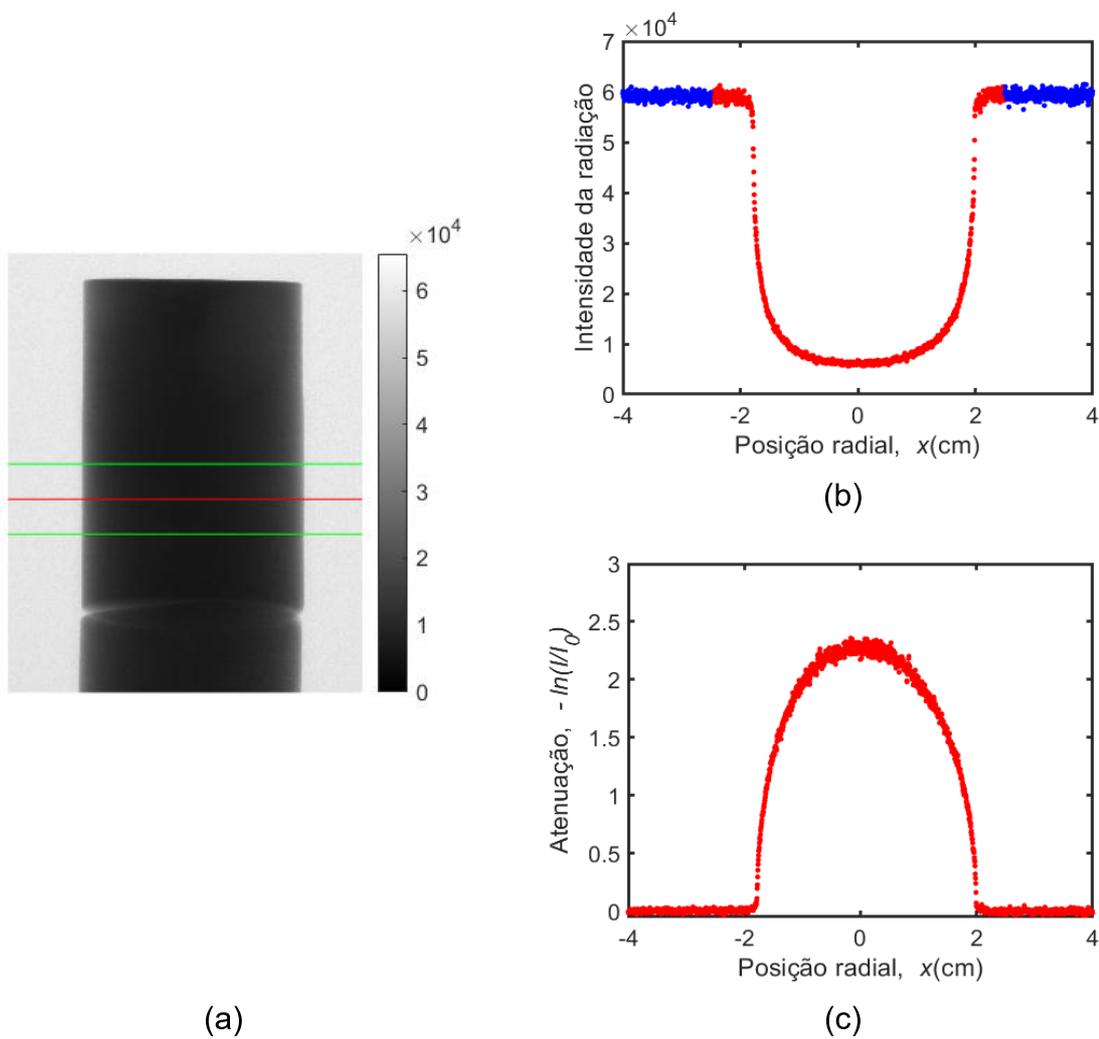
Fonte: O autor (2025).

Figura C3: (a) Projeção do tubo de acrílico com energia de 130 kV. (b) Intensidade da radiação incidente (em azul) e ao atravessar o tubo de acrílico (em vermelho). (c) Atenuação da radiação devido ao acrílico.



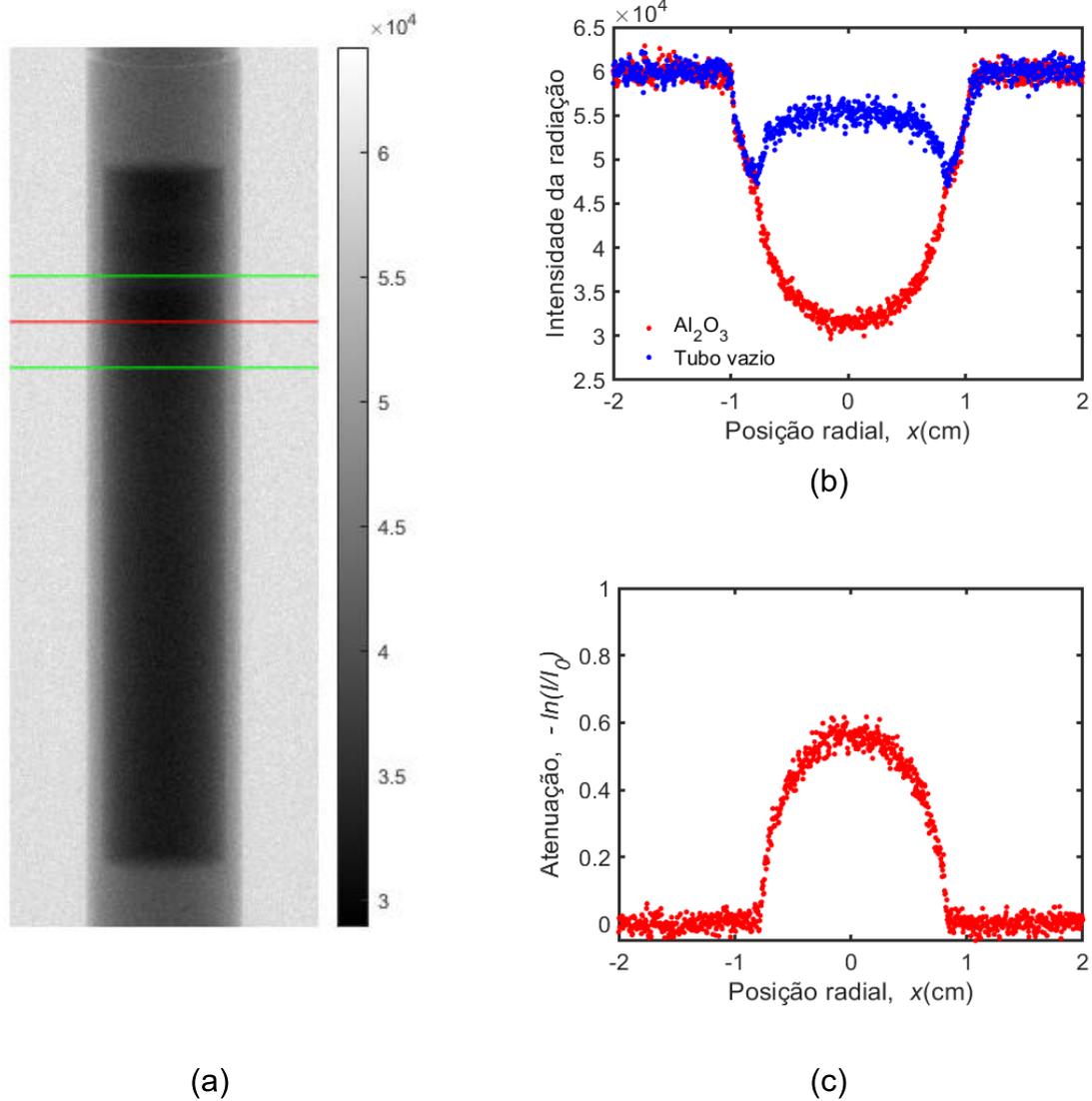
Fonte: O autor (2025).

Figura C4: (a) Projeção da amostra de rocha VN01 com energia de 130 kV. (b) Intensidade da radiação incidente (em azul) e ao atravessar a amostra da rocha VN01 (em vermelho). (c) Atenuação da radiação devido a amostra da rocha VN01.



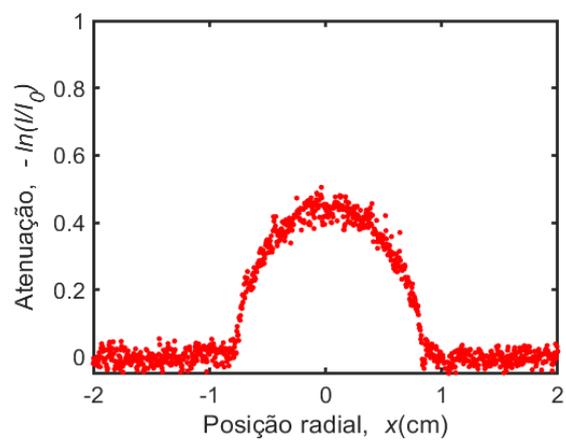
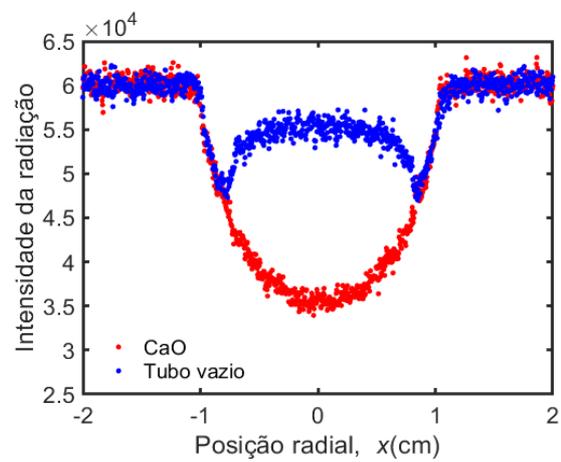
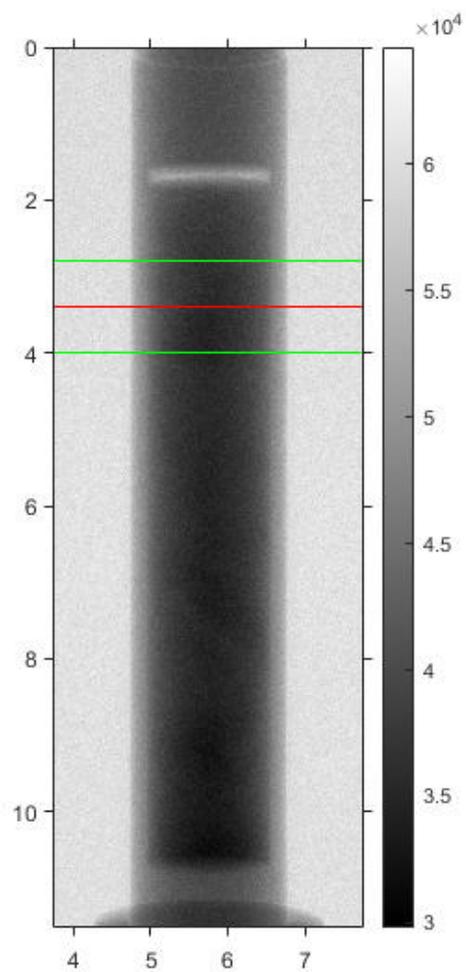
Fonte: O autor (2025).

Figura C5: (a) Projeção do tubo com óxido de alumínio com 180 kV. (b) Intensidade da radiação que atravessando o tubo vazio (em azul) e o tubo com Al₂O₃ (em vermelho). (c) Atenuação da radiação devido ao Al₂O₃.



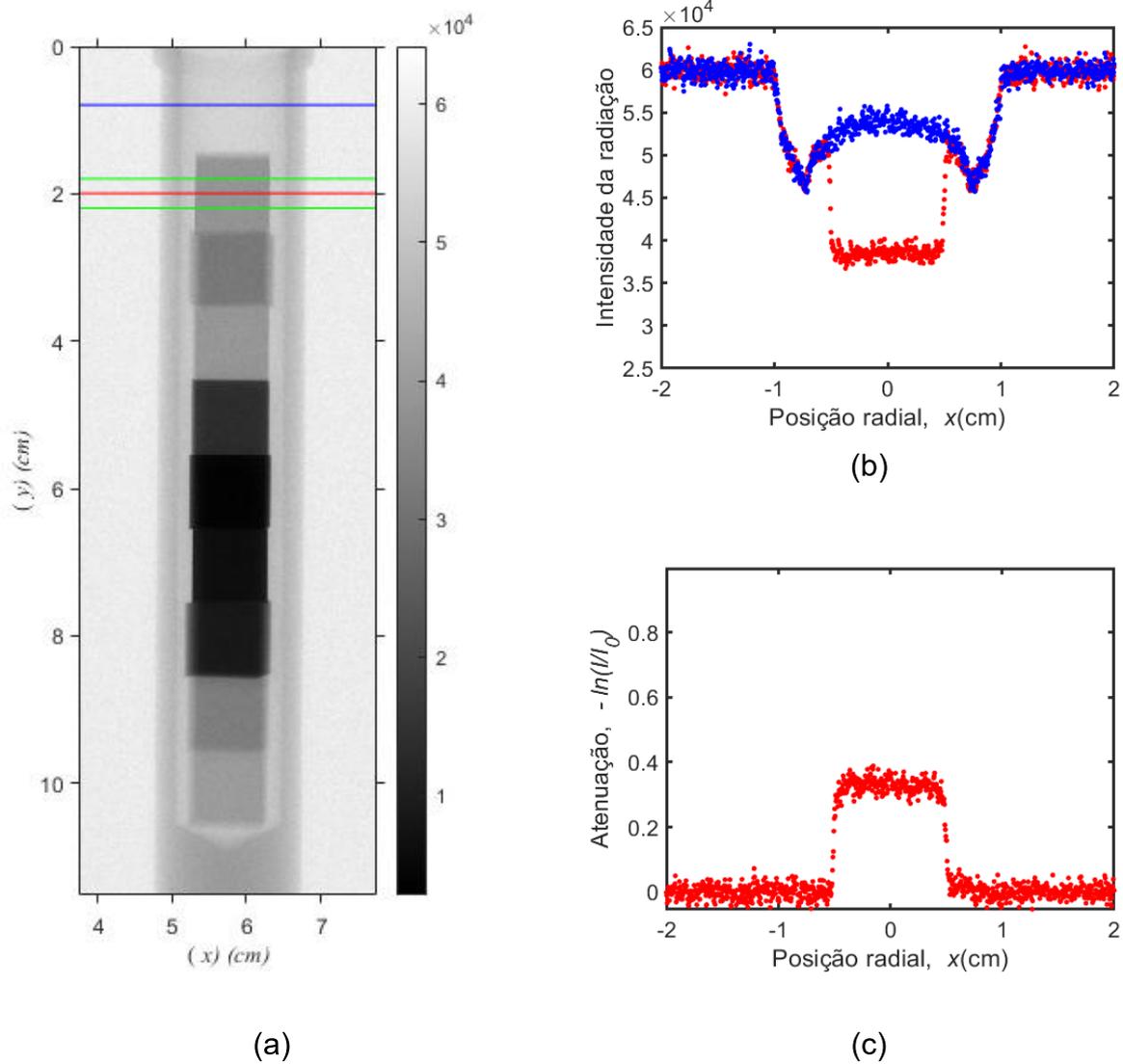
Fonte: O autor (2025).

Figura C6: (a) Projeção do tubo com óxido de cálcio com 180 kV. (b) Intensidade da radiação que atravessando o tubo vazio (em azul) e o tubo com CaO (em vermelho). (c) Atenuação da radiação devido ao CaO.



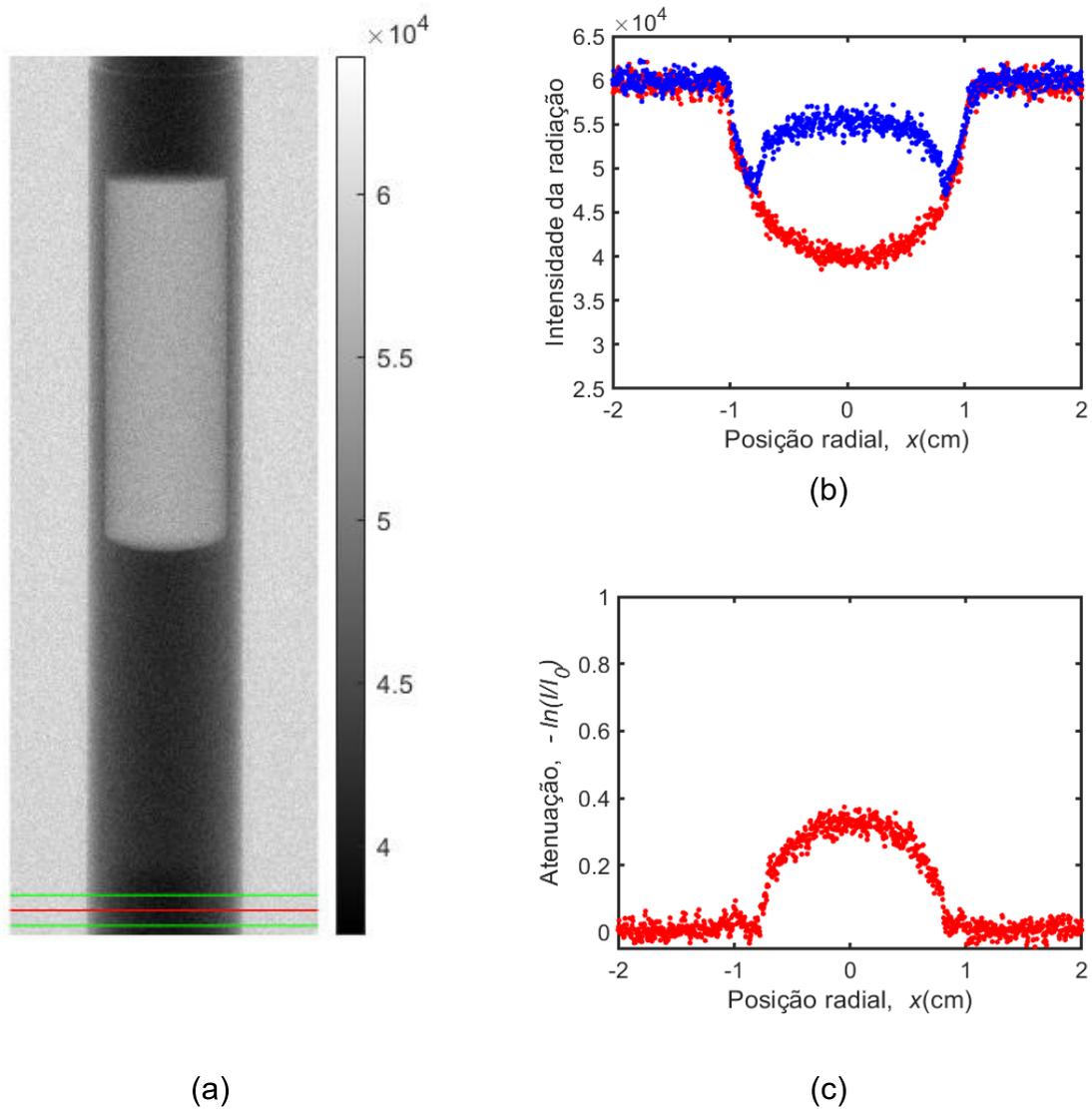
Fonte: O autor (2025).

Figura C7: (a) Projeção do tubo com teflon (C_2F_4) com energia de 180 kV. (b) Intensidade da radiação que atravessando o tubo vazio (em azul) e o tubo com C_2F_4 (em vermelho). (c) Atenuação da radiação devido ao C_2F_4 .



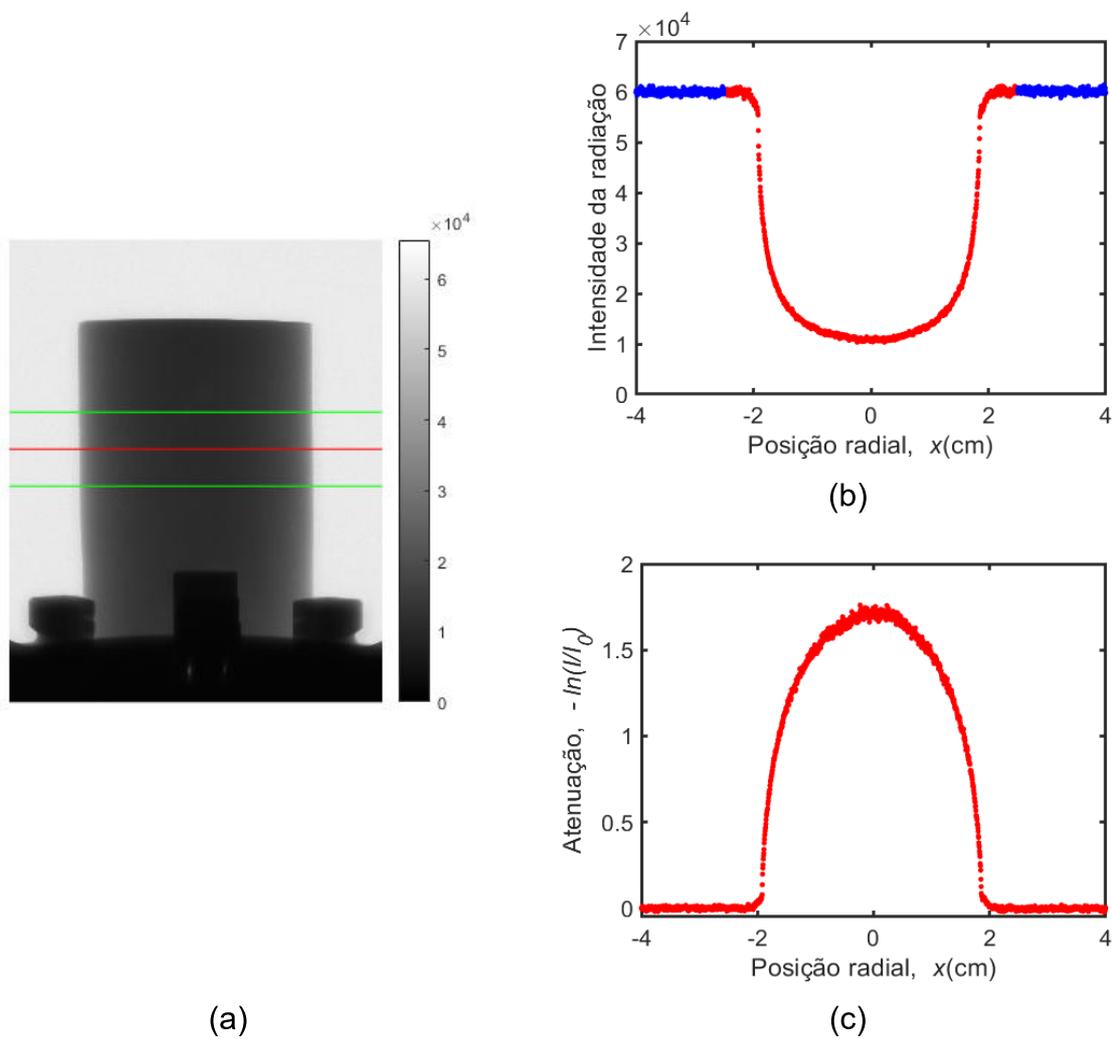
Fonte: O autor (2025).

Figura C8: (a) Projeção do tubo de acrílico com energia de 180 kV. (b) Intensidade da radiação incidente (em azul) e ao atravessar o tubo de acrílico (em vermelho). (c) Atenuação da radiação devido ao acrílico.



Fonte: O autor (2025).

Figura C9: (a) Projeção da amostra de rocha VN01 com energia de 180 kV. (b) Intensidade da radiação incidente (em azul) e ao atravessar a amostra da rocha VN01 (em vermelho). (c) Atenuação da radiação devido a amostra da rocha VN01.



Fonte: O autor (2025).

APÊNDICE D – CÓDIGOS DO PROCESSO DE CALIBRAÇÃO

Quadro D1: Função com o modelo para ajuste da seção de choque total.

```
function F = SCTef(x,xdata)

a1 = x(1);
b1 = x(2);
c1 = x(3);

F = a1.*xdata + b1.*xdata.^c1;
```

Quadro D2: Código para determinação dos coeficientes de ajuste para seção de choque total.

```
xdata = Z;           % vetor com números atômicos dos materiais de calibração
ydata = sigmaT;     % vetor com os valores das seções de choque totais
x0 = [1 1 1];      % chute inicial do método

options = optimoptions('lsqcurvefit','Algorithm','levenberg-marquardt',...
    'Display','iter','FunValCheck','on',...
    'MaxIter',Inf, ...
    'MaxFunctionEvaluations',100000,...
    'TolX',1e-15,...
    'OptimalityTolerance', 1e-15,...
    'FunctionTolerance', 1e-15,...
    'StepTolerance',1e-15,...
    'TolFun',1e-15);

lb = []; % Limite inferior para os coeficientes. Se não especificado, assume -Inf.
ub = []; % Limite superior para os coeficientes. Se não especificado, assume Inf.

COEFMod = lsqcurvefit(@SCTef,x0,xdata,ydata,lb,ub,options); % coef. do ajuste

ymod = SCTef(COEFMod,xdata);

plot(xdata,ydata,'*r',xdata,ymod,'--b')

lgd = legend('Valores Teóricos','Ajuste ao modelo', 'Location','northwest');

xlabel('Número , Z_{eff}')

ylabel('Total effective cross-section, \sigma_{t} (barns)')
```

Quadro D3: Função com o modelo proposto para ajuste do número atômico em função da razão entre os coeficientes de atenuação.

```
function F = MFA(x,xdata)

p1 = x(1);
p2 = x(2);
p3 = x(3);
p4 = x(4);

Num = p1 + p2*xdata + p3*xdata.^p4;

q1 = x(5);      q2 = x(6);      q3 = x(7);

Den = q1 + q2*xdata + xdata.^q3;

F = (Num)./(Den);
```

Quadro D4: Código para determinação dos coeficientes de ajuste para o número atômico.

```
xdata = R;

ydata = Z;

x0 = [1 1 1 1 1 1 1];

options = optimoptions('lsqcurvefit','Algorithm','levenberg-marquardt',...
    'Display','off','FunValCheck','on',...
    'MaxIter',Inf, ...
    'MaxFunctionEvaluations',100000000,...
    'ToIX',1e-15,...
    'OptimalityTolerance', 1e-15,...
    'FunctionTolerance', 1e-15,...
    'StepTolerance',1e-15,...
    'TolFun',1e-15);

lb = [];
ub = [];

COEFMod = lsqcurvefit(@MFA,x0,xdata,ydata,lb,ub,options);
```

Quadro D5: Função com o modelo para ajuste da massa atômica em função do número atômico.

```
function c = Mass(t,z)
k = length(t);
y = 0;
for n = 1:k
    y = y + t(n)*(log(z)).^(n-1);
end
c = y;
```

Quadro D6: Código para determinação dos coeficientes de ajuste para a massa atômica.

```
xdata = Z;
ydata = A;      % Massa atômica, g/mol

x0 = [1 1 1 1 1 1 1 1];

options = optimoptions('lsqcurvefit','Algorithm','levenberg-marquardt',...
    'Display','iter','FunValCheck','on',...
    'MaxIter',Inf, ...
    'MaxFunctionEvaluations',1000000,...
    'TolX',1e-15,...
    'OptimalityTolerance', 1e-15,...
    'FunctionTolerance', 1e-15,...
    'StepTolerance',1e-15,...
    'TolFun',1e-15);

lb = [];
ub = [];

COEFMod = lsqcurvefit(@Mass,x0,xdata,ydata,lb,ub,options);
```

APÊNDICE E – CÓDIGO PARA DETERMINAÇÃO DO NÚMERO ATÔMICO E DENSIDADE

Quadro E1: Código para determinação do número atômico e densidade.

```

% Constantes
NA = 6.02214e23;    barns = 1E-24;    ConstCONv = (NA).*(barns);

% Coeficientes obtidos dos ajustes para seções de choque
a_L = 4.98816e-01;    b_L = 2.20899e-04;    c_L = 3.98465;
a_H = 2.54553e-01;    b_H = 4.07787e-13;    c_H = 7.76898;

% Coeficientes obtidos dos ajustes para Z em função de R
p1 = 4.28480e-02;    p2 = 8.00580e-02;    p3 = 9.53109e-02;
p4 = 8.60232e-01;    q1 = 8.42378e-04;    q2 = 2.16344e-02;
q3 = 5.52119;

% Coeficientes obtidos dos ajustes para A em função de Z
t0 = 1.00939;        t1 = 3.60165e+01;    t2 = 1.44361e+02;
t3 = - 1.98899e+02;    t4 = 1.39000e+02;    t5 = - 5.21800e+01
t6 = 1.01006e+01;    t7 = 7.87338e-01;

% Dados de entrada: mu_L e mu_H
mu_L = input('Informe o valor do coeficiente de atenuação linear do material para a
energia E_L')
mu_H = input('Informe o valor do coeficiente de atenuação linear do material para a
energia E_H')

%% Estimativa para o número atômico
R = mu_L / mu_H;
Zeff = (p1 + p2*R + p3*R^p4)/(q1 + q2*R + R^q3);

%% Estimativa para a massa atômica
Aeff = t0 + t1*(log(Zeff)) + t2*(log(Zeff))^2 + t3*(log(Zeff))^3 + t4*(log(Zeff))^4 +
t5*(log(Zeff))^5 + t6*(log(Zeff))^6 + t7*(log(Zeff))^7

%% Estimativa para a densidade
Matriz = [(ConstCONv/Aeff)*(a_L*Zeff + b_L*(Zeff)^c_L)
          (ConstCONv /Aeff)*(a_H*Zeff + b_H*Zeff^c_H)];
d = [ mu_L; mu_H];

% Como não temos restrições de desigualdade, definimos A e b como vazios
A = [];
b = [];

% Não temos equações de igualdade adicionais além do próprio sistema
Aeq = [];
beq = [];

```

```
% Definir limites inferior e superior para a densidade (se aplicável)
lb = 0; % A densidade não pode ser negativa
ub = []; % Pode deixar vazio se não houver limite superior

% Resolver o sistema
rho = lsqlin(Matriz, d, A, b, Aeq, beq, lb, ub);

% Exibir os resultados

fprintf('O número atômico da amostra é: %.2f \n', Zeff);

fprintf('A densidade da amostra é: %.4f g/cm³\n', rho);
```