



DESENVOLVIMENTO DE UM MODELO COMPUTACIONAL PARA O CÁLCULO DO  
EQUIVALENTE DE DOSE DE NÊUTRONS EM BARREIRAS PRIMÁRIAS  
LAMINADAS DE SALAS DE RADIOTERAPIA

Gabriel Fonseca da Silva Rezende

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

Orientadores: José Antonio Carlos Canedo  
Medeiros  
Alessandro Facure Neves de  
Salles Soares

Rio de Janeiro  
Abril de 2015

DESENVOLVIMENTO DE UM MODELO COMPUTACIONAL PARA O CÁLCULO DO  
EQUIVALENTE DE DOSE DE NÊUTRONS EM BARREIRAS PRIMÁRIAS  
LAMINADAS DE SALAS DE RADIOTERAPIA

Gabriel Fonseca da Silva Rezende

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

Examinada por:

---

Prof. José Antonio Carlos Canedo Medeiros, D.Sc.

---

Dr. Alessandro Facure Neves de Salles Soares, D.Sc.

---

Dra. Maria Helena da Hora Maréchal, D.Sc.

---

Prof. Ademir Xavier da Silva, D.Sc.

---

Dr. Luiz Antonio Ribeiro da Rosa, D.Sc.

---

Dr. Cláudio Márcio do Nascimento Abreu Pereira, D.Sc.

---

Prof. Delson Braz, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

ABRIL DE 2015

Rezende, Gabriel Fonseca da Silva

Desenvolvimento de um modelo computacional para o cálculo do equivalente de dose de nêutrons em barreiras primárias laminadas de salas de radioterapia/ Gabriel Fonseca da Silva Rezende. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2015.

XIII, 122 p.: il.; 29,7 cm.

Orientadores: José Antonio Carlos Canedo Medeiros

Alessandro Facure Neves de Salles  
Soares

Tese (doutorado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Nuclear, 2015.

Referências Bibliográficas: p. 117-122.

1. Modelo Computacional. 2. Simulação Monte Carlo. 3. Redes Neurais. 4. Barreiras Laminadas. 5. Fotonêutrons.  
I. Medeiros, José Antonio Carlos Canedo *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Nuclear. III. Título.

# Agradecimentos

Primeiramente, gostaria de agradecer aos meus orientadores José Antonio Carlos Canedo Medeiros e Alessandro Facure Neves de Salles Soares, pela oportunidade de desenvolvimento deste trabalho e pelos ensinamentos dos quais serei eternamente grato.

Aos meus amados pais, Márcio Alonso de Rezende e Ana Maria Fonseca da Silva Rezende, pela criação, educação, exemplo, carinho e, acima de tudo, pelo amor e confiança que sempre depositaram em mim.

Aos meus queridos irmãos, João Paulo e Juliano, que sempre os terei como fonte de ensinamentos e bons exemplos.

A minha amada esposa Sara, pelo seu amor, carinho, compreensão e tranquilidade incomparáveis.

Ao meu amado filho Arthur, que sempre será a minha principal fonte de inspiração para tudo que eu fizer em vida.

E por fim, agradeço a todos os colegas da COPPE e da CNEN, que contribuíram direta ou indiretamente para a conclusão deste trabalho.

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

DESENVOLVIMENTO DE UM MODELO COMPUTACIONAL PARA O CÁLCULO DO EQUIVALENTE DE DOSE DE NÊUTRONS EM BARREIRAS PRIMÁRIAS LAMINADAS DE SALAS DE RADIOTERAPIA

Gabriel Fonseca da Silva Rezende

Abril/2015

Orientadores: José Antonio Carlos Canedo Medeiros

Alessandro Facure Neves de Salles Soares

Programa: Engenharia Nuclear

Muitos centros de radioterapia adquirem aceleradores lineares de 15 e 18 MV para efetuar tratamentos mais eficazes em tumores profundos. No entanto, a aquisição desses equipamentos deve ser acompanhada de cuidados adicionais no planejamento da blindagem das salas que irão abrigá-los. Em casos onde há restrição de espaço, é comum encontrar blindagens compostas de concreto e metal. O inconveniente desse tipo de barreira é a emissão de fotonêutrons quando fótons de altas energias (espectros de 15 ou 18 MV) interagem com o material metálico da blindagem. A emissão dessas partículas constitui um problema de radioproteção dentro e fora das salas de radioterapia, que deve ser devidamente avaliado. Um trabalho recente mostrou que o modelo corrente subestima a dose de nêutrons fora das salas de tratamento. Neste trabalho, foi criado um modelo computacional para o problema supracitado, utilizando simulações computacionais com método de Monte Carlo e Inteligência Artificial. O modelo desenvolvido foi composto por três redes neurais, cada uma sendo formada por um par de material e espectro: Pb18, Pb15 e Fe18. Comparando diretamente com o método de McGinley, a rede Pb18 exibiu melhores respostas para aproximadamente 78% dos casos testados; a rede Pb15 apresentou melhores resultados para 100% dos casos testados, enquanto a rede Fe18 obteve melhores respostas para 94% dos casos testados. Logo, o modelo computacional composto pelas três redes apresentou resultados mais consistentes que o método de McGinley.

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

DEVELOPMENT OF A COMPUTATIONAL MODEL FOR THE CALCULATION OF  
NEUTRON DOSE EQUIVALENT IN LAMINATED PRIMARY BARRIERS OF  
RADIOTHERAPY ROOMS

Gabriel Fonseca da Silva Rezende

April/2015

Advisors: José Antonio Carlos Canedo Medeiros  
Alessandro Facure Neves de Salles Soares

Department: Nuclear Engineering

Many radiotherapy centers acquire 15 and 18 MV linear accelerators to perform more effective treatments for deep tumors. However, the acquisition of these equipments must be accompanied by an additional care in shielding planning of the rooms that will house them. In cases where space is restricted, it is common to find primary barriers made of concrete and metal. The drawback of this type of barrier is the photoneutron emission when high energy photons (e.g. 15 and 18 MV spectra) interact with the metallic material of the barrier. The emission of these particles constitutes a problem of radiation protection inside and outside of radiotherapy rooms, which should be properly assessed. A recent work has shown that the current model underestimate the dose of neutrons outside the treatment rooms. In this work, a computational model for the aforementioned problem was created from Monte Carlo Simulations and Artificial Intelligence. The developed model was composed by three neural networks, each being formed of a pair of material and spectrum: Pb18, Pb15 and Fe18. In a direct comparison with the McGinley method, the Pb18 network exhibited the best responses for approximately 78% of the cases tested; the Pb15 network showed better results for 100% of the tested cases, while the Fe18 network produced better answers to 94% of the tested cases. Thus, the computational model composed by the three networks has shown more consistent results than McGinley method.

# Sumário

<b>1. Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Motivação	8
1.2 Objetivo	8
1.3 Organização do Trabalho	8
<b>2. Fundamentação Teórica</b>	<b>10</b>
2.1 Emissão de fotonêutrons	10
2.2 Espectro primário de nêutrons	12
2.3 Interação dos nêutrons com a matéria	13
2.3.1 Formas de Interação	13
2.3.2 Seção de choque para nêutrons	15
2.3.3 Descrição matemática para a interação dos nêutrons com a matéria	16
2.3.4 Moderação dos nêutrons por colisões nucleares	17
2.4 Classificação dos nêutrons quanto a faixa energética	19
2.5 Noções básicas de grandezas radiológicas	20
2.5.1 Grandezas radiométricas	20
2.5.1.1 Fluência	20
2.5.1.2 Taxa de fluência	20
2.5.1.3 Fluência de energia	21
2.5.1.4 Taxa de fluência de energia	21
2.5.2 Grandezas dosimétricas	21
2.5.2.1 Exposição	21
2.5.2.2 Kerma	22
2.5.2.3 Dose absorvida	22
2.5.3 Grandezas de proteção radiológica	22
2.5.3.1 Dose equivalente	23
2.5.3.2 Dose efetiva	23
2.5.4 Grandezas operacionais	23
2.5.4.1 Equivalente de dose ambiente	24
2.5.4.2 Equivalente de dose direcional	24

2.5.4.3 Equivalente de dose pessoal	24
2.6 Cálculo da espessura das barreiras primárias	24
2.7 Cálculo do equivalente de dose nêutrons em barreiras laminadas	26
2.8 O método de Monte Carlo e o transporte da radiação na matéria	29
2.9 O código MCNP	35
2.9.1 Estrutura dos dados de entrada do MCNP	37
2.9.2 Variância no MCNP	40
2.9.3 Erro relativo	41
2.9.4 Técnica de redução de variância por divisão geométrica com roleta	42
russo	
2.10 Redes neuronais artificiais: Visão Geral	44
2.11 Unidade funcional básica da estrutura cerebral: o neurônio	46
2.12 Modelo matemático do neurônio de McCulloch-Pitts	49
2.13 Arquiteturas de redes neuronais	54
2.13.1 Redes alimentadas adiante com camada única	54
2.13.2 Redes alimentadas adiante com múltiplas camadas	55
2.14 Aprendizado em uma rede neuronal	56
2.14.1 Aprendizagem supervisionada	56
2.14.2 Aprendizagem não-supervisionada	60
2.15 O perceptron de Rosenblatt	61
2.16 Redes perceptron de múltiplas camadas	63
2.16.1 Algoritmo de retropropagação	66
2.17 Redes de função de base radial	70
2.17.1 Teoria da Regularização	72
2.17.2 Redes de Regularização	74
2.17.3 Redes de função de base radial generalizadas	76
<b>3. Metodologia</b>	<b>80</b>
3.1 Escolha dos parâmetros de cálculo e modelagem do problema	80
3.2 Geração, organização e simulação dos inputs do MCNPX	83
3.3 Validação das simulações no MCNPX	85
3.4 Treinamento das redes neuronais	86
3.5 Capacidade de generalização das redes neuronais treinadas	89



<b>4. Resultados e Discussões</b>	92
4.1.1 Análise do ruído inserido na rede neuronal Pb18	92
4.1.2 Estudo da capacidade de generalização da rede neuronal Pb18: comparação entre a rede, o MCNPX e o método de McGinley	95
4.2.1 Análise do ruído inserido na rede neuronal Pb15	100
4.2.2 Estudo da capacidade de generalização da rede neuronal Pb15: comparação entre a rede, o MCNPX e o método de McGinley	102
4.3.1 Análise do ruído inserido na rede neuronal Fe18	106
4.3.2 Estudo da capacidade de generalização da rede neuronal Fe18: comparação entre a rede, o MCNPX e o método de McGinley	108
<b>5. Conclusões</b>	113
<b>Anexo</b>	116
<b>Referências Bibliográficas</b>	117

## Lista de Figuras

<b>Figura</b>		<b>Página</b>
Figura 1.1	Ilustração do acelerador linear de uso médico 6EX da Varian.	2
Figura 1.2	Ilustração da blindagem extra de chumbo para a adaptação de uma sala de radioterapia de uma instituição brasileira.	4
Figura 1.3	Diagrama em blocos representando o sistema nervoso.	7
Figura 2.1	Ilustração da emissão de nêutrons por reações fotonucleares	11
Figura 2.2	Ilustração do formato de uma curva de seção de choque para a emissão de fotonêutrons (MCGINLEY, 1998).	11
Figura 2.3	Ilustração das principais interações dos nêutrons com a matéria.	14
Figura 2.4	Ilustração de um feixe unidirecional de nêutrons incidindo em um alvo.	16
Figura 2.5	Imagem da barreira primária no plano frontal de uma sala de radioterapia.	25
Figura 2.6	Imagem da configuração de camadas de uma barreira primária laminada.	28
Figura 2.7	Representação hipotética da história de um único fóton que incide sobre uma placa atenuadora.	30
Figura 2.8	Distribuição aleatória de pontos para a amostragem de $P(x)$ .	34
Figura 2.9	Ilustração da estrutura de um arquivo de entrada do MCNP.	38
Figura 2.10	Ilustração da aplicação da técnica de divisão geométrica.	43
Figura 2.11	Ilustração do processo de roleta russa	44
Figura 2.12	Os elementos básicos que constituem um neurônio típico.	46
Figura 2.13	Modelo do neurônio artificial de McCulloch-Pitts.	49
Figura 2.14	Gráfico de uma função limiar hipotética.	50
Figura 2.15	Gráfico de uma função linear por partes hipotética.	51

Figura 2.16	Gráfico de uma função sigmóide hipotética.	51
Figura 2.17	Gráfico de uma função multiquadrática hipotética.	52
Figura 2.18	Gráfico de uma função multiquadrática inversa hipotética.	53
Figura 2.19	Gráfico de uma função gaussiana hipotética.	53
Figura 2.20	Rede alimentada adiante com camada única.	54
Figura 2.21	Rede alimentada adiante com múltiplas camadas totalmente conectada.	55
Figura 2.22	Diagrama em blocos representando a aprendizagem supervisionada.	57
Figura 2.23	Diagrama em blocos representando a aprendizagem auto-organizada.	60
Figura 2.24	Ilustração da superfície de decisão (hiperplano) dada por uma reta. Os pontos $(x_1, x_2)$ representados acima desta são atribuídos à classe $\bar{U}_1$ , enquanto os pontos $(x_1, x_2)$ abaixo da reta são atribuídos a $\bar{U}_2$ .	62
Figura 2.25	Grafo arquitetural de uma rede MLP, totalmente conectada, com duas camadas ocultas.	64
Figura 2.26	Ilustração do sentido de propagação dos sinais em uma rede MLP que emprega o algoritmo de retropropagação.	65
Figura 2.27	Ilustração do Grafo arquitetural singular de uma rede de base radial.	70
Figura 2.28	Ilustração do Grafo arquitetural de uma rede de Regularização.	74
Figura 3.1	Ilustração da geometria vista de perfil e a identificação dos parâmetros pertinentes à modelagem.	82
Figura 3.2	Ilustração do esquema organizacional correspondente à geração e armazenamentos dos inputs.	84
Figura 3.3	Comparação entre os valores experimentais e simulados para o espectro de emissão de nêutrons gerado pela incidência de raios gama de 13,27MeV em lâminas de chumbo-208 (FACURE <i>et al.</i> ,2008).	86
Figura 3.4	Ilustração da arquitetura da rede de base radial generalizada utilizada.	89

Figura 3.5	Distribuição dos inputs-teste de acordo com as regiões.	90
Figura 4.1	Histograma dos erros relativos dos inputs de treinamento da rede Pb18.	92
Figura 4.2	Ilustração do gráfico de análise espacial das incertezas da rede Pb18.	94
Figura 4.3	Ilustração do gráfico normalizado de $H_n$ comparando o MCNPX, a rede Pb18 e método de McGinley.	99
Figura 4.4	Histograma dos erros relativos dos inputs de treinamento da rede Pb15.	100
Figura 4.5	Ilustração do gráfico de análise espacial das incertezas da rede Pb15.	101
Figura 4.6	Ilustração do gráfico normalizado de $H_n$ comparando o MCNPX, a rede Pb15 e o método de McGinley.	105
Figura 4.7	Histograma dos erros relativos dos inputs de treinamento da rede Fe18.	106
Figura 4.8	Ilustração do gráfico de análise espacial das incertezas da rede Fe18.	108
Figura 4.9	Ilustração do gráfico normalizado de $H_n$ comparando o MCNPX, a rede Fe18 e o método de McGinley.	112

## Lista de Tabelas

<b>Tabela</b>		<b>Página</b>
Tabela 1.1	Valor dos limites de dose anuais da norma CNEN-NN-3.01.	4
Tabela 2.1	Valores da perda média de energia para alguns materiais; a última coluna ilustra quantas colisões seriam necessárias para reduzir a energia de um nêutron de 2 MeV à faixa térmica (ZAMBONI, 2007).	19
Tabela 4.1	Valores dos parâmetros inseridos nos inputs de teste da rede Pb18.	95
Tabela 4.2	Comparação entre o MCNPX e do método de McGinley – Pb18.	96
Tabela 4.3	Comparação entre os resultados do MCNPX e da rede neuronal Pb18.	96
Tabela 4.4	Tabela 4.4 – Comparação entre os resultados da rede Pb18 e do método de McGinley.	97
Tabela 4.5	Valores dos parâmetros inseridos nos inputs de teste da rede Pb15.	102
Tabela 4.6	Comparação entre o MCNPX e do método de McGinley – Pb15.	103
Tabela 4.7	Comparação entre os resultados do MCNPX e da rede neuronal Pb15.	103
Tabela 4.8	Comparação entre os resultados da rede Pb15 e do método de McGinley.	104
Tabela 4.9	Valores dos parâmetros inseridos nos inputs de teste da rede Fe18.	109
Tabela 4.10	Comparação entre o MCNPX e do método de McGinley – Fe18.	110
Tabela 4.11	Comparação entre os resultados do MCNPX e da rede neuronal Fe18.	110
Tabela 4.12	Comparação entre os resultados da rede Fe18 e do método de McGinley.	111

# Capítulo 1

## Introdução

Nos últimos anos, o número de pessoas acometidas por câncer atingiu um novo patamar, convertendo-se na quinta maior *causa mortis* no mundo (WHO, 2014). Somente em 2012, foram registrados, aproximadamente, 14 milhões de novos casos de câncer e 8 milhões e 200 mil óbitos em decorrência da doença (IARC, 2012). Segundo a Organização Mundial de Saúde, no ano de 2030, serão esperados 27 milhões de novos casos de câncer, 17 milhões de mortes por câncer e 75 milhões de pessoas vivas, anualmente, com câncer (INCA, 2012). Os dados e estimativas citados refletem o panorama atual e futuro no que concerne o câncer, evidenciando a necessidade de buscar novas medidas que visem mitigar o problema.

O câncer é uma doença cuja origem é de cunho genético, resultado de uma série de alterações nos genes que comprometem os sistemas responsáveis pelo crescimento e comportamento celular. No entanto, é importante enfatizar que, de um modo geral, o termo câncer é empregado para designar mais de uma centena de diferentes doenças. Isto se deve ao fato de o corpo humano ser constituído por uma miríade de diferentes tipos de células. Como qualquer tipo de célula viva que constitui o corpo humano, as células cancerosas são vulneráveis à radiação ionizante. Logo, a doença pode ser tratada com o uso controlado deste tipo de radiação, sendo essa modalidade denominada de radioterapia. Esta pode ser subdivida em teleterapia e braquiterapia. A primeira, que também pode ser chamada de radioterapia à distância, irradia a região tumoral a partir de uma fonte de radiação localizada fora do corpo do paciente. Já a segunda, se caracteriza pela proximidade da fonte com o tecido alvo. Em ambos os procedimentos não ocorre contaminação radioativa do paciente, somente a irradiação. Cabe ressaltar que a radioterapia é um procedimento não

invasivo e que corresponde cerca de 60% do total de indicações para o tratamento de neoplasias em seus diferentes estágios (INCA, 2001).

A modalidade de teleterapia ou terapia à distância envolve o uso de feixes com diferentes tipos de radiação ionizante, dependendo do quadro patológico de câncer a ser tratado. As partículas de radiação mais comumente utilizadas nessa modalidade são fótons e elétrons, no entanto, partículas como prótons, nêutrons e íons pesados também podem ser utilizadas. Há alguns anos era comum o uso de aparelhos de teleterapia que continham fontes de Cs-137 ou Co-60, todavia, com o avanço tecnológico, esses aparelhos vêm sendo continuamente substituídos por aceleradores lineares (Figura 1.1). A justificativa da troca se fundamenta no fato de que os aceleradores são mais seguros do ponto de vista de radioproteção, pois são aparelhos eletrônicos e dispensam o uso de radioisótopos. Além disso, os aceleradores mais recentes são capazes de produzir espectros de fótons com energias mais elevadas, permitindo um tratamento mais eficaz para tumores profundos.



Figura 1.1 - Ilustração do acelerador linear de uso médico 6EX da Varian.

Com a aquisição de aceleradores lineares capazes de produzir espectros de fótons com energias mais elevadas (15 e 18MV), surge, conseqüentemente, a necessidade de uma avaliação cuidadosa no planejamento de blindagens das salas que abrigarão tais aparelhos. Um ponto essencial deste planejamento é o estudo de quais materiais serão utilizados na construção dessas salas, de modo que estas se tornem viáveis tanto do ponto de vista econômico quanto do ponto de vista do espaço disponível para a obra.

Um material amplamente utilizado para blindagem de salas de radioterapia é o concreto convencional. A preferência por este material se deve às suas características físicas e ao seu custo relativamente baixo. No entanto, o emprego exclusivo de concreto convencional para blindagem de salas que abrigam aceleradores mais energéticos, pode produzir barreiras espessas o suficiente para inviabilizar adaptações de salas pré-existentes ou até mesmo a construção de novas salas.

Se o espaço é um parâmetro limitante, pode-se fazer necessário o uso de materiais de alta densidade como meio de blindagem, reduzindo a espessura da barreira e aumentando o espaço disponível para o equipamento e qualquer outro elemento de construção. Nestes casos, a blindagem composta de concreto e lâminas metálicas (barreira laminada) é uma boa solução para espaços restritos. Em muitos casos, como ilustrado na Figura 1.2, o chumbo é normalmente utilizado como material de blindagem, uma vez que é um elemento denso e fácil de manusear.

Por outro lado, nêutrons podem ser ejetados de materiais de alta densidade quando estes são submetidos à irradiação de raios X com energias superiores a um determinado limiar, sendo este de 6,74 MeV para o chumbo (MCGINLEY, 1998) e de 11,20 MeV para o ferro (BOWMAN, 1967). Quando salas de tratamento são projetadas ou adaptadas com barreiras laminadas, principalmente com lâminas de chumbo, essas partículas podem constituir um problema de proteção radiológica que deve ser adequadamente avaliado, inclusive para aceleradores que operam com energias de fótons de até 10 MeV (FACURE *et al.*, 2008).





Figura 1.2 – Ilustração da blindagem extra de chumbo para a adaptação de uma sala de radioterapia de uma instituição brasileira.

Segundo o item 5.4.2 da norma CNEN-NN-3.01 (CNEN, 2014) da Comissão Nacional de Energia Nuclear, a exposição normal dos indivíduos à radiação ionizante deve ser restringida de modo que não exceda os limites de dose especificados em suas exigências, salvo em circunstâncias especiais, autorizadas pela CNEN. Tais limites podem ser encontrados na Tabela 1.1. Sendo que [a] significa a exposição do mês de janeiro ao mês de dezembro, [b] é a média aritmética em 5 anos consecutivos (desde que não exceda 50 mSv em qualquer ano), [c] pode ser autorizado pela CNEN um valor de 5 mSv em um ano desde que não ultrapasse a média de 1 mSv em 5 anos, [d] representa o valor médio em 1 cm<sup>2</sup>, na região mais irradiada.

Tabela 1.1 – Valor dos limites de dose anuais da norma CNEN-NN-3.01.

<b>Limites de Dose Anuais [a]</b>			
<b>Grandeza</b>	<b>Região</b>	<b>Indivíduo ocupacionalmente exposto</b>	<b>Indivíduo do público</b>
<i>Dose Efetiva</i>	<i>Corpo Inteiro</i>	<i>20 mSv [b]</i>	<i>1 mSv [c]</i>
<i>Dose Equivalente</i>	<i>Cristalino</i>	<i>20 mSv [b]</i>	<i>15 mSv</i>
	<i>Pele [d]</i>	<i>500 mSv</i>	<i>50 mSv</i>
	<i>Mãos e Pés</i>	<i>500 mSv</i>	<i>---</i>

Cabe ressaltar que os limites de dose expostos na Tabela 1.1 são referentes ao total das doses aplicadas por uma prática regulada (ou não) pela CNEN. Limites estes que, neste trabalho, são referentes à atividade radioterápica. Em adição, deve ser lembrado que, para o cálculo de blindagens em radioterapia, os limites de dose da norma são utilizados, geralmente, para balizar os cálculos de transmissão dos fótons através das barreiras. No tocante às doses de nêutrons oriundas da barreira primária, estas são consideradas doses adicionais e indesejadas tanto no plano do paciente quanto no plano dos indivíduos ocupacionalmente expostos (IOEs) e do público. As doses de nêutrons no plano do paciente, quando essas partículas têm origem no próprio acelerador, são extremamente elevadas quando comparadas às doses de nêutrons provenientes da barreira primária, ao ponto destas não serem consideradas. No entanto, no plano dos IOEs e do público as doses de nêutrons, dependendo da configuração da barreira e energia do acelerador, podem alcançar a mesma ordem de grandeza do limite de dose efetiva estabelecido para os IOEs, encontrado na norma CNEN-NN-3.01 (CNEN, 2014). De acordo com o que foi exposto acima, torna-se imprescindível a existência de um modelo capaz de calcular, de maneira confiável e segura, as doses de nêutrons fora da sala de tratamento, ou seja, no plano dos IOEs e do público.

Atualmente, o cálculo da dose de nêutrons fora das salas de tratamento, que possuem barreiras primárias laminadas, é realizado, de modo geral, pelo método de MCGINLEY (1992a e 1992b). A ausência de outros métodos na literatura para estabelecer uma comparação direta fez surgir, conseqüentemente, o interesse natural em verificar a validade do método corrente. Recentemente, foi realizado um trabalho que verificou a validade do método de McGinley (REZENDE, 2011), constatando que o mesmo subestima a contribuição dos fotonêutrons para o equivalente de dose após barreiras primárias laminadas, em salas de radioterapia. Tendo em mente essas informações, torna-se óbvia a necessidade de formular um novo modelo que possa descrever, de modo satisfatório, o fenômeno observado.

Para elaborar um modelo que forneça resultados conservativos, foram combinadas, neste trabalho, duas áreas distintas no campo computacional: simulação com método de Monte Carlo e inteligência artificial. A razão pela qual foram associadas essas duas áreas está no fato de que elas podem, dentro do escopo do trabalho, contribuir sinergicamente na concepção de um novo modelo computacional.

O método de Monte Carlo é geralmente indicado para resolver problemas de natureza complexa e que são extremamente difíceis de serem modelados por métodos determinísticos – contexto físico no qual este trabalho se encontra. Solucionar um problema com o Método de Monte Carlo consiste em realizar uma simulação matemática de um determinado fenômeno em vez de resolver a equação ou conjunto de equações que o descreva. E a maneira mais simples de realizar essas simulações é lançando mão de pacotes ou códigos de Monte Carlo. Atualmente, o MCNPX (Monte Carlo N-Particle eXtended) é um dos códigos de Monte Carlo que oferece maior robustez para realizar o transporte da radiação na matéria (SWEEZY *et al.*, 2003). Por esse motivo, tal código foi escolhido para a realização desse trabalho.

No campo da inteligência artificial, as redes neurais artificiais, ou simplesmente redes neurais, são ferramentas matemáticas inspiradas no funcionamento do cérebro humano. A tecnologia de redes neurais foi concebida há décadas de forma multidisciplinar, ou seja, teve sua origem em diversas áreas da ciência, tais como: matemática, estatística, física, neurociência, ciência da computação e engenharia. Uma rede neuronal, como o próprio nome sugere, processa informações de forma análoga às estruturas de neurônios presentes em nosso cérebro (Figura 1.3). Logo, funciona como um sistema constituído de um processador maciçamente paralelo e distribuído em unidades de processamento simples, chamados de neurônios (HAYKIN, 2001). O poder computacional de uma rede neuronal reside, primeiramente, em sua estrutura de processamento em paralelo e, segundo, em sua habilidade de aprendizado (BISHOP, 1995). Essa analogia ao comportamento do

cérebro faz das redes neuronais sistemas de processamento singulares com aplicações em: modelagem, reconhecimento de padrões e processamento de sinais.

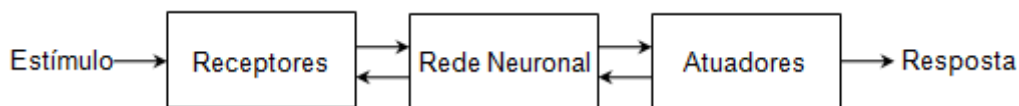


Figura 1.3 – Diagrama em blocos representando o sistema nervoso.

A elaboração do novo modelo, presente neste trabalho, que descreve matematicamente o fenômeno citado anteriormente, foi realizada utilizando o MATLAB para modelagem do problema e o código MCNPX para a simulação do mesmo. Ao passo que as redes neuronais foram utilizadas para "aprender o comportamento da função" que rege o equivalente de dose de nêutrons, a partir dos resultados das simulações do MCNPX. O termo "aprender o comportamento da função" significa encontrar, através de mapeamento, um hiperplano que melhor se ajuste aos dados fornecidos pelo MCNPX. Adicionalmente, foram realizadas as validações tanto da modelagem no MCNPX como das redes neuronais. No primeiro caso, foram comparados dados experimentais com valores obtidos pelo código MCNPX, para as mesmas condições físicas, a fim de reproduzir os resultados obtidos experimentalmente. Já no segundo caso, a capacidade de generalização da rede foi testada através de comparações entre os valores obtidos no MCNPX e resultados calculados pela rede, em condições físicas distintas das que foram utilizadas no treinamento da mesma. Uma abordagem mais abrangente será discutida no tópico de materiais e métodos, encontrado mais adiante no corpo da tese.

Por fim, a utilização conjunta de códigos de Monte Carlo e redes neuronais artificiais pode ser muito conveniente para a elaboração de modelos computacionais, sobretudo em problemas de natureza complexa e que são extremamente difíceis de serem modelados por métodos determinísticos. O caminho trilhado neste trabalho abre

espaço para pesquisas futuras em seguimentos de engenharia e física, especialmente em radioproteção.

## **1.1 Motivação**

A motivação para a realização desse trabalho foi o estudo que constatou que o método de McGinley subestima a contribuição dos fotonêutrons para o equivalente de dose após barreiras primárias laminadas em salas de radioterapia (REZENDE, 2011). Além disso, torna-se um fator agravante a carência de modelos alternativos na literatura que ofereçam uma opção à utilização do método de McGinley. Neste sentido, torna-se necessária a elaboração de um novo modelo que venha descrever, satisfatoriamente, o fenômeno observado nas salas de radioterapia.

## **1.2 Objetivo**

Construir um modelo computacional, a partir do uso do código MCNPX e de redes neurais, que seja capaz de calcular, de modo conservativo, o equivalente de dose de nêutrons após uma barreira primária laminada.

## **1.3 Organização do Trabalho**

O presente trabalho foi estruturado em cinco capítulos: introdução, fundamentação teórica, materiais e métodos, resultados e discussões, e conclusões.

O capítulo 1, responsável pela introdução dos aspectos básicos da tese, foi incumbido de expor a apresentação, motivação e objetivo do trabalho, bem como a organização do material escrito.

O capítulo 2 aborda o formalismo teórico referente aos aspectos conceituais necessários para sustentar os argumentos e inferências presentes neste trabalho.

Primeiramente, foi realizada uma explanação teórica sobre as interações fotonucleares, que são responsáveis pela emissão dos fotonêutrons – nêutrons ejetados de núcleos atômicos pela interação de fótons de alta energia com os mesmos. Em seguida, foi realizada uma abordagem sobre a interação dos nêutrons com a matéria e suas respectivas peculiaridades. Foram discutidos, também, os aspectos relevantes de radioproteção, bem como uma descrição do método de McGinley. Por fim, foram expostos os sustentáculos teóricos que formam a base do método de Monte Carlo e das redes neuronais.

No capítulo 3 foram discutidos os artifícios metodológicos utilizados para a construção do novo modelo matemático que visa estimar o equivalente de dose de nêutrons após uma barreira primária laminada. Os principais aspectos descritos envolvem o treinamento de redes neuronais a partir dos resultados produzidos por simulações no MCNPX, bem como a utilização de tal treinamento para a obtenção do novo modelo. Além disso, foram abordadas: a modelagem do problema, os parâmetros fundamentais à construção do modelo e as validações envolvidas em todo o processo.

No capítulo 4, foram apresentados os resultados com suas respectivas análises e discussões. Deste modo, foram expostos e analisados os resultados das simulações do código MCNPX e, também, discutidos o comportamento da rede neuronal após o seu treinamento. Além disso, foi discutida a validação tanto da modelagem no MCNPX quanto das redes neuronais.

Por fim, no capítulo 5, foram apresentadas as ponderações e conclusões finais decorrentes das observações e análises realizadas no corpo da tese.

# Capítulo 2

## Fundamentação Teórica

### 2.1 Emissão de fotonêutrons

A interação de fótons de alta energia com núcleos-alvo de elementos leves ou pesados pode resultar na ejeção de um ou mais nêutrons deste núcleo. Essa ejeção ou emissão é delineada pelo fenômeno de ressonância de dipolo gigante (BALDWIN e KLAIBER, 1947 e 1948), que ocorre quando a energia dos fótons incidentes é próxima à energia de ligação dos nucleons (5-15 MeV). Na interação fóton-núcleo ocorre a fotoabsorção que leva a um deslocamento relativo dos prótons e nêutrons mais intensamente ligados no interior do núcleo. Segundo o modelo da gota líquida (WAY, 1939), este deslocamento gera uma vibração do fluido de prótons e do fluido de nêutrons, levando o núcleo a um estado energético mais elevado. Neste estado o núcleo é altamente instável, o que leva a uma provável liberação de energia sob a forma de emissão de nêutrons ou de prótons. No caso da emissão de nêutrons, estes recebem o nome de fotonêutrons (Figura 2.1). Para núcleos pesados a emissão de prótons é muito improvável, pois há uma intensa barreira coulombiana impedindo que tais prótons sejam ejetados. Em contrapartida o decaimento por ressonância de dipolo gigante em núcleos leves ocorre com igual probabilidade tanto para prótons ( $\gamma, p$ ) quanto para nêutrons ( $\gamma, n$ ), predominando a emissão de um único nucleon.

O comportamento da seção de choque para a ressonância de dipolo gigante segue uma distribuição de Lorentz (SPETH e WOUDE, 1981):

$$\sigma(E) = \frac{\sigma_P}{1 + [(E^2 - E_{max}^2)/E^2 \xi_m^2]} \quad (2 - 1)$$

onde  $\sigma_p$  é o pico da seção de choque,  $E$  é a energia do fóton,  $E_{\max}$  é a energia de ressonância e  $\xi_m$  é a largura a meia altura.

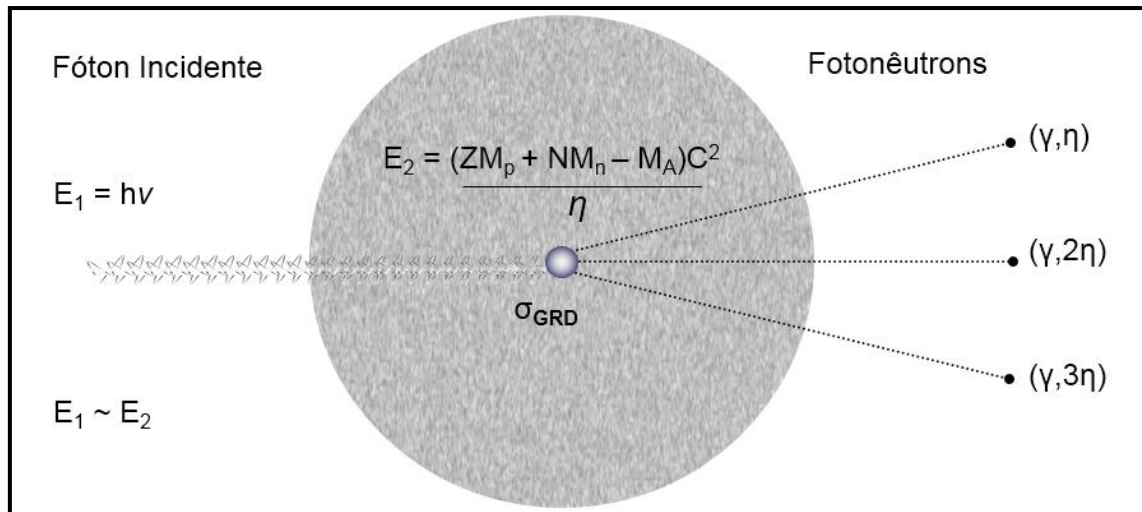


Figura 2.1 – Ilustração da emissão de nêutrons por reações fotonucleares.

A forma típica para essa distribuição pode ser encontrada na Figura 2.2, onde há um rápido crescimento até um valor máximo e um decréscimo gradual para energias mais elevadas. Para núcleos médios e pesados ( $A > 40$ ), o valor máximo da seção de choque encontra-se no intervalo de energia entre 13 e 18 MeV.

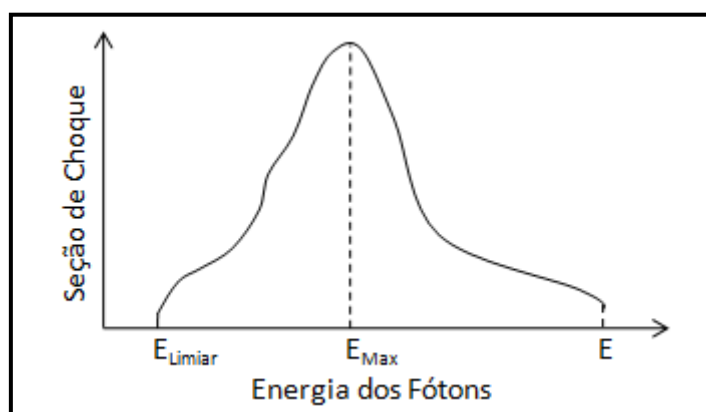


Figura 2.2 – Ilustração do formato de uma curva de seção de choque para a emissão de fotonêutrons (MCGINLEY, 1998).



A área abaixo do gráfico da Figura 2.2 representa a intensidade da ressonância gigante, e pode ser descrita pela fórmula (LEVINGER *et al.*, 1960):

$$\int \sigma(E)dE = \int_{E_{limiar}}^E \sigma(E)dE = \frac{2 \pi^2 e^2 \hbar}{Mc} \frac{NZ}{A} = 60 \frac{NZ}{A} \quad (2 - 2)$$

onde 'e' é a carga do elétron,  $\hbar$  é a constante de Planck (dividida por  $2\pi$ ), M é a massa média dos nucleons ( $Mc^2 = 938,926$  MeV), 'c' é a velocidade da luz no vácuo, N o número de nêutrons, Z o número de prótons e A é o número de massa do átomo-alvo. Podemos notar que a intensidade da ressonância gigante é diretamente proporcional ao número de nêutrons e de prótons, o que de fato seria esperado.

## 2.2 Espectro primário de nêutrons

Os espectros de nêutrons produzidos por fótons incidindo sobre algum elemento químico pesado podem ser descritos como a soma de duas componentes: o espectro de evaporação e o espectro de emissão direta (NCRP, 1984). O espectro de evaporação é caracterizado por uma deposição gradual de energia dos fótons nos núcleos alvos que, por sua vez, se tornam excitados e posteriormente decaem emitindo nêutrons. Por outro lado, o espectro de emissão direta é gerado pela remoção de um nêutron do núcleo-alvo, devido à interação direta dos fótons com os nucleons.

O espectro de evaporação, que corresponde à maior fração do espectro total de nêutrons, pode ser descrito por uma distribuição da forma (NCRP, 1984):

$$\frac{dN}{dE} = \frac{E_n}{T^2} \exp \left[ \frac{-E_n}{T} \right] \quad (2 - 3)$$

onde  $E_n$  é a energia dos nêutrons emitidos e  $T$  é um parâmetro característico para cada núcleo, denominado “temperatura nuclear” dada em MeV. O pico deste espectro corresponde a  $E_n = 2T$  e a energia média é  $E_n = T$ .

A emissão dos nêutrons de evaporação ocorre de maneira isotrópica. Por outro lado, os de emissão direta, que possuem mais energia, podem ser emitidos de forma não isotrópica. Para materiais com número atômico médio ou alto e para energias dos fótons incidentes perto do pico de ressonância, a emissão direta alcança entre 12 a 15% do total dos nêutrons. Para estimar a contribuição dessas duas componentes distintas do espectro total, podemos descrever o espectro primário de nêutrons produzidos em núcleos pesados através da relação (TOSI *et al.*, 1991):

$$\frac{dN}{dE} = \frac{0,8929 E_n}{T^2} \exp\left[\frac{-E_n}{T}\right] + \frac{0,1071 \ln\left[\frac{E_{max}}{E_n + E_L}\right]}{\int_0^{E_{max}-E_L} \ln\left[\frac{E_{max}}{E_n + E_L}\right] dE_n} \quad (2 - 4)$$

onde  $E_{max}$  é a energia máxima dos fótons incidentes no material,  $E_L$  é a energia de ligação e o fator  $T$  no denominador da expressão acima é a temperatura nuclear (MeV) para a produção de nêutrons em núcleos pesados. O primeiro termo corresponde aos nêutrons de evaporação e o segundo aos de emissão direta.

## 2.3 Interação dos nêutrons com a matéria

### 2.3.1 Formas de interação

Os nêutrons não possuem carga elétrica, logo, não interagem com campos eletromagnéticos. Deste modo, sua interação ocorre diretamente com os núcleos dos átomos (Figura 2.3). Os principais processos de interação podem ser classificados como: espalhamento e absorção (LAMARSH, 1966).

## Espalhamento:

- Espalhamento Elástico (n,n): A interação é dada por uma simples transferência de energia cinética e de momento, como o choque elástico de duas esferas rígidas. Neste caso, a estrutura nuclear não é alterada.
- Espalhamento Inelástico (n,n'): O nêutron incidente deve possuir energia superior a um limiar; um outro nêutron é emitido pelo núcleo composto, que atinge o seu estado fundamental emitindo, na maioria das vezes, raios gama.

## Absorção:

- Captura Radioativa: O núcleo quando atingido por um nêutron passa para um estado excitado energeticamente, atingindo a estabilidade pela emissão de um ou mais fótons ou partículas. Podem ocorrer reações do tipo (n,p); (n,2n); (n, γ) ou (n,α).
- Fissão Nuclear: O núcleo de um átomo pesado é separado em dois ou mais fragmentos quando atingido por um nêutron e, em geral, são produzidos dois ou três novos nêutrons.

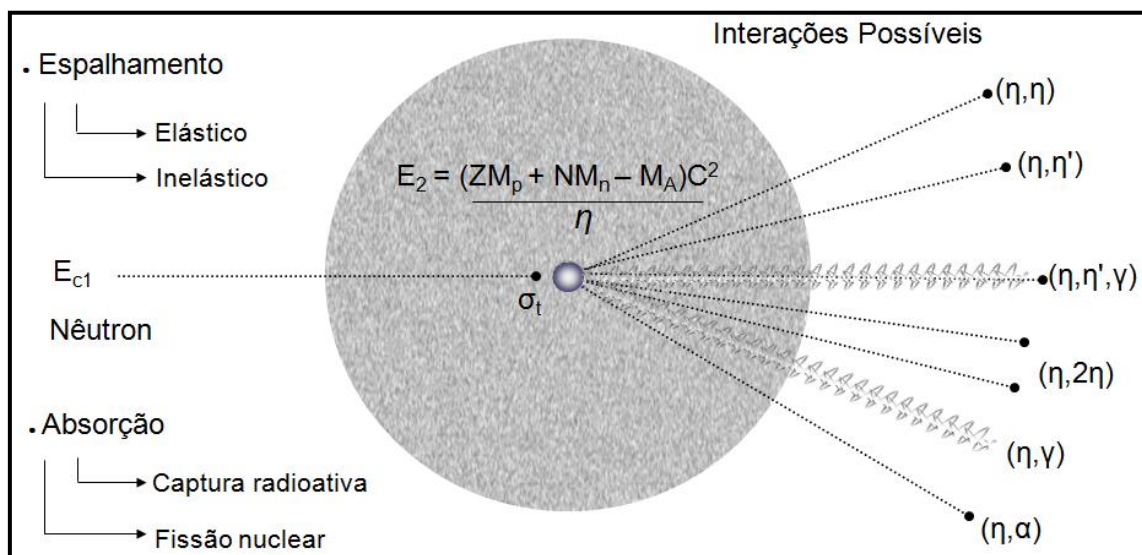


Figura 2.3 – Ilustração das principais interações dos nêutrons com a matéria.

### 2.3.2 Seção de choque para nêutrons

A probabilidade de ocorrência para a interação nêutron-núcleo é caracterizada por meio da seção de choque microscópica total ( $\sigma_t$ ). Esta pode ser interpretada como uma área efetiva que um núcleo alvo apresenta ao nêutron incidente, fornecendo a probabilidade de ocorrência de uma reação nuclear envolvendo um único nêutron. Os parâmetros que determinam o comportamento da seção de choque são: a energia dos nêutrons incidentes e a estrutura nuclear dada como alvo.

A unidade de seção de choque microscópica é o *barn* (b), medida em dimensões de área,  $1b = 10^{-24} \text{ cm}^2$ . A seção de choque microscópica total é dada por:

$$\sigma_t = \sigma_a + \sigma_e \quad (2 - 5)$$

onde  $\sigma_a$ , é seção de choque microscópica de absorção e,  $\sigma_e$ , é a seção de choque microscópica de espalhamento.

As seções de choque de absorção e de espalhamento ainda podem ser separadas em frações distintas inerentes a cada tipo de reação específica. Por exemplo, a seção de choque de absorção pode ser dividida em duas seções de choque microscópicas, uma de captura radioativa ( $\sigma_c$ ) e a outra de fissão ( $\sigma_f$ ). Já a seção de choque de espalhamento também pode ser separada em duas seções de choque microscópicas, uma de espalhamento elástico ( $\sigma_e$ ) e a outra de espalhamento inelástico ( $\sigma_i$ ). Logo, temos que a seção de choque total pode ser expressa como:

$$\sigma_t = (\sigma_c + \sigma_f) + (\sigma_e + \sigma_i) \quad (2 - 6)$$

### 2.3.3 Descrição matemática para a interação dos nêutrons com a matéria

Supondo que um alvo de espessura  $dx$  seja colocado no trajeto de um feixe unidirecional de nêutrons monoenergéticos com intensidade  $I_0$ , teremos assim, a seguinte situação ilustrada na Figura 2.4.

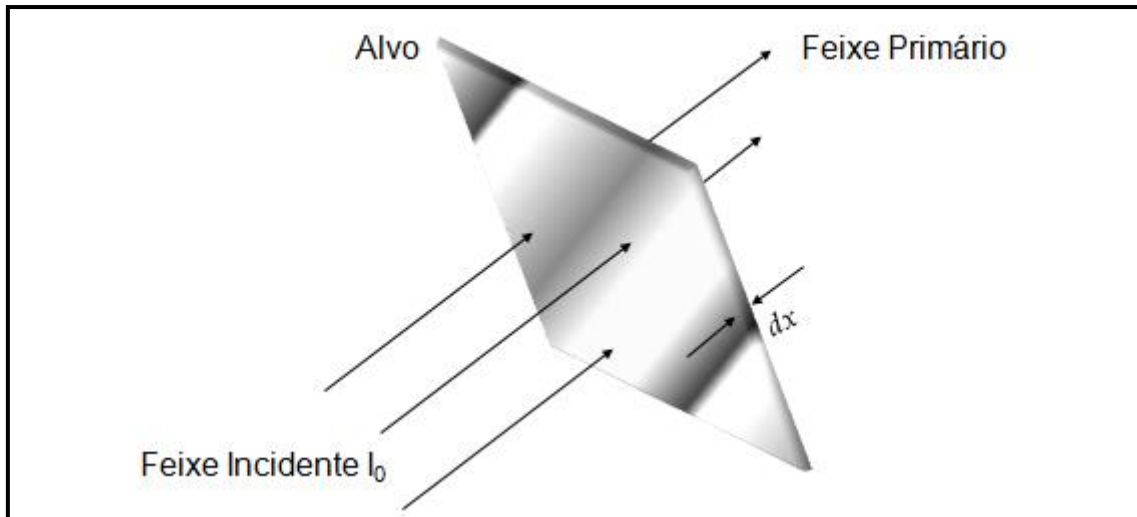


Figura 2.4 – Ilustração de um feixe unidirecional de nêutrons incidindo em um alvo.

Considerando que tanto o alvo quanto a região sensível de detecção sejam muito pequenos, pode-se dizer que o ângulo sólido formado pelo arranjo também é muito pequeno. Sendo assim, teoricamente, cada nêutron que interagir com o alvo, será descontado do feixe para fins de detecção. E somente os nêutrons que não interagirem irão alcançar o detector.

Sendo  $I(x)$  a intensidade dos nêutrons que não interagiram após penetrar uma distância  $dx$  no alvo (feixe primário),  $I_0$  a intensidade do feixe incidente,  $N$  a densidade nuclear do alvo e  $\sigma_t$  a seção de choque microscópica total no alvo. A seguinte relação para espessuras infinitesimais pode ser escrita (LAMARSH, 1966):

$$-dI(x) = N \sigma_t I(x) dx \quad (2 - 7)$$

Integrando a equação acima é possível descrever tal fenômeno para a escala macroscópica, obtendo assim a equação abaixo:

$$I(x) = I_0 e^{-N x \sigma_t} \quad (2 - 8)$$

O produto da densidade nuclear do alvo com a sua seção de choque microscópica total ( $\Sigma = N \cdot \sigma_t$ ) fornece a seção de choque macroscópica ( $\Sigma$ ), muito utilizada em equações teóricas de reatores. Apesar de normalmente  $\Sigma$  ser denominada como “seção de choque”,  $\Sigma$  não representa uma área, sendo expresso em unidades de  $\text{cm}^{-1}$  e pode, portanto, ser interpretado como um coeficiente de atenuação de nêutrons. Logo, a equação (2 - 7) pode ser reescrita como:

$$-dI(x) = \Sigma I(x) dx \quad \therefore \quad \frac{-dI(x)}{I(x)} = \Sigma dx \quad (2 - 9)$$

A quantidade  $dI(x)/I(x)$  na equação acima equivale a fração de nêutrons que interagem com o alvo após atravessarem uma distância  $x$  no mesmo. Deste modo, é possível dizer que  $\Sigma \cdot dx$  é a probabilidade de interação para um nêutron que atravessa uma espessura  $dx$  do alvo (LAMARSH, 1966).

### **2.3.4 Moderação dos nêutrons por colisões nucleares**

Ao interagir com a matéria por espalhamento, o nêutron cede parcialmente sua energia ao núcleo alvo. A este processo de transferência de energia dá-se o nome de moderação. Logo, qualquer material que apresente uma seção de choque de espalhamento será um moderador de nêutrons. Porém, os parâmetros que definem se o material alvo é um bom moderador (alta transferência de energia na colisão

nêutron-núcleo) ou não são: o ângulo de espalhamento do nêutron após a colisão com o núcleo e a massa atômica deste.

A equação que fornece a energia do nêutron após a colisão com o núcleo pode ser dada por DUDERSTADT e HAMILTON (1976):

$$E = E_0 \frac{A^2 + 2A(\cos\varphi) + 1}{(A + 1)^2} \quad (2 - 10)$$

onde 'E<sub>0</sub>' é a energia inicial do nêutron, 'A' é a massa atômica do material moderador e 'φ' o ângulo de espalhamento no referencial do centro de massa.

Para entender a relação entre o número de colisões necessárias para que um nêutron ceda uma determinada quantidade de energia ao material alvo, pode-se definir um parâmetro chamado perda média logarítmica que, como o nome diz, mede, para um dado material, a perda média de energia de um nêutron em escala logarítmica. Logo, para determinar em média quantas colisões seriam necessárias para reduzir a energia de um nêutron de E<sub>1</sub> para E<sub>2</sub>, basta calcular a razão (ZAMBONI, 2007):

$$\bar{N} = \frac{\ln E_1 - \ln E_2}{\xi} \quad (2 - 11)$$

onde E<sub>1</sub> e E<sub>2</sub> são, respectivamente, a energia inicial e final do nêutron após N colisões e 'ξ' é o parâmetro de perda média logarítmica.

Alguns valores típicos de ξ podem ser encontrados na Tabela 2.1, juntamente com uma estimativa do número médio de colisões necessárias para reduzir a energia de um nêutron de 2 MeV à faixa térmica (ou seja, E ~ 0,4 eV); como se pode perceber, elementos leves moderam o nêutron mais rapidamente de forma que o material mais eficaz para isso é o hidrogênio – por isso muitas vezes usa-se água ou parafina para este fim.

Tabela 2.1 – Valores da perda média de energia para alguns materiais; a última coluna ilustra quantas colisões seriam necessárias para reduzir a energia de um nêutron de 2 MeV à faixa térmica (ZAMBONI, 2007).

Material	Número de Massa	$\zeta$	$18,2/\zeta$
Hidrogênio	1	1	18
Deutério ( $^2\text{H}$ )	2	0,725	25
Hélio	4	0,425	43
Lítio	7	0,268	68
Berílio	9	0,209	87
Carbono	12	0,158	115
Oxigênio	16	0,120	152
Urânio	238	0,008	2172

#### 2.4 Classificação dos nêutrons quanto a faixa energética

De acordo com o tipo de processo físico com que os nêutrons são ejetados dos núcleos eles podem possuir vários valores possíveis de energia, como é o caso dos nêutrons produzidos por reações fotonucleares. Deste modo, a divisão de um espectro contínuo em faixas de energia se faz extremamente útil, tendo em vista que as propriedades de atenuação dos nêutrons variam dependendo do intervalo energético de interesse. Portanto, a divisão do espectro em faixas de energia não é algo rígido, podendo variar de acordo com a necessidade do estudo em questão. Neste caso, a classificação adotada foi a de GIBSON e PIESCH (1985):

- Abaixo de 0,4 eV são designados de nêutrons térmicos.
- Entre 0,4 eV e 100 keV se encontram os nêutrons epitérmicos.
- Acima de 100 keV são intitulados de nêutrons rápidos.



## 2.5 Noções básicas de grandezas radiológicas

### 2.5.1 Grandezas radiométricas

As grandezas radiométricas são utilizadas para caracterizar qualquer campo de irradiação, independentemente do tipo da radiação emitida (ATTIX, 1986).

#### 2.5.1.1 Fluência

A fluência ( $\Phi$ ) pode ser definida como o quociente do número de partículas incidentes  $dN$  sobre uma esfera de secção de área  $dA$ , expressa pela equação 2 - 12. O número de partículas  $N$  pode corresponder a partículas emitidas, transferidas ou recebidas. Esta grandeza é dada, no Sistema Internacional de Unidades (SI), em  $m^{-2}$ .

$$\Phi \equiv \frac{dN}{dA} \quad (2 - 12)$$

#### 2.5.1.2 Taxa de fluência

A taxa de fluência ( $\varphi$ ) pode ser definida como a taxa de variação da fluência em relação ao tempo, dada pelo quociente de  $d\Phi$  por  $dt$  (equação 2 - 13). A unidade no SI para a taxa de fluência é o  $m^{-2}s^{-1}$ .

$$\varphi \equiv \frac{d\Phi}{dt} \quad (2 - 13)$$

### 2.5.1.3 Fluência de energia

A fluência de energia ( $\psi$ ) pode ser definida como o quociente da energia radiante incidente  $dR$  sobre uma esfera de secção de área  $dA$ , evidenciada pela equação 2 - 14. No SI, sua unidade é dada em  $\text{Jm}^{-2}$ .

$$\psi \equiv \frac{dR}{dA} \quad (2 - 14)$$

### 2.5.1.4 Taxa de fluência de energia

A taxa de fluência ( $\omega$ ) de energia pode ser definida como taxa de variação da fluência de energia em relação ao tempo, dada pelo quociente de  $d\psi$  por  $dt$ , expandida na equação 2 - 15. Esta grandeza é dada, no SI, em  $\text{Jm}^{-2}\text{s}^{-1}$ .

$$\omega \equiv \frac{d\psi}{dt} \quad (2 - 15)$$

## 2.5.2 Grandezas dosimétricas

As grandezas dosimétricas são utilizadas para caracterizar a interação entre os campos de irradiação e o meio material (ATTIX, 1986).

### 2.5.2.1 Exposição

A exposição ( $X$ ) é definida como sendo o quociente de  $dQ$  por  $dm$ , onde  $dQ$  é o valor absoluto da carga total de íons de mesmo sinal produzidos no ar, quando todos os elétrons e pósitrons liberados pelos fótons no ar, em uma massa  $dm$ , são completamente freados no ar (equação 2 - 16). Sua unidade, no SI, é dada em  $\text{Ckg}^{-1}$ .

$$X \equiv \frac{dQ}{dm} \quad (2 - 16)$$

### 2.5.2.2 Kerma

Kerma (K) é uma abreviatura para *Kinetic Energy Released per unit of Mass*. É uma grandeza que quantifica a energia média transferida do campo de radiação para os elétrons do meio material onde ocorre a interação ( $\epsilon_{tr}$ ). Tal grandeza é definida como não estocástica e é somente aplicada às radiações indiretamente ionizantes, expressa pela equação 2 - 17. Sua unidade no SI é  $\text{Jkg}^{-1}$ , denominada gray (Gy).

$$K \equiv \frac{d\epsilon_{tr}}{dm} \quad (2 - 17)$$

### 2.5.2.3 Dose absorvida

A dose absorvida (D) é definida como a energia média depositada pela radiação ionizante ( $d\epsilon$ ) em um volume elementar de matéria de massa  $dm$ , dada pela equação 2 - 18. Sua unidade no SI é o gray (Gy).

$$D \equiv \frac{d\epsilon}{dm} \quad (2 - 18)$$

### 2.5.3 Grandezas de proteção radiológica

As grandezas de proteção radiológica são utilizadas para estimar o risco de ocorrência de efeitos estocásticos no homem após ser irradiado por um campo de radiação ionizante (ZAMBONI, 2007).

### 2.5.3.1 Dose equivalente

Grandeza expressa pelo somatório das doses absorvidas médias no tecido ou órgão ( $D_{T,R}$ ) ponderadas pelos fatores de peso de cada tipo de radiação ( $W_R$ ) envolvida no processo de deposição da dose (equação 2 - 19). Sua unidade no SI é o  $\text{Jkg}^{-1}$ , denominada sievert (Sv).

$$H_T = \sum_R D_{T,R} W_R \quad (2 - 19)$$

### 2.5.3.2 Dose efetiva

Grandeza expressa como sendo o somatório das doses equivalentes ponderadas nos diversos órgãos e tecidos devido à exposição à radiação ionizante, retratada na equação 2 - 20. Define-se  $H_T$  a dose equivalente no tecido ou órgão e  $W_T$  o fator de ponderação de órgão ou tecido. Sua unidade, no SI, é o sievert (Sv).

$$E = \sum_T H_T W_T \quad (2 - 20)$$

### 2.5.4 Grandezas operacionais

As grandezas operacionais são mensuráveis e todas definidas com base na grandeza equivalente de dose (H), sendo esta definida pela dose pontual. O equivalente de dose pode ser obtido pela equação 2 - 21, onde Q é o fator de qualidade da radiação e D é a dose absorvida infinitesimal. A unidade no SI é o sievert (Sv).

$$H \equiv DQ \quad (2 - 21)$$

#### **2.5.4.1 Equivalente de dose ambiente**

É o equivalente de dose produzido em um ponto situado a uma profundidade  $d$  no interior da esfera de referência ICRU submetida a um campo de radiação expandido e alinhado. Esta esfera possui 30 cm de diâmetro e é composta por material tecido equivalente. A profundidade recomendada é de 10 mm para radiação fortemente penetrante e 0,07 mm para radiação fracamente penetrante, sendo escrito como  $H^*(d)$ .

#### **2.5.4.2 Equivalente de dose direcional**

É o equivalente de dose produzido em um ponto localizado a uma profundidade  $d$  no interior da esfera ICRU em uma direção específica ( $\omega$ ) quando em um campo de radiação expandido. A profundidade recomendada é de 10 mm e 0,07 mm para radiações fortemente e fracamente penetrantes, respectivamente. O equivalente de dose direcional é representado por  $H'(d, \omega)$ .

#### **2.5.4.3 Equivalente de dose pessoal**

É o equivalente de dose produzido em um ponto específico a uma profundidade  $d$  do corpo humano. A profundidade recomendada para dose profunda é de 10 mm, podendo ser escrita como  $H_p(10)$ .

### **2.6 Cálculo da espessura das barreiras primárias**

A fração da barreira de uma sala de radioterapia onde há a incidência direta do feixe do acelerador é chamada de barreira primária (Figura 2.5). Como o *gantry*

(estrutura móvel do acelerador) gira 360°, uma fração das paredes, do teto e do chão estará incluída como sendo parte integrante da barreira primária ou cinturão primário.

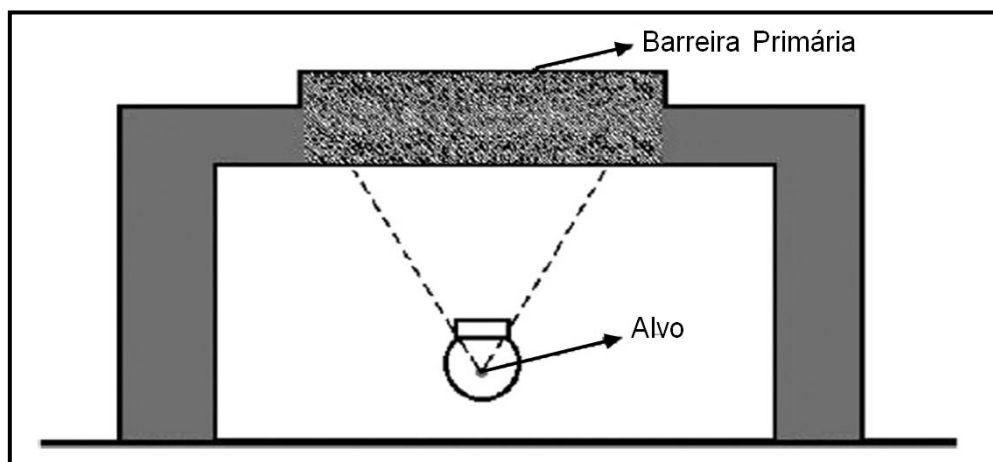


Figura 2.5 – Imagem da barreira primária no plano frontal de uma sala de radioterapia.

A transmissão da barreira necessária para reduzir a taxa de dose fora da sala de tratamento para valores inferiores ou iguais aos limites permitidos é dada por MCGINLEY (1998):

$$B_{\text{Trans}} = \frac{H_{\text{tr}}(d_{\text{prim}})^2}{WUT} \quad (2 - 22)$$

onde  $H_{\text{tr}}$  é a taxa de dose limite (Sv/semana);  $d_{\text{prim}}$  é a distância do isocentro (interseção do eixo do campo de irradiação com o eixo de rotação do *gantry* do acelerador linear) ao ponto a ser protegido, tipicamente entre 5 e 7 m;  $W$  é a carga de trabalho, dada no isocentro (Gy/semana);  $U$  é o fator de uso, fração do tempo que o feixe está voltado para cada uma das barreiras primárias, e  $T$  é o fator ocupacional, que leva em conta a ocupação da área a ser protegida.

No Brasil, a maioria dos projetistas de salas de tratamento radioterápico leva em conta o valor de  $W$  como sendo de 1000 Gy/semana, baseados no valor dado pela NCRP 49 (1976). Valores típicos de  $U$  podem ser:  $U$  (chão) = 3/7;  $U$  (teto) = 2/7;  $U$

(paredes) = 2/7. Para T, temos: T (escritórios) = 1; T (sala de controle) = 1; T (corredores) = 1/5; T (áreas desocupadas) = 1/40.

As espessuras das barreiras são então calculadas pela aplicação dos valores das TVL (camadas decirredutoras), baseado na energia dos fótons e no tipo de material da barreira. Neste caso o número n de TVLs é dado pela NCRP 151 (2005):

$$n = -\log(B_{Trans}) \quad (2 - 23)$$

Para valores típicos de distâncias  $d_{prim}$ , n varia entre 4 e 6, e a espessura L da barreira é dada por:

$$L = TVL_1 + (n - 1) TVL_e \quad (2 - 24)$$

onde a primeira camada decirredutora ( $TVL_1$ ) e as camada decirredutoras de equilíbrio ( $TVL_e$ ) foram utilizadas para levar em conta mudanças espectrais da radiação, como é o caso de interações dentro da barreira.

No caso de barreiras laminadas, a transmissão total do feixe de fótons produzidos pelo acelerador linear será o produto dos fatores de transmissão de cada material individual na barreira. Como por exemplo: concreto, ferro e chumbo (NCRP, 2005). No entanto, esta aproximação não considera que neste processo de interação dos fótons com a barreira irá ocorrer produção de fotonêutrons, se a energia dos fótons for suficiente, e a consequente produção de raios gama de captura, que ocorre devido à absorção de nêutrons no interior da própria barreira.

## 2.7 Cálculo do equivalente de dose nêutrons em barreiras laminadas

Como exposto anteriormente, existem alguns casos em que a barreira primária não é composta exclusivamente de concreto comum. Isso ocorre quando há uma

restrição no espaço disponível para construção ou adaptação da barreira. Nestes casos a busca por materiais de alto número atômico leva à utilização de materiais metálicos no intuito de se obter uma blindagem adequada. No entanto, a barreira composta por concreto e metal (geralmente o ferro ou o chumbo) pode se tornar uma fonte potencial de fotonêutrons, resultando em uma exposição adicional aquém e além da blindagem (MCGINLEY, 1992a e 1992b).

Um aspecto importante que deve ser relatado é que a radiação espalhada pela barreira primária não tem energia o suficiente para produzir fotonêutrons na barreira secundária. Além disso, a intensidade da radiação de fuga do cabeçote é muito pequena para produzir um número significativo de nêutrons seja qual for a barreira. Isso mostra que o problema de radioproteção gerado pela produção de nêutrons, fora das salas de radioterapia, em barreiras laminadas é, neste caso, exclusivo das mesmas (NCRP, 2005).

Os aceleradores lineares que potencialmente podem produzir os fotonêutrons em barreiras primárias laminadas são aqueles capazes de gerar fótons com energia superior ou igual a 10 MeV (FACURE *et al.*, 2008). Entretanto, a produção de fotonêutrons não depende somente da energia do acelerador, depende também do metal constituinte da barreira que influencia diretamente tal produção.

Atualmente, a ferramenta mais utilizada capaz de calcular as doses de nêutrons além das barreiras laminadas é dada por MCGINLEY (1992a e 1992b):

$$H_n = \left( \frac{D_0 R F_{max}}{\frac{t_m}{2} + t_2 + 0.3} \right) \left[ 10^{-\left(\frac{t_1}{TVL_X}\right)} \right] \left[ 10^{-\left(\frac{t_2}{TVL_n}\right)} \right] \quad (2 - 25)$$

onde 'H<sub>n</sub>' é o equivalente de dose ambiente de nêutron por semana (μSv.semana<sup>-1</sup>), 'D<sub>0</sub>' é a dose absorvida de raios-X por semana no isocentro (cGy.semana<sup>-1</sup>), 'R' é o coeficiente de produção de nêutrons (μSv.cGy<sup>-1</sup>.m<sup>-2</sup>), 'F<sub>max</sub>' é a área máxima do



tamanho de campo no isocentro ( $m^2$ ), ' $t_m$ ' é a espessura da lâmina metálica (m), ' $t_1$ ' é a espessura da primeira camada de concreto (m), ' $t_2$ ' é a espessura da segunda camada de concreto (m), '0,3' é a distância em metros da superfície externa da barreira ao ponto de ocupação, ' $TVL_x$ ' é a camada decirredutora em concreto para o feixe primário de raios-X (m) e ' $TVL_n$ ' é a camada decirredutora em concreto para o espectro de nêutrons ejetado da lâmina metálica.

Os únicos valores para o coeficiente R disponíveis na literatura foram medidos por MCGINLEY (1992a), com condições experimentais não detalhadas, em chumbo e ferro, e para feixes de 15 e 18 MV. Os valores obtidos pelas medições em aceleradores de 18 MV foram de 19 e  $1,7 \mu Sv.cGy^{-1}.m^{-2}$  em chumbo e ferro, respectivamente; já o valor de R diminui para  $3,5 \mu Sv.cGy^{-1}.m^{-2}$  em chumbo para aceleradores de 15 MV. Adicionalmente, o valor da  $TVL_n$  dado como 25 cm (NCRP, 2005) é descrito com uma estimativa conservadora, não sendo informado para qual energia e elemento metálico ele foi obtido.

A configuração básica de uma barreira primária laminada pode ser representada pela Figura 2.6, onde pode ser observada cada uma das espessuras  $t_1$ ,  $t_2$  e  $t_m$ . Na adaptação ou construção de barreiras primárias laminadas podem surgir casos particulares: como é o caso onde  $t_1$  ou  $t_2$  for igual a zero.

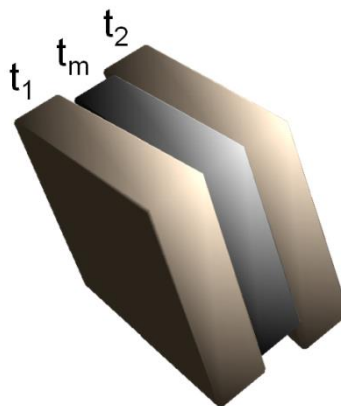


Figura 2.6 – Imagem da configuração de camadas de uma barreira primária laminada.

## 2.8 O método de Monte Carlo e o transporte da radiação na matéria

O método de Monte Carlo foi desenvolvido e consolidado em meados do século XX, no entanto, sua aplicação de modo efetivo iniciou-se somente nas últimas décadas. Atualmente, o método é utilizado para resolver problemas em diversos segmentos e sua aplicação visa simular problemas que podem ser representados por processos estocásticos. A crescente utilização do método foi impulsionada pelo rápido avanço no campo computacional, que permitiu um aumento notável da velocidade de processamento e da capacidade de armazenamento dos computadores. Curiosamente, o nome do método de 'Monte Carlo' foi dado por John Von Neumann e Stanislaw Marcin Ulam, fazendo referência ao distrito de Monte Carlo, localizado no Principado de Mônaco, porção sul da França. Essa associação foi feita porque o método baseia-se no uso de números aleatórios, assim como a roleta dos famosos cassinos de Monte Carlo (ZAIDI E SGOUROS, 2003).

O método de Monte Carlo é fundamentado em técnicas estatísticas e tem a finalidade de solucionar problemas no âmbito matemático e físico. Este método é geralmente utilizado para resolver problemas de natureza complexa e que são difíceis de serem modelados por métodos determinísticos. Em outras palavras, solucionar um problema com o Método de Monte Carlo consiste em realizar uma simulação matemática do fenômeno de interesse em vez de solucionar a equação ou conjunto de equações que o descreva. Para simular a evolução do fenômeno e estimar as respostas desejadas através de médias, o programa de Monte Carlo é alimentado por um gerador de números "aleatórios" utilizado para a amostragem dos vários eventos que ocorrem durante os processos de interesse. Essas amostragens são realizadas através das funções de distribuição de probabilidade conhecidas e que caracterizam os processos referentes aos fenômenos em questão. De forma resumida, a aplicação do método consiste na criação de um modelo do fenômeno de interesse e sua representação através funções de distribuição de probabilidade (SWEEZY *et al*, 2003).

Para solucionar problemas de transporte de radiação na matéria, o método de Monte Carlo é utilizado para simular o transporte individual e sequencial de cada uma das partículas de radiação envolvidas em um determinado cenário (Figura 2.7). A cada história – conjunto de eventos produzidos por uma partícula desde seu "nascimento" até sua "morte" –, todas as informações referentes ao processo de transporte de uma partícula simulada são armazenadas (processo estocástico). Dessa forma, grandezas de interesse podem ser estimadas a partir do comportamento médio obtido dos eventos individuais de cada partícula.

A Figura 2.7 representa hipoteticamente a história de um único fóton que incide sobre uma placa atenuadora. Na interação 1, o fóton incidente sofre um espalhamento Compton. O evento 2 é representado por um fóton de *bremstrahlung*. Em '3' o elétron deposita o restante de sua energia no meio. A interação 4 representa a absorção do fóton e produção de um par elétron-pósitron. No fenômeno 5, o pósitron deposita toda sua energia no material e depois é aniquilado produzindo dois fótons gama de 511 keV que escapam do meio atenuador. O caso 6 representa uma deposição parcial da energia do elétron no meio e um consecutivo escape desta partícula.

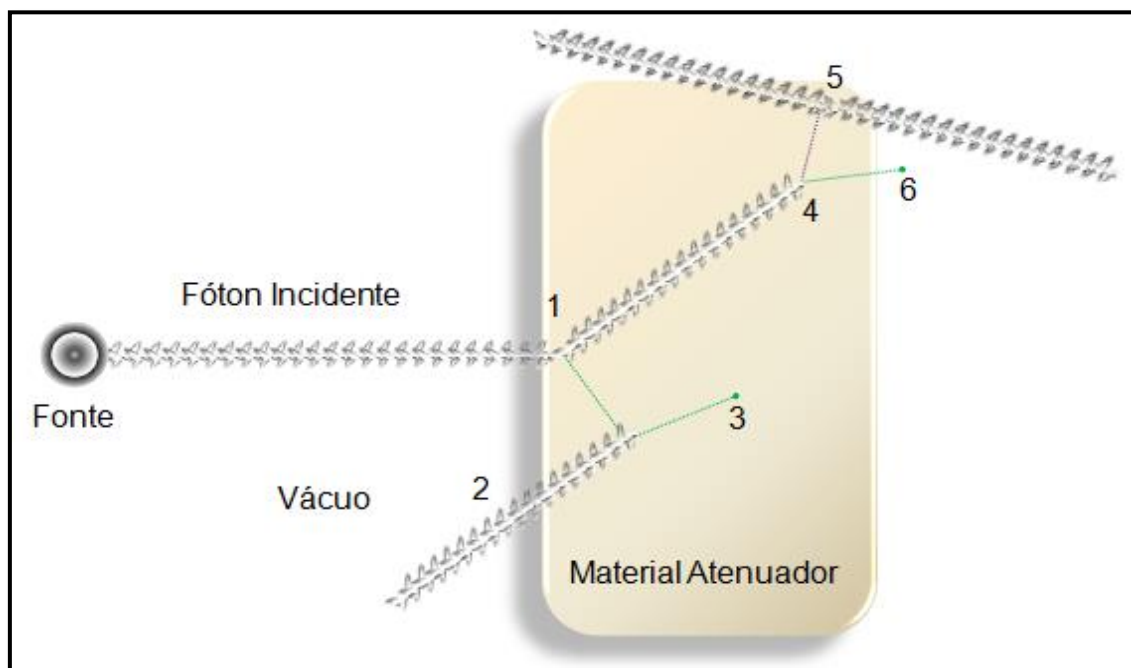


Figura 2.7 - Representação hipotética da história de um único fóton que incide sobre uma placa atenuadora.

Segundo EISBERG e RESNICK (1994), a probabilidade total de encontrar uma partícula – caso ela exista – em algum ponto de todo o eixo  $x$  é dada por:

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi dx = 1 \quad (2 - 26)$$

onde  $P(x)$  é a função de densidade de probabilidade normalizada definida em  $x$ ,  $\Psi$  é a função de onda associada à partícula e  $\Psi^*$  é o seu complexo conjugado.

Caso  $P(x)$  seja utilizado para calcular a probabilidade  $f$  de encontrar uma partícula em um dado intervalo no eixo  $x$ , temos que:

$$\int_a^b P(x)dx = \int_a^b \Psi^* \Psi dx = f, \quad \text{onde } f \leq 1 \quad (2 - 27)$$

Associada às funções supracitadas, existe uma função denominada probabilidade cumulativa. Esta determina a distribuição de probabilidade de uma variável aleatória  $K$ . Tal função pode ser definida como (WALCK, 2007):

$$P_c(x) = \int_{-\infty}^x P(t)dt \quad \therefore \quad P_c(x_1 < \kappa \leq x_2) = \int_{x_1}^{x_2} P(t)dt \quad (2 - 28)$$

onde  $P_c$  representa a função de probabilidade cumulativa,  $P(t)$  a função densidade de probabilidade,  $x_1$  e  $x_2$  são os limites de integração.

Para realizar amostragens das funções de probabilidade cumulativa, podemos relacioná-las com números aleatórios uniformemente distribuídos. Existem vários métodos para geração de tais números, sendo que alguns desses lançam mão de processos físicos – o decaimento radioativo, por exemplo – para gerar números genuinamente aleatórios. Entretanto, além de não ser muito prático, este método geraria números insuficientes para alimentar um programa de Monte Carlo, que pode

utilizar entre  $10^7$  e  $10^{12}$  números aleatórios em uma simulação típica (ZAIDI E SGOUROS, 2003). Logo, em vez de usar um gerador de números aleatórios, a maioria das aplicações pode ser feita com um gerador de números pseudoaleatórios. Apesar de os números pseudoaleatórios serem considerados "aleatórios", eles são obtidos por técnicas determinísticas, ou seja, gerados por algoritmos. A grande vantagem de utilizar um gerador de números pseudoaleatórios é que estes podem ser gerados rapidamente por um computador, sendo uma ferramenta fundamental em programas que utilizem o método de Monte Carlo (GENTLE, 2003).

Os geradores congruentes lineares são os algoritmos mais utilizados para a geração de números pseudoaleatórios. Sua fórmula é dada por LEHMER (1951):

$$x_{n+1} \equiv (ax_n + c) \text{ mod } m, \quad 0 \leq x_{n+1} < m \quad (2 - 29)$$

onde  $x_{n+1}$  é o número aleatório a ser gerado,  $x_n$  é o número anterior da sequência numérica,  $a$  e  $c$  são constantes inteiras, 'mod  $m$ ' representa a operação modular de  $m$ .

Para que os números pseudoaleatórios possam ser gerados, faz-se necessário uso de uma semente inicial ( $x_0$ ) que deve ser fornecida de alguma forma. A escolha dos parâmetros  $a$ ,  $c$  e  $m$  deve ser feita de modo cuidadoso, pois será ela que determinará o tamanho do período da sequência numérica. Além disso, para que possamos ter um bom gerador de números pseudoaleatórios, certas propriedades devem ser satisfeitas, algumas delas são: uniformidade, um período longo e repetição.

Existem várias outras técnicas de geração de números pseudoaleatórios, porém, as técnicas comumente utilizadas em programas de Monte Carlo são: geradores de atraso de Fibonacci, geradores de registradores de deslocamento e geradores híbridos (MARSAGLIA, 1985, JAIN, 1991).

Agora, tendo em mãos um algoritmo de geração de números aleatórios e o conhecimento das funções de distribuição de probabilidade – previamente descritas –

que descrevem os processos físicos de interesse, é possível desenvolver técnicas de amostragem que estabeleçam uma ponte entre as funções de probabilidade e os números pseudoaleatórios (YORIYAZ, 2009).

Segundo ZAMBONI (2007), o processo de amostragem é descrito pelo teorema fundamental da inversão, dado por:

*“Seja  $x$  uma variável randômica com função densidade de probabilidade  $P(x)$  e função de probabilidade cumulativa  $P_c(x)$  e seja  $r^*$  um número randômico uniformemente distribuído amostrado no intervalo  $(0, 1)$ . Então a probabilidade de escolher  $x^*$  é  $P(x^*)$  sendo que  $x^*$  é definido tal que:”*

$$r^* = P_c(x^*) = \int_{-\infty}^{x^*} P(x) dx \quad (2 - 30)$$

Um exemplo prático dessa técnica é determinar a distância  $D^*$  entre duas interações de um fóton em um meio atenuador qualquer. A probabilidade  $P_1$  de um fóton interagir ao longo da distância  $t$  e a probabilidade  $P_2$  que o fóton interaja por unidade de distância, respectivamente, são:

$$P_1 = 1 - e^{-\mu t} \quad e \quad P_2 = \mu e^{-\mu x} \quad (2 - 31)$$

onde  $\mu$  é coeficiente de atenuação linear e  $x$  representa a distância que o fóton percorreu desde sua origem.

Logo, a probabilidade condicional  $P(x | x \leq t)$  que o fóton interaja após viajar a distância  $x$  é:

$$P(x | x \leq t) = \frac{P_2}{P_1} \quad (2 - 32)$$

De acordo com o teorema fundamental da inversão, a distância  $D^*$  entre duas interações de um fóton em um absorvedor é dada como:

$$r^* = P_c(x^*) = \int_0^{D^*} \frac{\mu e^{-\mu x}}{1 - e^{-\mu t}} dx \quad (2 - 33)$$

$$P_c^{-1}(x^*) = D^* = \frac{1}{-\mu} \ln[1 - r^*(1 - e^{-\mu t})] \quad (2 - 34)$$

A técnica descrita acima requer que  $P(x)$  seja integrável e que a função  $r^*$  possa ser invertida para que seja aplicada. Caso uma das condições supracitadas não seja satisfeita, podemos optar por um método chamado de amostragem por rejeição (ZAMBONI, 2007). Esse método consiste em definir um máximo ( $M$ ), em um intervalo  $[a, b]$ , para uma função densidade de probabilidade  $P(x)$  que possa ser calculada diretamente. Definidos o máximo e o intervalo, um algoritmo define quais pontos da amostragem que serão aceitos e quais pontos serão descartados (Figura 2.8):

- 1ª Gere dois números randômicos  $r_1^*$  e  $r_2^* \in [0, 1]$ ;
- 2ª Calcule  $x^* = a + (b - a) r_1^*$ ;
- 3ª Aceitar  $x^*$  se  $r_2^* \leq P(x^*) / M$ , senão retornar para a 1ª etapa.

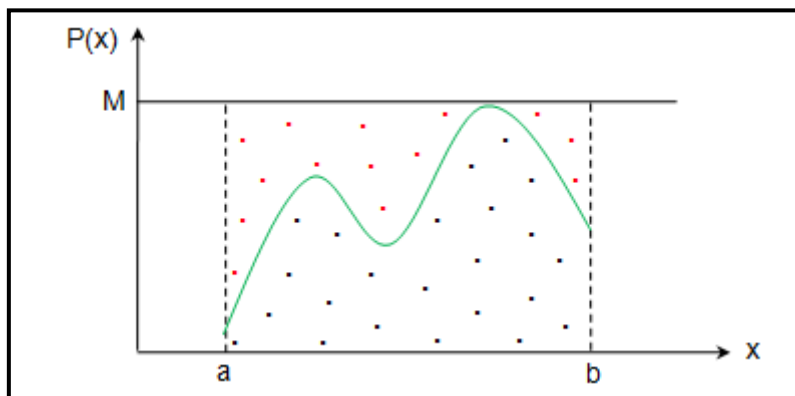


Figura 2.8 - Distribuição aleatória de pontos para a amostragem de  $P(x)$ .

As aplicações dessas técnicas são abrangentes, variando desde casos gerais até os casos mais específicos, como no transporte da radiação na matéria. Além disso, cabe ressaltar que existem outras técnicas de amostragem, bem como novos desenvolvimentos teóricos na área (KALOS e WHITLOCK, 1986).

## 2.9 O Código MCNP

O MCNP – Monte Carlo N-Particle – é um código baseado no método de Monte Carlo e tem como objetivo simular o transporte da radiação na matéria. Sua origem remonta à década de 1970, mais precisamente ao período entre os anos de 1973 e 1977 (SWEEZY *et al.*, 2003). Nesse intervalo de 4 anos, o MCNP teve sua gênese a partir da fusão dos códigos MCN, MCG e MCP (CASHWELL, 1973). Tais códigos eram independentes e cada um realizava o transporte de um único tipo de partícula: nêutron, gama ou fóton. O objetivo dessa união de códigos era basicamente produzir um que fosse mais abrangente e que realizasse o transporte simples ou acoplado dessas partículas em um só pacote de simulação. Em 1983 foi lançada a primeira versão internacional do MCNP, o MCNP3, distribuído pela *Radiation Shielding and Information Center, Oak Ridge, Tennessee, USA*. Ainda nos anos de 1980, foram lançadas as versões MCNP3A, em 1986, e MCNP3B, em 1988. Todas as versões lançadas nessa década foram inteiramente reescritas em ANSI Fortran 77 e possuíam recursos adicionais, tais como: plotagem gráfica e generalização de fontes e superfícies (SWEEZY *et al.*, 2003).

A versão comercial MCNP4 foi lançada em 1990 e foi a primeira versão do código para a plataforma UNIX. Essa versão do código MCNP incluiu o transporte de elétrons advindo do código ITS, do acrônimo em inglês, *Integrate Tiger Series* (HALBLIEB e MEHLHORN, 1984). Além disso, tal código acrescentou o comando de saída de altura de pulso, aproximação do fenômeno *bremsstrahlung* para o transporte de fótons em alvos espessos, representação de detectores, bem como a opção de



transporte determinístico (DXTRAN) com tratamento térmico  $S(\alpha, \beta)$ . As versões posteriores do código (MCNP4A, MCNP4B e MCNP4C) foram lançadas em 1993, 1997 e 2000, respectivamente. Essas versões trouxeram novas opções de comando, melhores aproximações dos fenômenos físicos envolvidos e a possibilidade de processamento paralelo do código em *clusters* – aglomerado de computadores.

Em 2003, a versão MCNP5 foi lançada totalmente reescrita em ANSI Fortran 90. Essa versão incluiu reações fotonucleares, uma técnica de divisão temporal para redução de variância e apresentou aprimoramento no comando *plot*. Além disso, o MCNP5 possibilitou melhorias no sistema de processamento paralelo com o suporte adicional para OpenMP e MPI, do acrônimo em inglês, *Open Multi-Processing* e *Message Passing Interface* (SWEEZY *et al.*, 2003).

A maior extensão do código MCNP é conhecida como MCNPX – Monte Carlo N-Particle eXtended. O esforço para criação dessa extensão começou em 1994, quando alguns grupos de Los Alamos X, T e LANSCE (*Los Alamos Neutron Science Center*) propuseram um programa de simulação para auxiliar no projeto do acelerador de produção de trítio, no laboratório nacional de Los Alamos, EUA (WATERS *et al.*, 1999). O MCNPX é totalmente escrito em ANSI Fortran 90 e foi desenvolvido no intuito de realizar o transporte de praticamente todas as partículas para quase todas as faixas energéticas viáveis. Desde sua criação, o MCNPX foi evoluindo a cada nova versão lançada, sendo suas últimas a 2.6 e 2.7, lançadas em 2008 e 2011, respectivamente. Os principais incrementos dessas versões são: fontes com feixes focalizados, separação dos comandos de saída em várias componentes, fontes incorporadas, controle da tabela de energia para o poder de freamento (*stopping power*), entre outras (PELOWITZ *et al.*, 2011).

Uma das grandes vantagens do código MCNP é o amplo leque de possibilidades na criação de geometrias, podendo ser das mais simples às mais complexas. Deste modo, o código se adapta tanto aos problemas que exigem geometrias simples quanto aos que exigem a criação de estruturas muito complexas.

Além disso, o código conta com vastas bibliotecas de seção de choque (pontuais, discretas ou multigrupo) e informações relevantes sobre a maioria dos elementos químicos – incluindo seus isótopos.

Para as simulações realizadas neste trabalho, foi utilizado código MCNPX versão 2.6. O motivo pelo qual o MCNPX foi escolhido reside não só em sua robustez computacional que inclui bibliotecas de seção de choque mais abrangentes, como também em sua fluidez, pois não trava quando uma seção de choque não é encontrada.

### **2.9.1 Estrutura dos dados de entrada do MCNP**

Para que seja executada uma simulação no código MCNP, não é necessário modificar o código fonte do programa, basta inserir um arquivo de entrada (*input*) contendo uma série de comandos dispostos em uma estrutura específica. Tal arquivo deve conter, em suas linhas de comando, todas as informações que descrevam o problema, permitindo ao usuário especificar o tipo de fonte, de detector, a configuração geométrica e as condições gerais do mesmo. O arquivo de entrada do MCNP é estruturado em três grandes blocos – ou cartões – distintos, mas que são intrinsecamente relacionados. O primeiro dos blocos é o de células, o segundo é de superfícies e, por último, o bloco de dados. A forma do arquivo de entrada pode ser visto na Figura 2.9.

O bloco de células ou cartão de células é responsável não só pela criação de elementos volumétricos que caracterizam a geometria do problema, como também é responsável por informações que descrevem tais elementos. Uma célula pode ser gerada a partir da interseção, união, e/ou complemento de superfícies, formando sólidos. Ademais, o comando de geração das células permite a descrição do material que as constitui, bem como a definição das importâncias de cada tipo de partícula que

interage dentro da célula descrita – essas importâncias são utilizadas para manipular determinadas interações físicas de acordo com as necessidades do usuário.

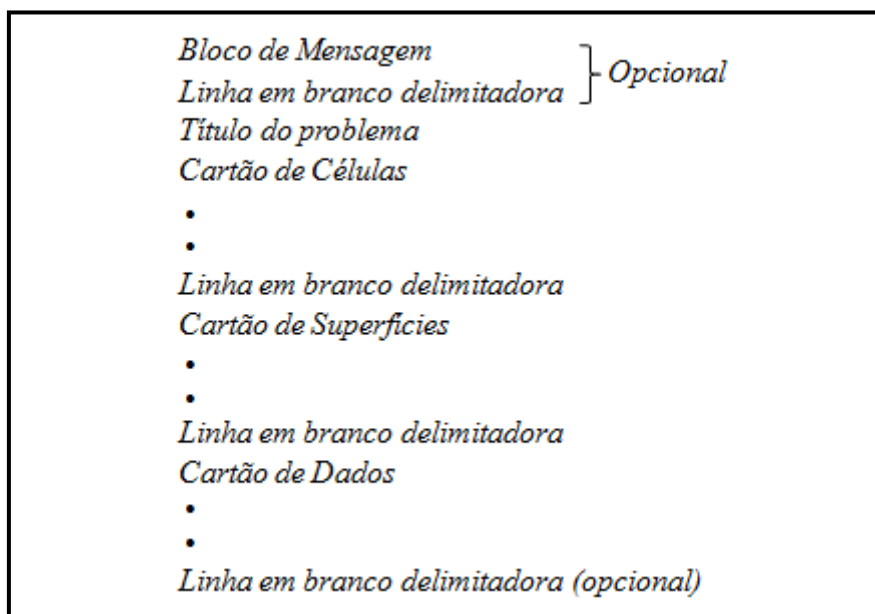


Figura 2.9 – Ilustração da estrutura de um arquivo de entrada do MCNP.

O cartão de superfícies é o local onde são geradas e definidas as superfícies no MCNP, ou seja, é a parte dos dados de entrada em que são selecionadas as formas a serem utilizadas na representação geométrica do problema. Este bloco utiliza o sistema de coordenadas cartesianas em três dimensões (x, y, z) e as superfícies podem variar desde simples planos até as formas mais complexas. Para compor uma superfície, o código lança mão de indicadores mnemônicos alfabéticos que identificam o tipo de superfície requerida – por exemplo, PX representa um plano que passa pelo eixo x e S representa uma esfera qualquer.

O cartão de dados é a estrutura no arquivo de entrada onde são definidos os tipos de transporte das partículas (transporte simples ou acoplado), as propriedades físicas dos materiais envolvidos, as especificações sobre a fonte, determinação dos parâmetros de saída no MCNP e o limite de execução para uma simulação.

O MCNP possibilita a escolha de diferentes modos de transporte de partículas: o transporte simples de nêutrons, fótons e elétrons ou o transporte acoplado entre essas partículas. A seleção do tipo de transporte deve ser representada pelas letras N (nêutrons), P (fótons) e E (elétrons) separadamente ou em conjunto.

A especificação dos materiais envolvidos em uma simulação é dada pela composição isotópica de todos os elementos que compõem um dado material – identificando o número atômico e a massa – e pela classificação das seções de choque – seções de choque discretas, pontuais ou multigrupo.

O comando para a configuração da fonte é dado escolhendo-se a posição da mesma (x, y, z), o espectro energético emitido por ela, o peso da partícula emitida, o tempo de emissão (caso necessário), a direção e a forma do feixe, e o tipo de radiação emitido por ela.

A determinação dos parâmetros de saída – *tally* – serve para especificar o que o usuário quer obter (a grandeza de interesse) do problema a ser simulado no MCNP. Caso seja o interesse do usuário obter mais de uma informação em uma única simulação, este pode especificar quantos detectores forem necessários. Os detectores são configurados por uma mnemônica alfanumérica que identifica o tipo de grandeza requerida – podendo ser a corrente de partículas em uma superfície ou até mesmo o fluxo de partículas em um determinado ponto. Além disso, deve ser especificado se serão necessárias informações adicionais como: a identificação das energias de interesse e a inclusão de fatores de conversão para obtenção de outra grandeza – por exemplo, conversão do fluxo de nêutrons para o equivalente de dose dessa partícula.

Por fim, os limites de execução de uma simulação são utilizados para especificar até quando uma simulação deve ser realizada. Assim, a execução de uma simulação termina quando o limite imposto for alcançado. Os limites podem ser determinados pelo número histórias, pelo tempo de simulação ou até mesmo se baseando em um valor de incerteza a ser atingido.

## 2.9.2 Variância no MCNP

A variância é basicamente uma medida da dispersão dos dados, indicando o quão longe eles se encontram do valor esperado. Neste tópico, a variância será analisada sob a perspectiva do MCNP. Logo, os aspectos que influenciarão essa grandeza estatística serão atrelados ao universo do transporte de radiação na matéria.

Nas simulações do MCNP, a  $i$ -ésima história contribui para uma contagem  $x_i$  no detector. Deste modo, a probabilidade de uma história qualquer contribuir para uma contagem entre  $x$  e  $x + dx$  pode ser dada por  $p(x)dx$ , onde  $p(x)$  é a função de distribuição de probabilidade. Logo, o valor esperado de  $x$  pode ser definido como (SWEEZY *et al.*, 2003):

$$\langle x \rangle \equiv \int_0^{\infty} x p(x) dx \quad (2 - 35)$$

Para um número de histórias elevado ( $N \rightarrow \infty$ ), podemos fazer uma aproximação do valor médio da contagem de partículas ( $\bar{x}$ ) pelo valor esperado de  $x$ , logo:

$$\bar{x} \rightarrow \langle x \rangle \equiv \int_0^{\infty} x p(x) dx \leftrightarrow \langle x \rangle \cong \bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i \quad (2 - 36)$$

E a variância ( $S^2$ ) das diferentes contagens pode ser dada por:

$$S^2 \equiv \frac{1}{N - 1} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2 \cong \overline{x^2} - \bar{x}^2 \quad (2 - 37)$$

onde

$$\overline{x^2} \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i^2 \quad (2 - 38)$$

Logo, a variância estimada a partir do valor médio das contagens é dada por:

$$S_{\bar{x}}^2 = \frac{1}{N} S^2 \quad (2 - 39)$$

### 2.9.3 Erro relativo

Em qualquer método de redução de variância, é possível mudar alguns parâmetros da simulação e, conseqüentemente, alterar a distribuição de probabilidade  $p(x)$ , de modo a produzir menos contagens nulas por história e, além disso, torná-las mais concentradas sobre sua média. Fazendo  $p(x)$  mais concentrado em torno da média, a variância será menor e, por conseguinte, a média mais precisa. O mais importante dos processos estatísticos realizados pelo MCNP é o erro relativo (R), dado pela equação abaixo (SWEEZY *et al.*, 2003):

$$R \equiv \frac{S_{\bar{x}}}{\bar{x}} \quad \therefore \quad R = \frac{\sigma}{\bar{x}\sqrt{N}} \quad (2 - 40)$$

Das equações (2 - 38) e (2 - 39) podemos mostrar que  $R \sim 1/N^{1/2}$ , assim, fica óbvio observar que o comportamento de queda do erro relativo obedece um comportamento assintótico. Logo, não faz sentido aumentar o número de histórias se o erro relativo já estiver próximo ao valor de saturação. A partir daí, se faz necessário o uso de técnicas de redução de variância para otimizar a queda do erro relativo.

As técnicas de redução de variância são utilizadas no MCNP a fim de reduzir o tempo computacional e a incerteza dos resultados. Para isso, são utilizados artifícios

que promovem a redução da variância relacionada ao processo estatístico que está ligado à incerteza do resultado.

#### **2.9.4 Técnica de redução de variância por divisão geométrica com roleta russa**

A técnica de redução da variância por divisão geométrica é uma técnica que se baseia na divisão forçada do número de partículas à medida que estas atravessam um meio material. Deste modo é produzida uma maior contagem no detector alvo e, conseqüentemente, menores incertezas associadas ao resultado final (SWEEZY *et al.*, 2003).

Para tal, o sólido atenuador deve ser seccionado em fatias em planos transversais em relação ao plano compartilhado pela combinação fonte-detector. Cada seção ou fatia deverá ser representada por uma célula e a cada uma destas será atribuída uma importância (fator de multiplicação), de modo que seja realizada uma distribuição crescente de importâncias até o fim do material. Para que possa ocorrer corretamente a multiplicação das partículas, a região de baixas importâncias deve estar próxima à fonte e, do lado oposto, a região de maior importância deve estar próxima ao detector.

Quando uma partícula emitida pela fonte se move em direção a uma região de maior importância, esta se divide em  $n$  partículas de acordo com a razão de  $I_M/I_m$ , onde  $I_M$  é a maior importância e  $I_m$  é a menor. Por exemplo, se  $I_M/I_m$  for igual a 3,8 uma partícula inicial se divide em 4 partículas com uma probabilidade de 80% e em 3 partículas com 20% de probabilidade. Caso a partícula volte para uma região de importância mais baixa ela é eliminada prevenindo a perda de tempo computacional, uma vez que a probabilidade de que essa partícula teria em contribuir com uma contagem é extremamente baixa.

A intenção por trás da divisão de partículas pela aplicação da razão  $I_M/I_m$  é manter a população das partículas constante, no intuito de conservar a fluência destas ao longo do material atenuador até a região de detecção. Cabe ressaltar que as importâncias adjacentes devem apresentar uma razão  $I_M/I_m$  inferior a 8, pois assim a natureza física do transporte da radiação na matéria não seria deturpado. Logo, a espessura entre as células deve ser escolhida de modo que a razão não ultrapasse 8.

No intuito de aumentar o número de partículas para melhorar a amostragem, o resultado final obtido pelo detector poderia ser alterado. Para contornar tal problema, é atribuída a cada partícula um peso inicial  $w$ . Peso este que é redistribuído de maneira conservativa à medida que uma partícula se divide em duas ou mais ao atravessar uma superfície. Assim, se uma partícula interage com o detector alvo, seu resultado registrado será igual ao percentual de peso que ainda restou multiplicado pelo valor que seria registrado no detector sem a aplicação de deste método.

A Figura 2.10 ilustra a aplicação da técnica de divisão geométrica quando uma partícula hipotética se move de uma célula com baixa importância para outra célula com maior importância. Pode-se observar que o peso das partículas é conservado no processo de divisão.

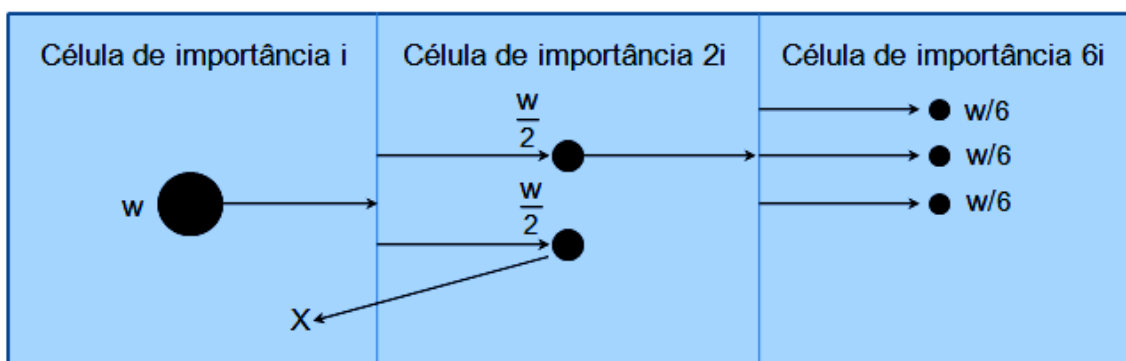


Figura 2.10 - Ilustração da aplicação da técnica de divisão geométrica.

O processo de roleta russa se aplica às partículas que retornam para a região de baixa importância. Neste caso, a partícula que retorna para uma célula de mais



baixa importância tem uma probabilidade  $p = I_m/I_M$  de continuar no processo e uma probabilidade  $1 - p$  de ser eliminada. Caso a partícula permaneça no processo, esta possuirá um peso  $w' = w (I_M/I_m)$ . A Figura 2.11 ilustra o processo de roleta russa.

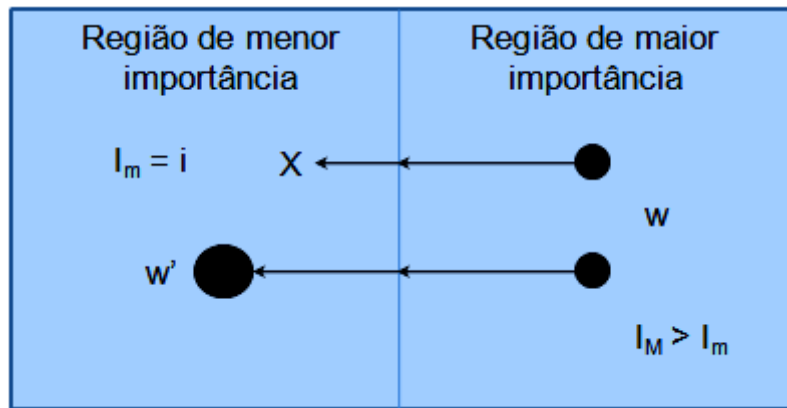


Figura 2.11 - Ilustração do processo de roleta russa

Logo, ao ser implementado o processo de roleta russa junto à técnica de divisão geométrica, as partículas que antes seriam imediatamente perdidas caso voltassem para regiões de baixa importância, ainda podem ter uma chance de voltar a participar do processo de interação novamente (SWEEZY *et al.*, 2003).

## 2.10 Redes neurais artificiais: Visão Geral

Segundo Sage (SAGE, 1990), o objetivo da inteligência artificial é o desenvolvimento de paradigmas ou algoritmos destinados às máquinas, de maneira que estas possam realizar tarefas cognitivas.

A ideia por trás da construção de uma máquina inteligente baseada em neurônios artificiais não é nova, tampouco recente. O trabalho no campo de redes neurais teve seu tempo áureo na década de 1940, inspirado por neurocientistas como Donald Oldin Hebb e Warren Sturgis McCulloch. Não menos importante, Walter Pitts, foi responsável pela unificação dos estudos de neurofisiologia e da lógica computacional. Todavia, na década de 1970, alguns fatores levaram ao

esmorecimento do interesse continuado em redes neuronais, sendo o principal deles a publicação de Minsky e Papert, expondo as limitações de aprendizagem dos perceptrons (MINSKY e PAPERT, 1969). Na década de 1980 as redes neuronais ganharam um novo fôlego com o advento das redes de Hopfield (HOPFIELD, 1982) e do algoritmo de retropropagação (RUMELHART *et al.*, 1986). Desde então, as redes neuronais artificiais continuaram a crescer em teoria, projeto e aplicações.

O funcionamento do sistema nervoso humano se baseia em diminutas unidades denominadas neurônios. Tais unidades são capazes de receber, processar e enviar sinais às outras unidades, formando assim uma malha intrincada de processamento de informações. O cérebro humano é um computador altamente complexo, não-linear e paralelo, que contém um enorme número de neurônios, da ordem de dezenas de bilhões. A atividade coordenada dessa miríade de neurônios é responsável por todas as funções do sistema nervoso, mediando desde funções primitivas até a complexa percepção do meio externo (AIRES, 1999).

A capacidade do processamento cerebral reside em sua organização estrutural única, formando sistemas especializados de processamento em paralelo, podendo executar assim diferentes funções e em diferentes graus de complexidade. Além disso, esse artefato biológico compreende a função de armazenar informação do meio para utilizá-la em benefício próprio, o que chamamos de experiência.

É imprescindível reconhecer que os níveis estruturais de organização do cérebro humano são uma característica singular. Eles não são encontrados em computadores digitais e estamos longe de recriá-los com redes neuronais artificiais. Logo, as redes neuronais artificiais foram concebidas não para imitar um cérebro humano, mas sim inspiradas neste para a resolução de problemas de ordem cognitiva, para os quais a arquitetura cerebral é extremamente efetiva. Tais quais diferentes áreas do cérebro atuam para desempenhar funções distintas, as arquiteturas possíveis de uma rede neuronal artificial podem variar de acordo com o problema em questão.

Tornando assim, uma máquina inspirada na estrutura cerebral uma ferramenta extremamente flexível e poderosa.

## 2.11 Unidade funcional básica da estrutura cerebral: o neurônio

O tecido do sistema nervoso é composto por dois tipos de células altamente especializadas: os neurônios e as células da glia (EKMAN, 2008). Os neurônios são as unidades funcionais básicas do cérebro, sendo caracterizados pela capacidade de receber, processar e transmitir sinais sob a forma de impulsos elétricos. Já as células da glia desempenham funções auxiliares no sistema nervoso a fim de prover um ambiente propício às atividades neuronais, constituindo elementos de defesa, modulação, sustentação e revestimento. Os neurônios compartilham características morfológicas comuns, sendo estas: corpo celular, núcleo, dendritos, axônio e ramificações terminais do axônio (EKMAN, 2008). Todas essas características remetem à função de propagação e processamento de sinais elétricos. Os dendritos têm a função de receber os impulsos elétricos de outros neurônios e conduzi-los ao corpo celular para que sejam processados e retransmitidos pelo axônio até serem liberados pelos terminais neuronais (EKMAN, 2008). A Figura 2.12 ilustra um neurônio típico e seus elementos básicos.

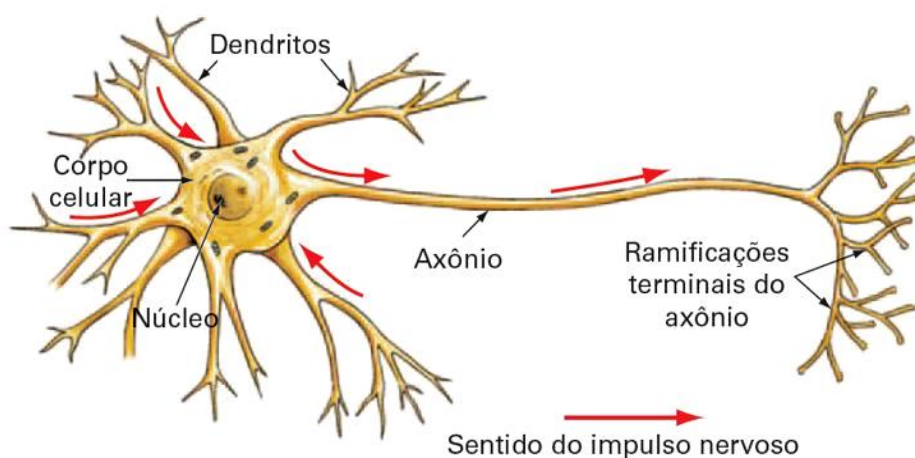


Figura 2.12 – Os elementos básicos que constituem um neurônio típico.

As células neuronais apresentam grupos distintos que desempenham funções específicas e, com isso, podem manifestar características morfológicas diferenciadas, assumindo formas e tamanhos variados. Deste modo, essas células podem ser classificadas quanto ao seu aspecto morfológico, tais como: neurônios unipolares, bipolares e multipolares (MARTIN, 1998). O primeiro é o mais simples e não muito comum, uma vez que não apresentam dendritos e funcionam como dispositivos meramente sensoriais. O segundo é muito similar ao primeiro, porém, apresenta um único dendrito no qual pode coletar impulsos e transmiti-los, sendo frequentes em estruturas sensoriais. Já o terceiro apresenta todas as características morfológicas comuns aos neurônios além de uma complexa estrutura de distribuição dos dendritos ao redor de seu corpo celular. Estes constituem a maioria dos neurônios do sistema nervoso.

Em adição, as células nervosas podem ser classificadas, em três grupos distintos, quanto à sua funcionalidade: neurônios aferentes, eferentes e associativos (EKMAN, 2008). Os neurônios aferentes captam estímulos externos e os conduzem ao sistema nervoso central. As células nervosas eferentes disparam impulsos nervosos do sistema nervoso central ao órgão motor. Já os neurônios associativos, classe mais numerosa, interligam os neurônios entre si formando verdadeiras pontes de comunicação.

Para a geração e propagação dos impulsos nervosos, ou potenciais de ação, o sistema nervoso lança mão de uma forma peculiar de alterações eletroquímicas da membrana, causadas por variações de permeabilidade iônica desta. Sendo assim, os impulsos podem ser gerados e transmitidos sem perda ao longo dos prolongamentos do neurônio (EKMAN, 2008).

O balanço eletroquímico responsável pela formação do impulso nervoso é dado, essencialmente, pelo par iônico de sódio ( $\text{Na}^+$ ) e potássio ( $\text{K}^+$ ). Esses dois íons são encontrados tanto no plasma celular quanto no fluido intersticial, mas o que determina a polarização da membrana plasmática é concentração desses elementos

dentro e fora da célula. Na ausência de estímulo ou estado de repouso, há uma diferença de potencial de cerca de - 70mV entre o meio extracelular e o plasma, pois há uma maior concentração de potássio no interior da célula e, fora desta, uma maior concentração de sódio. Essa diferença de potencial ocorre devido ao bloqueio natural que membrana celular apresenta aos íons de sódio. Todavia, a permeabilidade da membrana celular pode ser alterada mediante um estímulo elétrico - sinapse elétrica - ou sob a presença de neurotransmissores - sinapse química. Logo, uma alteração na permeabilidade da membrana poderia resultar na excitação ou inibição de um determinado neurônio (EKMAN, 2008).

A excitação se caracteriza por um fluxo de íons sódio para o interior da célula, despolarizando a membrana celular. Já a inibição corresponde a uma hiperpolarização da membrana, uma vez os íons de potássio são retirados do plasma celular. A variação do potencial da membrana em relação ao potencial de repouso do neurônio é denominada potencial pós-sináptico. Deste modo, a excitação ou inibição do neurônio pós-sináptico é resultado da atividade excitatória ou inibitória de um neurônio pré-sináptico (EKMAN, 2008).

O sistema nervoso interpreta as informações de acordo com a amplitude e a frequência de um sinal elétrico gerado por um neurônio. Assim, os dois tipos de sinais constituem o que se pode chamar de código neural (EKMAN, 2008). Além disso, uma característica singular da sinapse química é que ela unidirecional, uma vez que se a excitação promovida por um neurônio pré-sináptico for acima do limiar excitatório do neurônio pós-sináptico, é disparado um impulso nervoso. Caso contrário, nenhum pulso é registrado, exibindo um mecanismo de tudo ou nada.

## 2.12 Modelo matemático do neurônio de McCulloch-Pitts

Analogamente ao sistema nervoso biológico, as redes neurais artificiais são compostas por unidades básicas de processamento denominadas neurônios. O modelo de neurônio idealizado por McCulloch-Pitts constitui o alicerce para os projetos de redes neurais artificiais (MCCULLOCH e PITTS, 1943).

Os elementos que constituem modelo neuronal de McCulloch-Pitts podem ser divididos em três grupos: sinapses, somador, função de ativação. Cada sinapse pode ser expressa por um sinal  $x_m$  – correspondente a entrada do terminal sináptico  $m$  conectada ao neurônio  $k$  – multiplicado pelo peso sináptico  $w_{km}$ . Tal peso representa uma força ou predominância sináptica. O somador, como o próprio nome já diz, soma os sinais de entrada ponderados pelos pesos sinápticos, constituindo assim, um combinador linear. Para completar o modelo supracitado, uma função de ativação ( $\varphi$ ) é utilizada a fim de normalizar o sinal de saída, restringindo sua amplitude. Logo, o sinal de saída ( $y_k$ ) geralmente é dado por intervalos  $[0, 1]$  ou  $[-1, 1]$ . Além dos três elementos básicos que constituem o modelo, este ainda conta com um termo denominado bias ( $b_k$ ), que tem o efeito de modular a entrada líquida da função de ativação. A Figura 2.13 ilustra os elementos do modelo neuronal de McCulloch-Pitts.

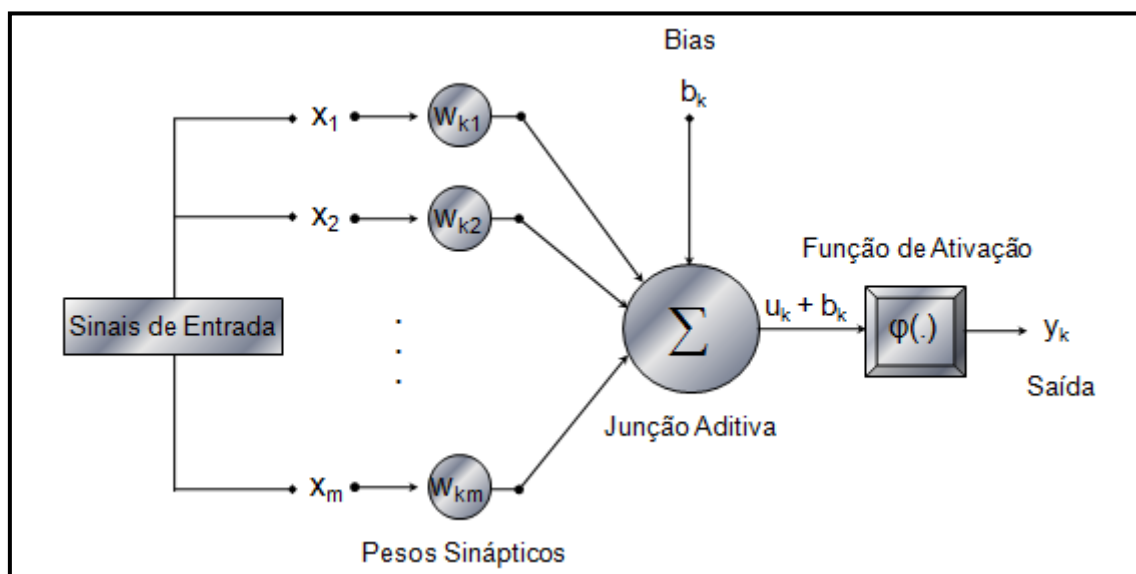


Figura 2.13 - Modelo do neurônio artificial de McCulloch-Pitts.

Para fins formais, o neurônio k pode ser expresso por um par de equações:

$$u_k = \sum_{i=1}^m w_{ki} x_i \quad (2 - 41)$$

$$y_k = \varphi (u_k + b_k) \quad (2 - 42)$$

onde  $x_1, x_2, \dots, x_m$  são os sinais de entrada;  $w_{k1}, w_{k2}, \dots, w_{km}$  são os pesos sinápticos do neurônio k;  $\varphi$  é a função de ativação;  $b_k$  é o bias;  $u_k$  é a saída do combinador linear; e  $y_k$  é o sinal de saída do neurônio. Cabe ressaltar que o valor da saída do combinador linear incluindo o bias ( $u_k + b_k$ ) é chamado de campo local induzido ( $v_k$ ).

Existem inúmeros tipos de funções de ativação disponíveis para aplicar à saída do combinador linear, no entanto, por motivos óbvios, serão abordados somente os quatro tipos mais básicos de funções de ativação: função limiar, função linear por partes, função sigmóide e funções de base radial.

A função limiar ou função degrau é a mais simples, pois apresenta somente dois resultados possíveis, sendo seu comportamento análogo ao mecanismo de tudo ou nada dos neurônios biológicos. Segue o gráfico da função limiar na Figura 2.14.

$$\varphi(u) = \begin{cases} 1, & u \geq 0 \\ -1, & u < 0 \end{cases} \quad (2 - 43)$$

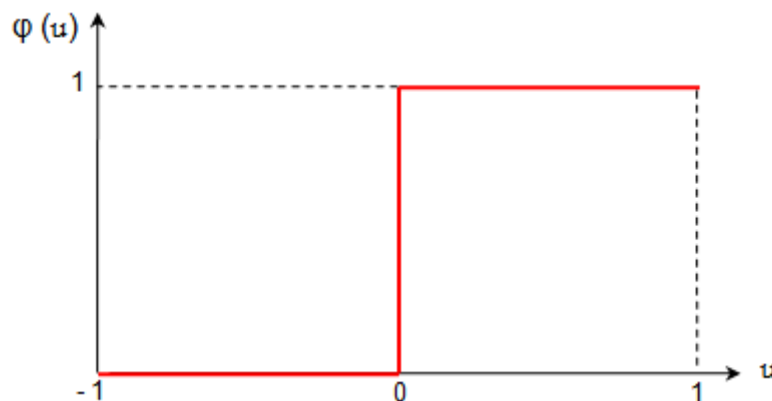


Figura 2.14 - Gráfico de uma função limiar hipotética.

Mais conhecida por ser uma aproximação de um amplificador não-linear, a função linear por partes é definida abaixo. O gráfico da função limiar pode ser visualizado na Figura 2.15.

$$\varphi(u) = \begin{cases} 1, & u \geq +1/2 \\ u, +\frac{1}{2} > u > -1/2 \\ -1, & u \leq -1/2 \end{cases} \quad (2 - 44)$$

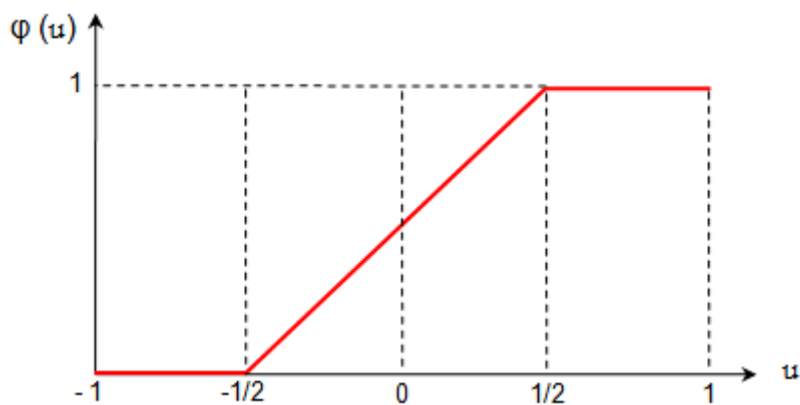


Figura 2.15 - Gráfico de uma função linear por partes hipotética.

Dentre as funções de ativação citadas a função sigmóide é a mais comumente utilizada por ser diferenciável, assumindo valores contínuos entre 0 e 1. O gráfico pertinente a esta função pode ser visto na Figura 2.16.

$$\varphi(u) = \frac{1}{1 + \exp(-au)} \quad (2 - 45)$$

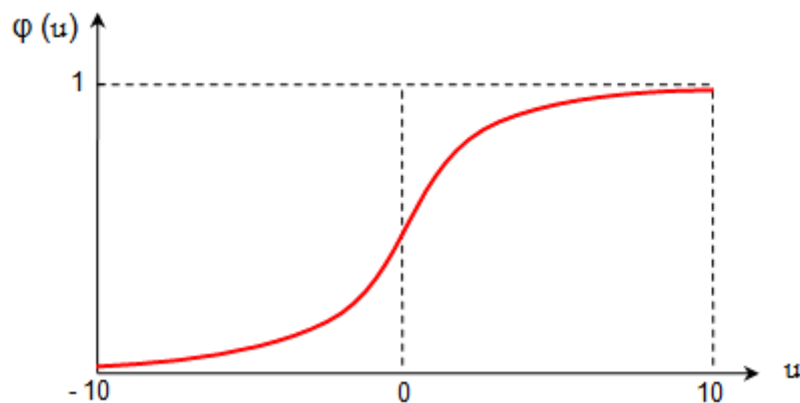


Figura 2.16 - Gráfico de uma função sigmóide hipotética.



No que diz respeito à classe de funções de base radial, pode-se dizer que há um vasto número de funções e cada uma com suas especificidades. As funções que são de particular interesse no estudo de redes de função de base radial são: as multiquadráticas, multiquadráticas inversas e gaussianas (MICCHELLI, 1986).

As funções multiquadráticas são classificadas como funções não-localizadas, uma vez que  $\varphi(r) \rightarrow \infty$  quando  $r \rightarrow \infty$ . Além disso, essa função possui a propriedade de ser não-singular ou diferenciável caso os dados de entrada  $\{x_i\}$  sejam todos distintos. O gráfico da função multiquadrática pode ser visualizado na Figura 2.17.

$$\varphi(r) = (r^2 + c^2)^{1/2}, \quad c > 0 \text{ e } r \in \mathbb{R} \quad (2 - 46)$$

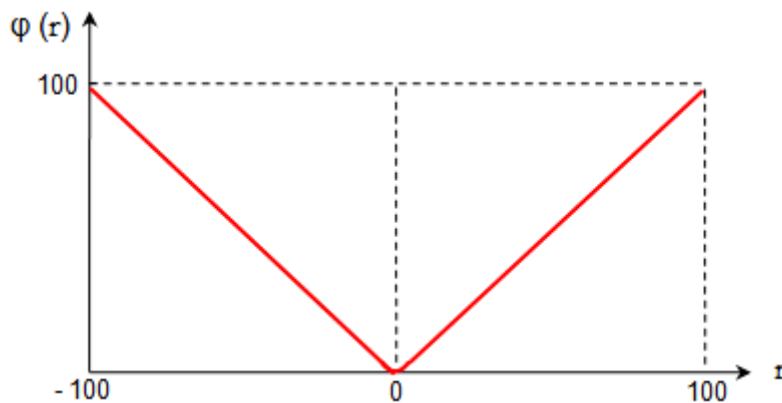


Figura 2.17 - Gráfico de uma função multiquadrática hipotética.

Já as funções multiquadráticas inversas são funções localizadas, no sentido que  $\varphi(r) \rightarrow 0$  quando  $r \rightarrow \infty$ . O gráfico da função multiquadrática inversa pode ser encontrada na Figura 2.18.

$$\varphi(r) = \frac{1}{(r^2 + c^2)^{1/2}}, \quad c > 0 \text{ e } r \in \mathbb{R} \quad (2 - 47)$$

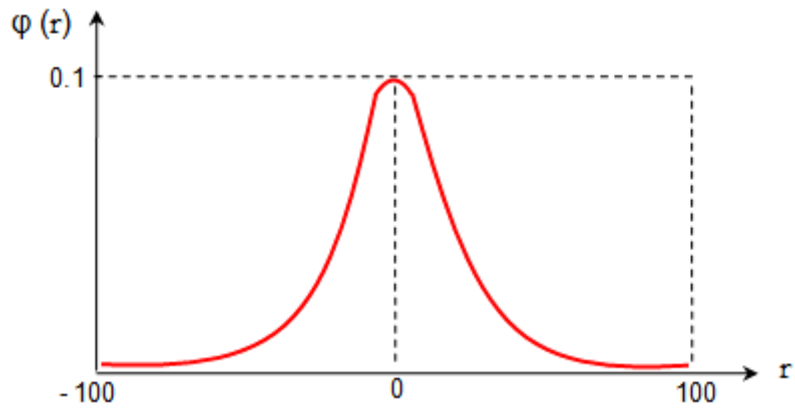


Figura 2.18 - Gráfico de uma função multiquadrática inversa hipotética.

O tipo de função de base radial mais utilizado em aplicações práticas é a função gaussiana. Esta função pode ser diferenciável e, assim como as funções multiquadráticas inversas, a função gaussiana apresenta o comportamento de uma função localizada dada por  $\varphi(r) \rightarrow 0$  quando  $r \rightarrow \infty$ . O gráfico da função gaussiana é dada na Figura 2.19.

$$\varphi(r) = \exp\left(-\frac{r^2}{2\sigma^2}\right), \quad \sigma > 0 \text{ e } r \in \mathbb{R} \quad (2-48)$$

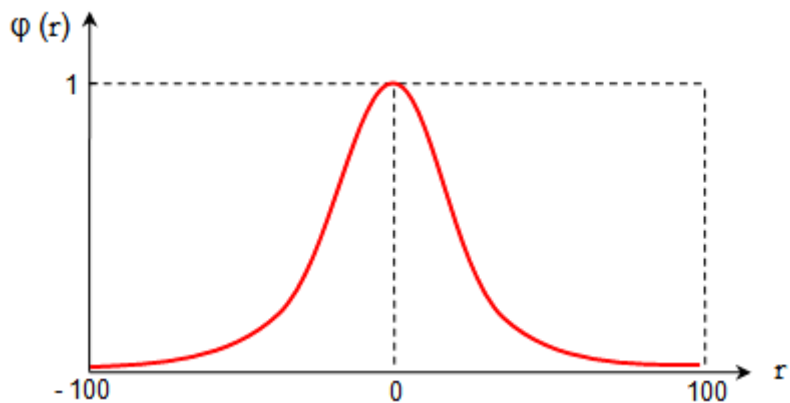


Figura 2.19 - Gráfico de uma função gaussiana hipotética.

## 2.13 Arquiteturas de redes neuronais

A arquitetura de uma rede neuronal pode ser definida pela maneira como os neurônios são estruturados e interagem entre si. De modo geral, pode-se classificar as arquiteturas de redes em três classes distintas: redes alimentadas adiante com camada única, redes alimentadas adiante com múltiplas camadas e redes recorrentes (HAYKIN, 2001). Para fins práticos, serão abordadas somente as duas primeiras.

### 2.13.1 Redes alimentadas adiante com camada única

As redes alimentadas adiante com camada única possuem neurônios organizados de tal modo que o arranjo entre eles é dado em uma única camada de processamento - ou nós computacionais. Esta recebe os dados de entrada (camada de entrada) em fluxo unidirecional. A Figura 2.20 ilustra a arquitetura de tal rede.

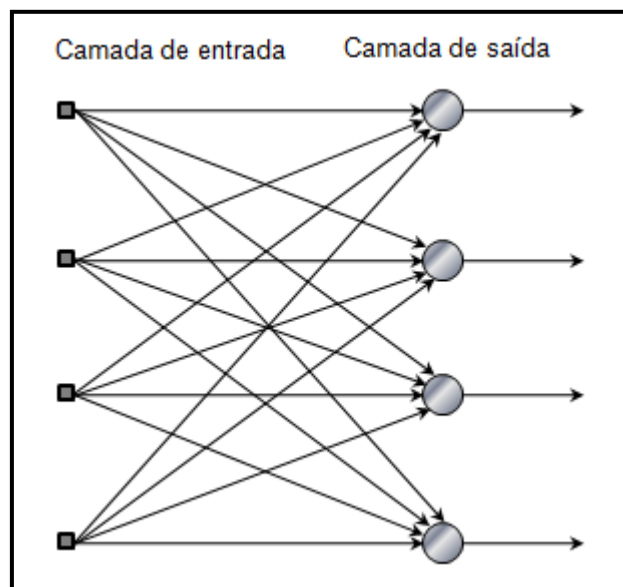


Figura 2.20 - Rede alimentada adiante com camada única.

### 2.13.2 Redes alimentadas adiante com múltiplas camadas

A classe de redes alimentadas adiante com múltiplas camadas se distingue da classe anterior pela presença de uma ou mais camadas ocultas. Tais camadas são constituídas por neurônios denominados unidades ocultas ou neurônios ocultos.

Uma característica pertinente a essa arquitetura é que cada neurônio constituinte das camadas da rede possui entradas que recebem apenas os sinais de saída da camada anterior. O conjunto de sinais de saída dos neurônios da última camada da rede (camada de saída) fornece a resposta global da rede para o padrão apresentado nos dados de entrada (camada de entrada).

Além disso, as redes alimentadas adiante podem ser totalmente conectadas ou não. No primeiro caso, cada nó de uma camada – computacional ou não – é conectado a todos os outros nós da camada subsequente (Figura 2.21). Já no segundo caso, as redes se apresentarão parcialmente conectadas, gerando sítios onde a alimentação será dada por uma fração de todos os possíveis sinais de entrada.

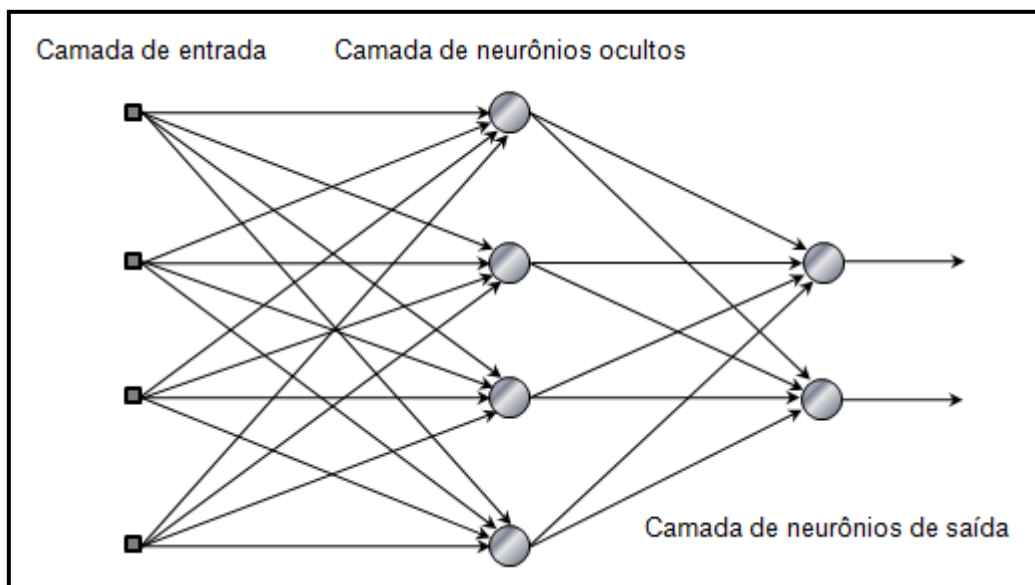


Figura 2.21 - Rede alimentada adiante com múltiplas camadas totalmente conectada.

## **2.14 Aprendizado em uma rede neuronal**

A capacidade de uma rede neuronal extrair informações do ambiente para a melhoria de seu próprio desempenho é denominada aprendizagem. O processo de aprendizado é dado pela interação rede-ambiente de modo que sejam efetuados ajustes aos pesos sinápticos da rede, visando assim uma melhor resposta desta para um determinado meio (MENDEL e MCCLAREN, 1970).

O mecanismo que rege o processo de aprendizagem de uma rede neuronal é baseado em um conjunto de regras bem definidas para a solução de um determinado problema - algoritmo de aprendizagem. Existe uma variedade de algoritmos de aprendizagem e eles diferem entre si pela maneira como são ajustados os pesos sinápticos de um neurônio e como a rede se relaciona com o meio.

Existem diferentes processos associados à noção de aprendizado, no entanto, todos seguem a mesma sequência de eventos: a rede é estimulada, sofre modificações e responde de uma maneira nova ao ambiente para o qual ela foi treinada. No intuito de não alongar muito o assunto, os paradigmas de aprendizagem abordados nesse tópico serão: aprendizagem supervisionada e não-supervisionada.

### **2.14.1 Aprendizagem supervisionada**

A aprendizagem supervisionada ou aprendizagem com um professor é uma forma de aprendizagem na qual o professor tem o conhecimento sobre o ambiente, sendo este representado sob a forma de um vetor com dados de entrada e saída. Para que a rede neuronal absorva o conhecimento do ambiente, esta necessita de um sistema de aprendizagem que torne seu treinamento viável a partir dos dados de entrada e saída (HAYKIN, 2001). A Figura 2.22 ilustra um diagrama em blocos representando a aprendizagem supervisionada.

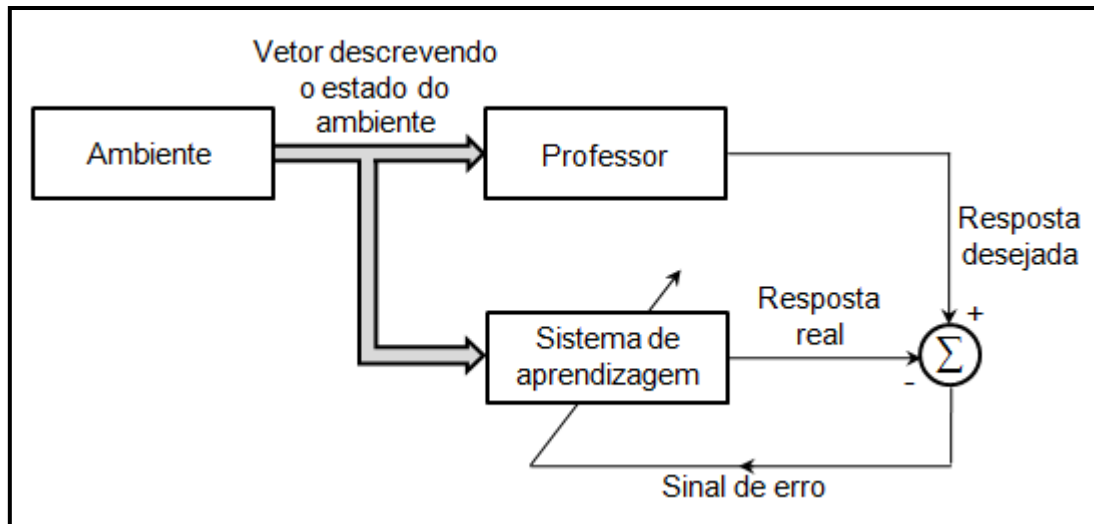


Figura 2.22 - Diagrama em blocos representando a aprendizagem supervisionada.

O termo paradigma está associado à aprendizagem supervisionada, pois esta funciona de maneira similar à aprendizagem por correção de erro, ou seja, opera sobre o mesmo contexto. Logo, é possível discorrer sobre o assunto dando o ênfase para o sistema de aprendizagem por correção de erro.

A aprendizagem por correção de erro consiste em um processo iterativo de modificação dos pesos sinápticos de uma rede neuronal visando a otimização do sinal de erro da mesma. O algoritmo de correção de erro segue abaixo.

Primeiramente, devemos definir  $y_k(t)$  como sendo o sinal de saída ou resposta real do neurônio  $k$ :

$$y_k(t) = v_k(t) = \sum_{k=1}^m w_k(t)x_k(t) \therefore y_k(t) = \mathbf{x}^T(t)\mathbf{w}(t) \quad (2 - 49)$$

onde  $t$  é uma unidade arbitrária de tempo,  $v_k(t)$  é o campo local induzido no tempo  $t$ ,  $x_k(t)$  representa o elemento de entrada no neurônio  $k$ ,  $w_k(t)$  é dado como o peso sináptico do neurônio  $k$  no tempo  $t$ ,  $\mathbf{x}^T(t)$  é a matriz transposta dos  $m$  elementos de entrada e  $\mathbf{w}(t)$  é o vetor que representa os pesos sinápticos dos neurônios no tempo  $t$ .

Agora, podemos definir o sinal de erro  $e_k(t)$  da rede para o neurônio  $k$  como sendo:

$$e_k(t) = d_k(t) - y_k(t) \quad (2 - 50)$$

onde  $d_k(t)$  é a resposta desejada fornecida pelo professor que será comparada ao  $y_k(t)$  para o mesmo instante de tempo  $t$ .

Para que o valor de  $e_k(t)$  seja minimizado, devemos introduzir o termo  $\xi(t)$ , chamado função de custo:

$$\xi(t) = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^m \sum_{k \in C} e_k^2(t) \quad (2 - 51)$$

onde o conjunto  $C$  inclui todos os neurônios da camada de saída da rede.

A função de custo pode ser visualizada como uma superfície de erro com os parâmetros livres (pesos sinápticos) sendo suas coordenadas. Para encontrarmos a solução ótima ( $w^*$ ) a função de custo  $\xi(w)$  deve ser continuamente diferenciável para os pesos de um vetor qualquer  $w$  e deve satisfazer a condição  $\xi(w^*) \leq \xi(w)$ , logo:

$$\nabla \xi(w^*) = 0 \quad (2 - 52)$$

onde o vetor gradiente da função de custo pode ser dado por:

$$\nabla \xi(w) = \mathbf{g} = \left[ \frac{\partial \xi}{\partial w_1}, \frac{\partial \xi}{\partial w_2}, \dots, \frac{\partial \xi}{\partial w_m} \right]^T \quad (2 - 53)$$

Existe uma classe de algoritmos de otimização irrestritos que é baseada na ideia da descida iterativa local. Tal ideia se baseia em um processo iterativo o qual produz uma sequência de vetores de peso que, a cada processo de iteração, reduz a função de custo. Essa ideia pode ser representada matematicamente por:

$$\xi(\mathbf{w}(t + 1)) < \xi(\mathbf{w}(t)) \quad (2 - 54)$$

onde  $\mathbf{w}(t + 1)$  é o valor do vetor de peso atualizado e  $\mathbf{w}(t)$  é o seu valor anterior.

Existem vários métodos irrestritos de otimização que se baseiam na ideia de descida iterativa, todavia, será abordado somente o método da descida mais íngreme (BERTSEKAS, 1995). Neste método, os ajustes iterativos aplicados ao vetor de peso  $\mathbf{w}$  são na direção mais íngreme e oposta ao vetor gradiente  $\mathbf{g}$ , logo o algoritmo pode ser escrito como:

$$\mathbf{w}(t + 1) = \mathbf{w}(t) - \eta \mathbf{g}(t) \quad (2 - 55)$$

onde  $\eta$  é uma constante positiva denominada taxa de aprendizado e  $\mathbf{g}(t)$  é o vetor gradiente dado em um ponto  $\mathbf{w}(t)$ .

Para obter o termo formal  $\Delta \mathbf{w}(t)$  que corrige os pesos de modo iterativo, a equação (2 - 55) pode ser reescrita como:

$$\Delta \mathbf{w}(t) = \mathbf{w}(t + 1) - \mathbf{w}(t) = -\eta \mathbf{g}(t) \quad (2 - 56)$$

Por fim, devemos considerar o quão influente a taxa de aprendizado pode ser no tocante à convergência para a solução ótima. Logo, para um  $\eta$  pequeno,  $\mathbf{g}$  converge lentamente para a solução ótima, enquanto que para um  $\eta$  grande,  $\mathbf{g}$  é otimizado mais rapidamente. Já para valores que excedem um valor crítico, o algoritmo se torna instável.



## 2.14.2 Aprendizagem não-supervisionada

A aprendizagem não-supervisionada ou auto-organizada não possui um agente externo - professor - que forneça a resposta desejada para os padrões de entrada (Figura 2.23). Logo, é necessário utilizar um sistema de aprendizagem que dependa somente dos dados de entrada (HAYKIN, 2001).

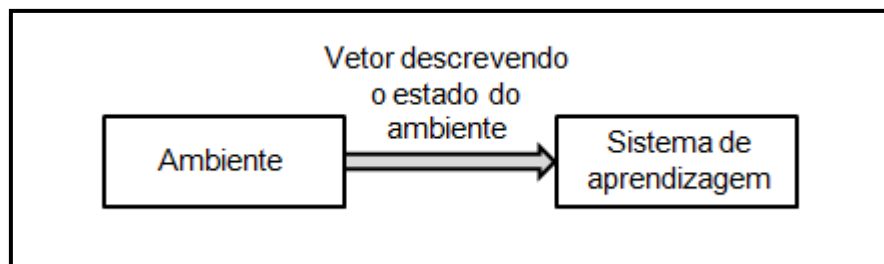


Figura 2.23 - Diagrama em blocos representando a aprendizagem auto-organizada.

A regra de aprendizagem competitiva pode ser utilizada na ausência de um professor, pois não necessita de um agente externo que forneça informações adicionais a respeito do ambiente no qual a rede é inserida. A arquitetura de uma rede que utilize a aprendizagem competitiva geralmente possui duas camadas - uma camada de entrada e uma camada competitiva. Enquanto a camada de entrada fornece os dados para a rede, a camada competitiva é constituída de neurônios que competem entre si pela chance de responder às características contidas nos dados de entrada. Em sua forma mais simples, a competição se baseia na estratégia de "tudo ou nada", ou seja, o neurônio vencedor se torna apto a responder pela rede enquanto os outros são desligados.

Para um padrão de entrada específico  $\mathbf{x}$ , um neurônio vencedor  $k$  deve possuir o maior campo local induzido ( $u_k$ ) dentre todos os outros neurônios:

$$y_k = \begin{cases} 1, & \text{se } u_k > u_j \text{ para todos } j, j \neq k \\ 0, & \text{se } u_k < u_j \text{ para todos } j, j \neq k \end{cases} \quad (2 - 57)$$

onde valor 1 representa o neurônio vencedor, 0 representa os neurônios que perderam a competição e  $y_k$  é a saída do neurônio  $k$ . O neurônio vencedor ainda deve passar por um processo de aprendizagem para se tornar especializado em um dado padrão.

A maneira como um neurônio aprende em uma rede competitiva é deslocando os pesos sinápticos de seus nós de entrada inativos para os seus nós ativos. Logo, se um neurônio vencer a competição, os nós das conexões inativas de entrada deste liberam seus pesos sinápticos e os distribuem uniformemente entre os nós de entrada ativos. A partir da regra de aprendizagem competitiva padrão, podemos definir a variação  $\Delta w_{kj}$  aplicada ao peso sináptico  $w_{kj}$  como (RUMELHART e ZISPER, 1985):

$$\Delta w_{kj} = \begin{cases} \eta(x_j - w_{kj}), & \text{se o neurônio } k \text{ vencer} \\ 0, & \text{se o neurônio } k \text{ perder} \end{cases} \quad (2 - 58)$$

onde  $\Delta w_{kj}$  é o termo de correção dos pesos sinápticos,  $\eta$  é a taxa de aprendizado,  $x_j$  é o sinal de entrada da sinapse  $j$  e  $w_{kj}$  é o peso sináptico da entrada  $j$  no neurônio  $k$ .

## 2.15 O perceptron de Rosenblatt

O perceptron, desenvolvido por Frank Rosenblatt em 1958, é um dos mais antigos e inovadores modelos de redes neuronais. O advento se revelou extremamente útil na classificação de padrões ditos linearmente separáveis, pois é a maneira mais simples de realizar tal tarefa utilizando redes neuronais. Basicamente, a classificação de padrões é feita por um hiperplano chamado de superfície de decisão que converge se posicionando entre duas classes ou hipóteses linearmente separáveis (ROSENBLATT, 1958).

O objetivo do perceptron é classificar adequadamente um conjunto de estímulos externos dados por  $x_1, x_2, \dots, x_m$  em uma de duas classes  $\bar{U}_1$  e  $\bar{U}_2$ . A tomada de decisão para a classificação de um determinado padrão é atribuir o ponto

representado pelas entradas  $x_1, x_2, \dots, x_m$  à classe  $\bar{U}_1$  se a saída do perceptron  $y$  for +1 e à classe  $\bar{U}_2$  se ela for -1. De modo geral, um classificador de padrões pode ser representado por um mapa das regiões de decisão - delimitadas pelo hiperplano - no espaço de sinal  $m$ -dimensional abrangido pelas  $m$  variáveis de entrada  $x_1, x_2, \dots, x_m$ .

Em sua forma mais básica, o perceptron consiste de um único neurônio de McCulloch-Pitts e está relacionado a um hiperplano que separa duas regiões distintas, sendo representado por:

$$\sum_{i=1}^m w_i x_i + b = 0 \quad (2 - 59)$$

onde  $x_1, x_2, \dots, x_m$  são as variáveis de entrada;  $w_1, w_2, \dots, w_m$  são os pesos sinápticos do perceptron; e 'b' é o bias.

Para o caso de duas variáveis  $x_1$  e  $x_2$  a superfície de decisão assumirá a forma de uma reta. Logo, um ponto  $(x_1, x_2)$  é atribuído à classe  $\bar{U}_1$  quando este se encontra acima da superfície e um outro ponto  $(x_1, x_2)$  que está abaixo desta é atribuído à classe  $\bar{U}_2$ . A Figura 2.24 ilustra um problema de classificação de padrões bidimensional de duas classes.

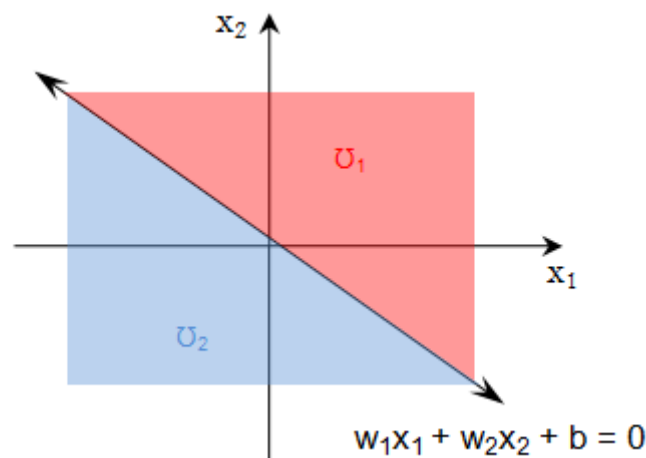


Figura 2.24 - Ilustração da superfície de decisão (hiperplano) dada por uma reta. Os pontos  $(x_1, x_2)$  representados acima desta são atribuídos à classe  $\bar{U}_1$ , enquanto os pontos  $(x_1, x_2)$  abaixo da reta são atribuídos a  $\bar{U}_2$ .

Cabe ressaltar que o perceptron construído a partir de um único neurônio é limitado a classificar padrões linearmente separáveis e com apenas duas classes. Todavia, se a arquitetura dos perceptrons for modificada, estes são capazes de classificar mais de duas classes e padrões que não são linearmente separáveis.

Para que o perceptron possa realizar a convergência da superfície de decisão e então classificar os padrões de interesse, ele deve ajustar seus parâmetros livres de acordo com o algoritmo de convergência do perceptron (HAYKIN, 2001).

## **2.16 Redes perceptron de múltiplas camadas**

As redes perceptron de múltiplas camadas ou redes *multilayer perceptron* (MLP) são amplamente utilizadas no campo de classificação de padrões e processamento de sinais. Diferentemente das redes de camada única, as redes MLP conseguem realizar mapeamentos de natureza complexa, não se limitando aos padrões linearmente separáveis (BISHOP, 1995).

A arquitetura MLP pertence à classe de redes alimentadas adiante com múltiplas camadas. Portanto, sua estrutura é baseada em um conjunto de unidades sensoriais, em uma ou mais camadas ocultas de neurônios ou nós computacionais e uma camada de saída (Figura 2.25). Além disso, essas redes são consideradas uma generalização do perceptron de Rosenblatt, uma vez que são capazes de classificar mais de duas classes e padrões que não são linearmente separáveis (HAYKIN, 2001).

As redes MLP, também chamadas de redes *feedforward* (alimentadas adiante), são redes progressivas, pois o fluxo de informação é propagado sem laços de realimentação, ou seja, em uma única direção: da camada de entrada à camada de saída, camada por camada. Para resolver problemas de natureza complexa a rede MLP agrega uma ferramenta conhecida como algoritmo de retropropagação (RUMELHART e MCCLELLAND, 1986), algoritmo este baseado na regra de aprendizagem por correção de erro. É através desse algoritmo que a rede pode ser

treinada, ou seja, aprender algo sobre um determinado meio extraindo informações do mesmo para melhorar seu desempenho.

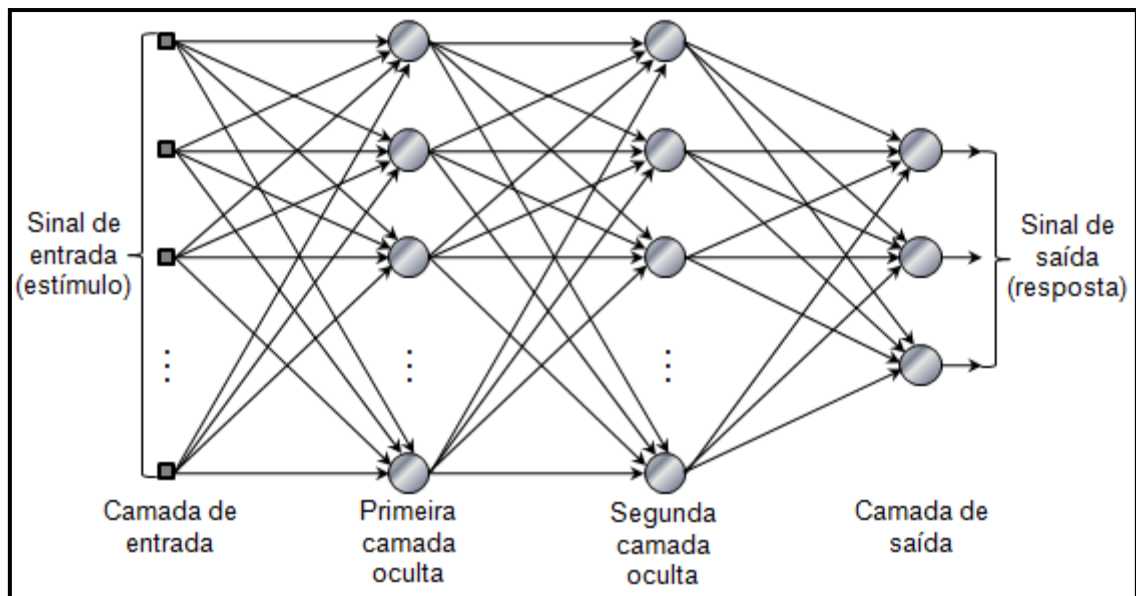


Figura 2.25 - Grafo arquitetural de uma rede MLP, totalmente conectada, com duas camadas ocultas.

O processo de aprendizagem por retropropagação é supervisionado e ocorre, basicamente, em duas etapas. A primeira etapa é a propagação do sinal de camada em camada, que tem início no vetor de entrada e fim na camada de saída. Ao término da primeira etapa, a resposta real da rede é subtraída da resposta desejada, produzindo um sinal de erro. Na segunda etapa, este sinal é, por sua vez, retropropagado através da rede, contra a direção das conexões sinápticas. Para minimizar o erro entre a resposta desejada e a resposta real, os pesos sinápticos são ajustados pelo algoritmo durante a passagem do sinal de retropropagação.

Os sinais de propagação e de retropropagação podem ser classificados como: sinais funcionais e sinais de erro, respectivamente (Figura 2.26). Os sinais funcionais são informações que se propagam de neurônio em neurônio, sendo processadas em cada uma dessas unidades. Tal processamento funciona com um filtro adaptativo, onde o sinal recebido é processado em função de suas entradas e pesos associados.

Os sinais de erro são similares aos sinais funcionais, porém, o sentido de propagação é inverso e seu processamento envolve uma função dependente do erro.

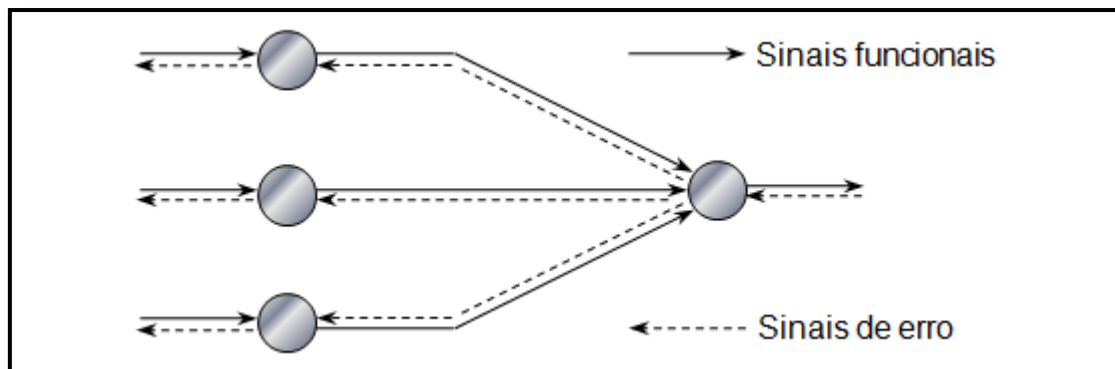


Figura 2.26 - Ilustração do sentido de propagação dos sinais em uma rede MLP que emprega o algoritmo de retropropagação.

Outra questão importante é o número de nós presente em cada uma das camadas de uma rede MLP. Primeiramente, a determinação do número de nós da camada de entrada é correspondente ao número de dimensões do espaço de observação ou número de variáveis. De maneira análoga, a camada de saída tem seu número de nós limitado à dimensionalidade exigida pela resposta da rede. Já na camada oculta, tanto o número de nós quanto o número de camadas determinam o grau de complexidade da rede e não há nenhum preceito que precise esses números. No entanto, tais números podem ser estimados por tentativa e erro, no intuito de se obter uma rede convergente e com baixo custo computacional. Para tal, a rede exigida deve ser a menor possível, porém, apresentando uma alta capacidade de generalização. Logo, trata-se de uma otimização por tentativa e erro.

De maneira geral, um perceptron de múltiplas camadas possui três características distintas (HAYKIN, 2001):

1. Os neurônios que compõem a rede possuem uma função de ativação não-linear derivável em todos os pontos (não-linearidade suave). Uma função comumente utilizada para este fim é a função logística:

$$y_k = \frac{1}{1 + e^{-v_k}} \quad (2 - 60)$$

onde  $v_k$  é o campo local induzido e  $y_k$  é a saída do neurônio  $k$ .

2. A rede contém uma ou mais camadas de neurônios ocultos, sendo estes responsáveis por extrair características do padrão de entrada, respondendo pelo potencial de aprendizagem de tarefas complexas.

3. Geralmente possui um grande número de sinapses ativas, o que confere um alto grau de conectividade à rede.

### 2.16.1 Algoritmo de retropropagação

O algoritmo de retropropagação ou *back-propagation*, termo amplamente utilizado advindo do inglês, foi proposto e desenvolvido por Rumelhart e colaboradores em meados da década de 1980 (RUMELHART *et al.*, 1986). Tal algoritmo, tornou-se popular por anular certas limitações de aprendizagem das redes MLP, culminando em excelentes oportunidades de pesquisas e aplicações nessa área.

Antes de discorrer sobre os detalhes matemáticos, cabe ressaltar que algoritmo de retropropagação é baseado na regra de aprendizagem por correção de erro. Como tal, ele pode ser visto como uma generalização do algoritmo do mínimo quadrado médio ou LMS (HAYKIN, 2001). Portanto, neste tópico, a abordagem aproveitará certas passagens matemáticas do tópico 2.14.1, para que não seja exibido os mesmos conceitos de modo desnecessário.

Para que o algoritmo de retropropagação seja erigido, devemos analisar duas rotas conceituais para, enfim, obter o algoritmo geral. Deste modo, serão necessárias duas abordagens: uma analisando neurônio de saída e outra um neurônio oculto.

Para um neurônio de saída  $k$ , as correções  $\Delta w(t)$  sobre um dado peso sináptico  $w(t)$  são proporcionais ao gradiente abaixo:

$$\frac{\partial \xi(t)}{\partial w_{kj}(t)} \quad (2 - 61)$$

onde  $\xi(t)$  é a função de custo na iteração  $t$  e  $w_{kj}$  representa o peso sináptico conectando o neurônio  $j$  à entrada do neurônio  $k$ , na iteração  $t$ .

Substituindo o termo  $\xi(t)$  pela equação (2 - 51) e o termo  $e_k$  da mesma pela equação (2 - 50), temos, de acordo com a regra da cadeia, que:

$$\frac{\partial \xi(t)}{\partial w_{kj}(t)} = \frac{\partial \xi(t)}{\partial e_k(t)} \frac{\partial e_k(t)}{\partial y_k(t)} \frac{\partial y_k(t)}{\partial v_k(t)} \frac{\partial v_k(t)}{\partial w_{kj}(t)} \quad (2 - 62)$$

onde  $e_k(t)$  é o sinal de erro da rede,  $y_k(t)$  é o sinal de saída e  $v_k(t)$  é o campo local induzido, sendo todos os parâmetros anteriores pertinentes ao neurônio  $k$ .

Resolvendo cada derivada parcial da equação (2 - 62), temos:

$$\frac{\partial \xi(t)}{\partial w_{kj}(t)} = -e_k(t) \varphi'_k(v_k(t)) y_j(t) \quad (2 - 63)$$

onde  $\varphi_k(\cdot)$  é a função de ativação do neurônio  $k$  e  $y_j(t)$  é o sinal de saída do neurônio  $j$ .



De acordo com a regra delta (BISHOP, 1995), a correção  $\Delta w_{kj}(t)$  aplicada a  $w_{kj}(t)$  é definida por:

$$\Delta w_{kj}(t) = -\eta \frac{\partial \xi(t)}{\partial w_{kj}(t)} \quad (2 - 64)$$

onde  $\eta$  é o parâmetro pertinente à taxa de aprendizagem. Deve-se notar que o sinal negativo representa a descida do vetor gradiente no espaço de pesos.

Logo, a partir da substituição da equação (2 - 63) na (2 - 64), podemos obter o termo formal de correção iterativa dos pesos para o neurônio de saída k:

$$\Delta w_{kj}(t) = \eta \delta_k(t) y_j(t) \quad (2 - 65)$$

onde o gradiente local  $\delta_k$  é dado por:

$$\delta_k(t) = \frac{\partial \xi(t)}{\partial e_k(t)} \frac{\partial e_k(t)}{\partial y_k(t)} \frac{\partial y_k(t)}{\partial v_k(t)} = e_k(t) \varphi'_k(v_k(t)) \quad (2 - 66)$$

Agora, se o neurônio k está localizado em uma camada oculta da rede, não existe uma resposta específica para aquele neurônio. Deste modo, o sinal de erro do neurônio deve ser determinado a partir dos sinais de erro de todos os neurônios aos quais o neurônio oculto está diretamente conectado.

Para a determinar o gradiente local  $\delta'_k$  para o neurônio oculto k, podemos redefinir a equação (2 - 66):

$$\delta'_k(t) = -\frac{\partial \xi(t)}{\partial y_k(t)} \frac{\partial y_k(t)}{\partial v_k(t)} = -\frac{\partial \xi(t)}{\partial y_k(t)} \varphi'_k(v_k(t)) \quad (2 - 67)$$

Podemos calcular a derivada parcial da função de custo em relação ao sinal de saída do neurônio oculto k. Mas para que não ocorra embaraço em relação ao índices, será utilizado o índice l para o nó de saída da rede. Calculando a derivada, temos:

$$\frac{\partial \xi(t)}{\partial y_k(t)} = \sum_l e_l \frac{\partial e_l(t)}{\partial y_k(t)} = \sum_l e_l(t) \frac{\partial e_l(t)}{\partial v_l(t)} \frac{\partial v_l(t)}{\partial y_k(t)} \quad (2 - 68)$$

$$\frac{\partial \xi(t)}{\partial y_k(t)} = - \sum_l e_l(t) \varphi'_l(v_l(t)) w_{lk}(t) = - \sum_l \delta_l(t) w_{lk}(t) \quad (2 - 69)$$

onde  $e_l(t)$  é o sinal de erro da rede,  $v_l(t)$  é campo local induzido e  $\varphi_l(\cdot)$  é a função de ativação, todos os parâmetros citados são relacionados ao neurônio l na iteração t. Já o parâmetro  $w_{lk}$  representa o peso sináptico conectando o neurônio k à entrada do neurônio l, na iteração t.

Logo, substituindo o último termo da equação (2 - 69) na equação (2 - 67) podemos obter a fórmula do gradiente local  $\delta'_k$  em um neurônio oculto k:

$$\delta'_k(t) = \varphi'_k(v_k(t)) \sum_l \delta_l(t) w_{lk}(t) \quad (2 - 70)$$

Por fim, o algoritmo de retropropagação pode ser resumido a duas etapas. A primeira delas é identificar se o neurônio é um nó de saída ou um nó oculto. Determinado o tipo de nó, a segunda etapa consiste em aplicar a regra delta para a correção dos pesos  $\Delta w_{kj}(t)$  em função do gradiente local do nó previamente determinado (HAYKIN, 2001):

$$(\Delta w_{kj}) = (\eta) \cdot (\delta_k(t)) \cdot (y_j(t)) \quad (2 - 71)$$

## 2.17 Redes de função de base radial

As redes de função de base radial ou *radial basis function* (RBF) foram idealizadas por BROOMHEAD e LOWE (1988) a fim de fornecer uma alternativa às redes MLP. Assim como as últimas, as redes RBF podem ser utilizadas para realizar tarefas complexas de classificação de padrões em espaços de alta dimensionalidade (COVER, 1965). No entanto, neste tópico o enfoque será sobre as redes RBF supervisionadas capazes de fazer desde simples ajustes de curvas até o mapeamento de hiperplanos no espaço  $\mathbb{R}^N$ .

No que diz respeito à sua arquitetura, as redes RBF pertencem à classe de redes alimentadas adiante e contam com 3 camadas distintas: uma de entrada, somente uma oculta e uma de saída (Figura 2.27). A camada de entrada é constituída por unidades sensoriais que conectam a rede ao seu ambiente. Já a camada oculta é composta por uma única camada de neurônios cujas funções de ativação são dadas por funções de base radial. Isso faz com que tal camada execute um mapeamento não-linear do espaço de entrada. Por fim, a camada de saída executa um mapeamento linear do espaço oculto para o espaço de saída.

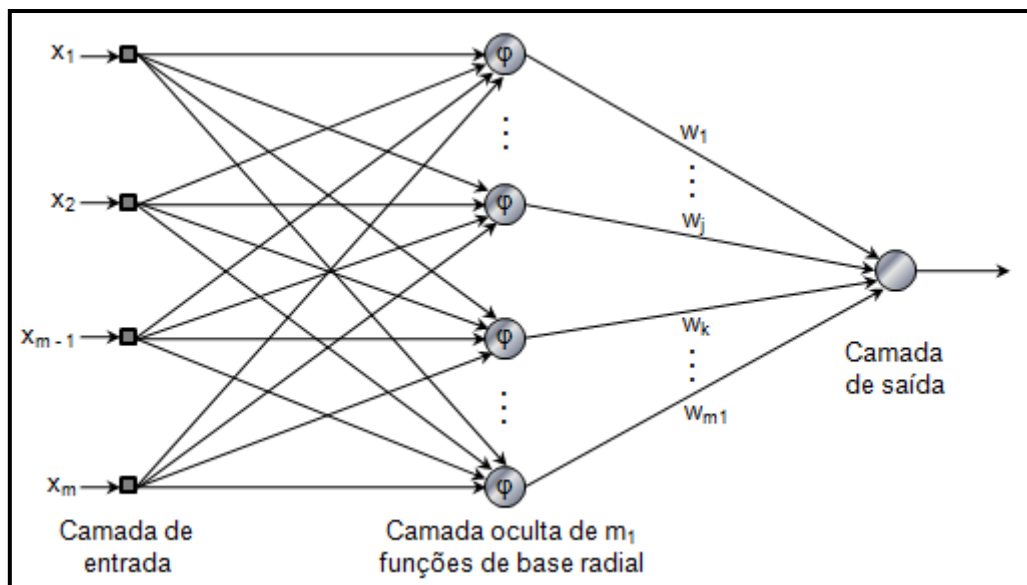


Figura 2.27 - Ilustração do Grafo arquitetural singular de uma rede de base radial.

Segundo HAYKIN (2001), o conceito de aprendizagem de uma rede RBF é descrito como o mapeamento de uma superfície, em um espaço multidimensional, que forneça o melhor ajuste para os dados de treinamento. Logo, para que o mapeamento seja possível, temos que lançar mão da teoria da interpolação multivariada (DAVIS, 1963):

*Encontrar uma função  $F : \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}^1$  que satisfaça a condição de interpolação tendo em mãos os conjunto de pontos  $\{x_i \in \mathbb{R}^M \mid i = 1, 2, \dots, N\}$  e  $\{d_i \in \mathbb{R}^1 \mid i = 1, 2, \dots, N\}$ . Onde  $x_i$  representa o vetor de entrada e  $d_i$  o vetor de saída. Logo, temos que:*

$$F(x_i) = d_i, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (2 - 72)$$

A técnica de funções de base radial consiste em escolher uma função  $F$  que faz o seguinte mapeamento  $F : \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}^1$  (POWELL, 1988):

$$F(x) = \sum_{i=1}^N w_i \varphi(\|x - x_i\|) \quad (2 - 73)$$

onde  $\{\varphi(\|x - x_i\|) \mid i = 1, 2, \dots, N\}$  é um conjunto de funções de base radial, os pontos  $x_i \in \mathbb{R}^M$ ,  $i = 1, 2, \dots, N$  são os dados de entrada conhecidos e que são tomados como centros das funções de base radial. O  $w_i$  corresponde os pesos do nó de saída.

Combinando as equações (2 - 72) (2 - 73) podemos obter o conjunto de equações lineares necessárias para encontrar o vetor de pesos desconhecido  $\mathbf{w}$ :

$$\begin{bmatrix} \varphi_{11} & \cdots & \varphi_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_{N1} & \cdots & \varphi_{NN} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 \\ \vdots \\ d_2 \end{bmatrix} \quad (2 - 74)$$

onde  $\Phi$  é uma matriz de interpolação  $N \times N$  de  $\varphi_{ji}$ , logo:

$$\varphi_{ji} = \varphi(\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\|) \rightarrow \Phi = \{\varphi_{ji} \mid (j, i) = 1, 2, \dots, N\} \quad (2 - 75)$$

Reescrevendo a equação (2 - 74) de uma forma compacta, temos a seguinte relação de equações lineares simultâneas:

$$\Phi \mathbf{w} = \mathbf{x} \quad (2 - 76)$$

Para que exista a matriz inversa  $\Phi^{-1}$ , esta deve ser não-singular, logo, o vetor de pesos pode ser obtido da seguinte forma:

$$\mathbf{w} = \Phi^{-1} \mathbf{x} \quad (2 - 77)$$

Para solucionar o problema acima, devemos lançar mão de uma classe de funções de base radial descritas por MICCHELLI (1986). Tais funções são descritas no tópico 2.3 e são identificadas pelas equações (2 - 46), (2 - 47) e (2 - 48).

### 2.17.1 Teoria da Regularização

O procedimento de interpolação estrita supracitado pode não ser uma boa estratégia para o treinamento de redes RBF para certas classes de tarefas. Isso se deve ao fato de que o vetor de entrada pode conter um grande conjunto de dados e, ao mesmo tempo, apresentar uma quantidade surpreendentemente pequena de informação acerca da solução desejada. Neste caso, o problema explicitado acima é chamado de mal formulado (TIKHONOV e ARSENIN, 1977).

Para contornar o problema exposto acima, Andrey Nikolayevich Tikhonov propôs um novo método chamado de regularização (TIKHONOV, 1963). O grande objetivo deste método é estabilizar a solução por meio de algum funcional não-negativo auxiliar que incorpore informação prévia sobre a solução. Basicamente, a teoria de regularização de Tikhonov é composta por dois termos com funções distintas: o termo do erro padrão e o termo de regularização.

O termo do erro padrão  $\beta_s(F)$  mede o erro padrão entre a resposta desejada  $d_i$  e a resposta real  $y_i$ :

$$\beta_s(F) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (d_i - y_i)^2 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N [d_i - F(x_i)]^2 \quad (2 - 78)$$

O termo de regularização  $\beta_c(F)$  representa uma função de "punição" de ruído:

$$\beta_c(F) = \frac{1}{2} \|DF\|^2 \quad (2 - 79)$$

onde  $D$  é um operador diferencial linear que visa suavizar e estabilizar a solução para o problema de regularização, satisfazendo a propriedade de continuidade. A função  $F$  em ambos os casos representa uma função aproximativa.

Juntando os termos acima podemos obter a quantidade a ser minimizada pela teoria da regularização (HAYKIN, 2001):

$$\beta(F) = \beta_s(F) + \lambda\beta_c(F) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N [d_i - F(x_i)]^2 + \frac{1}{2} \lambda \|DF\|^2 \quad (2 - 80)$$

onde  $\beta(F)$  é o funcional de Tikhonov e  $\lambda$  é o parâmetro de regularização. Quando  $\lambda \rightarrow 0$  temos que a solução do minimizador do funcional de Tikhonov ( $F_\lambda$ ) é totalmente determinada pelos dados, caso contrário ( $\lambda \rightarrow \infty$ ) indica que os dados de entrada e saída não são confiáveis.

A solução para o problema de regularização é minimizar o funcional de Tikhonov ( $F_\lambda$ ), mas seu desenvolvimento matemático é demasiadamente extenso para ser explicitado aqui. Deste modo, será evidenciado somente sua solução final. Logo, a solução de que minimiza  $F_\lambda$  é dada por (HAYKIN, 2001):

$$F_\lambda(x) = \frac{1}{\lambda} \sum_{i=1}^N [d_i - F(x_i)] G(x, x_i) \quad (2 - 81)$$

onde  $G(x, x_i)$  é um conjunto de funções de Green centradas em  $x_i = 1, 2, \dots, N$ .

### 2.17.2 Redes de Regularização

As redes de regularização, como o próprio nome sugere, derivam da teoria de regularização e, assim como as redes RBF, possuem uma arquitetura semelhante (POGGIO e GIROSI, 1990). A diferença entre as duas redes reside no aspecto teórico que fundamenta cada uma de suas unidades ocultas. Uma rede de regularização possui neurônios ocultos cujas funções de ativação são dadas por  $N$  funções de Green, onde  $N$  é o tamanho da amostra de treinamento (Figura 2.28).

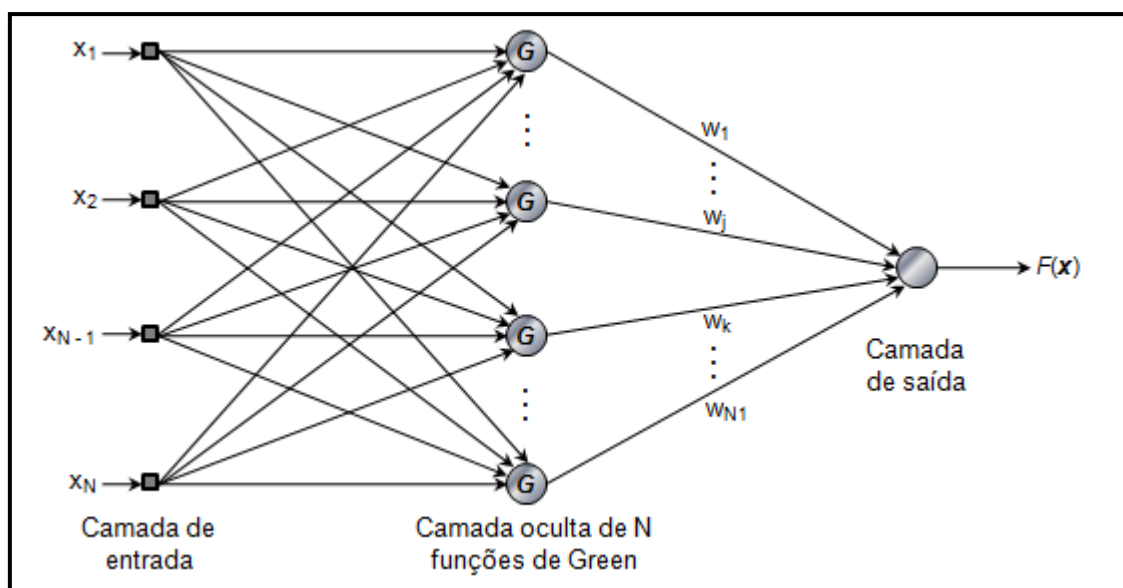


Figura 2.28 - Ilustração do Grafo arquitetural de uma rede de Regularização.

Para obter o vetor de pesos, a partir da teoria de regularização, devemos determinar os coeficientes desconhecidos na equação (2 - 82):

$$F_\lambda(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^N w_i G(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i), \quad \text{onde } w_i = \frac{1}{\lambda} [d_i - F(\mathbf{x}_i)] \quad (2 - 82)$$

$$\mathbf{F}_\lambda = [F_\lambda(\mathbf{x}_1), F_\lambda(\mathbf{x}_2), \dots, F_\lambda(\mathbf{x}_N)]^T \quad (2 - 83)$$

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} G(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1) & \cdots & G(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ G(\mathbf{x}_N, \mathbf{x}_1) & \cdots & G(\mathbf{x}_N, \mathbf{x}_N) \end{bmatrix} \quad (2 - 84)$$

$$\mathbf{d} = [d_1, d_2, \dots, d_N]^N \quad (2 - 85)$$

$$\mathbf{w} = [w_1, w_2, \dots, w_N]^N \quad (2 - 86)$$

Substituindo as matrizes na equação (2 - 50), temos:

$$(\mathbf{G} + \lambda \mathbf{I})\mathbf{w} = \mathbf{d} \quad (2 - 87)$$

Podemos notar que a matriz  $\mathbf{G}$  desempenha um papel similar ao de  $\Phi$  nas redes RBF. Para garantir que  $\mathbf{G} + \lambda \mathbf{I}$  seja definida positivamente e assim inversiva, a escolha do valor de  $\lambda$  deve ser suficientemente grande para que isso ocorra. Assim,  $\mathbf{w}$  terá uma única solução (POGGIO e GIROSI, 1990):

$$\mathbf{w} = (\mathbf{G} + \lambda \mathbf{I})^{-1} \mathbf{d} \quad (2 - 88)$$



A solução de  $F_\lambda$  é, basicamente, uma superposição linear de  $N$  funções de Green. Neste trabalho, estas funções serão descritas por gaussianas multivariadas.

Segundo POGGIO e GIROSI (1990), as redes regularizadas possuem as seguintes características:

1. A rede de regularização é um aproximador universal, podendo aproximar qualquer função multivariada.
2. Como a rede é derivada da teoria da regularização, sempre há uma escolha de coeficientes que melhor aproxima a função dentre todas as outras escolhas possíveis.
3. A rede de regularização sempre calculará uma solução ótima, pois a rede minimiza o funcional que estima o quanto a rede se desvia de seu valor real.

### 2.17.3 Redes de função de base radial generalizadas

Em uma rede de regularização o número de nós ocultos é igual ao número  $N$  de exemplos do vetor de entrada. Se o número de elementos da entrada for relativamente alto, pode ser que a rede de regularização se torne extremamente custosa em termos computacionais. Em adição, há uma maior probabilidade de ocorrer mau condicionamento do problema à medida que as matrizes aumentam. A ideia por trás da implementação de uma rede RBF generalizada é reduzir os custos computacionais e a complexidade da rede de regularização.

Para que sejam atingidas todas as melhorias supracitadas, devemos fazer uma aproximação para a solução regularizada. Para tal deve-se procurar por uma solução subótima em um espaço de menor dimensionalidade que aproxime a solução regularizada da equação (2 - 82). O método de Galerkin visa expandir a solução aproximada ( $F^*(\mathbf{x})$ ) em uma base finita (POGGIO e GIROSI, 1990):

$$F^*(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{m_1} w_i \varphi_i(\mathbf{x}) \quad (2 - 89)$$

onde  $\{\varphi_i(x) \mid i = 1, 2, \dots, m_1\}$  é um conjunto de funções de base radial linearmente independentes, onde geralmente  $m_1 \leq N$ . Os novos pesos são representados por  $w_i$ .

Podemos redefinir  $F^*(x)$  para na seguinte equação:

$$F^*(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{m_1} w_i G(\mathbf{x}, \mathbf{t}_i) = \sum_{i=1}^{m_1} w_i G(\|\mathbf{x} - \mathbf{t}_i\|) \quad (2 - 90)$$

onde os centros  $\{\mathbf{t}_i \mid i = 1, 2, \dots, m_1\}$  deverão ser determinados.

Agora, o problema se reduz a minimização da função de custo abaixo:

$$\beta(F^*) = \sum_{i=1}^N \left( d_i - \sum_{j=1}^{m_1} w_j G(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{t}_j\|) \right)^2 + \lambda \|\mathbf{D}F^*\|^2 \quad (2 - 91)$$

onde  $w_j$  representa o conjunto de pesos que devemos determinar para minimizar o funcional acima.

Assim, se o parâmetro de regularização  $\lambda$  for próximo de zero, o vetor de peso  $\mathbf{w}$  que satisfaz a minimização da equação (2 - 91) é dado como (HAYKIN, 2001):

$$\mathbf{w} = (\mathbf{G}^T \mathbf{G})^{-1} \mathbf{G}^T \mathbf{d} \quad (2 - 92)$$

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} G(t_1, t_1) & \cdots & G(t_1, t_{m_1}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ G(t_N, t_1) & \cdots & G(x_N, t_{m_1}) \end{bmatrix} \quad (2 - 93)$$

$$\mathbf{d} = [d_1, d_2, \dots, d_N]^N \quad (2 - 94)$$

$$\mathbf{w} = [w_1, w_2, \dots, w_{m_1}]^N \quad (2 - 95)$$

onde  $\mathbf{G}$  representa uma matriz de funções de Green com dimensão  $N \times m_1$  e  $\mathbf{d}$  é o vetor resposta desejada da rede.

As diferenças entre uma rede RBF generalizada e uma rede RBF regularizada são: a primeira possui  $m_1$  nós ocultos, onde  $m_1$  é normalmente menor que o número de  $N$  exemplos de treinamento; na rede RBF generalizada, tanto o vetor de pesos quanto as posições dos centros das funções de base radial devem ser aprendidos, pois são considerados parâmetros desconhecidos. Em relação à rede RBF regularizada, o único parâmetro desconhecido é o vetor de pesos da camada de saída, já que as funções de Green, definidas como funções de ativação dos nós ocultos, são centradas nos pontos de treinamento.

Por fim, se faz oportuno ressaltar as principais diferenças entre uma rede MLP e uma rede RBF (BISHOP, 1995, HAYKIN, 2001):

1. Uma rede MLP contém uma ou mais camadas de neurônios ocultos e apresenta um complexo padrão de conectividade. Além disso, podem utilizar diferentes funções de ativação na mesma rede. A rede RBF, no entanto, possui uma arquitetura simples consistindo de duas camadas de processamento: uma camada oculta cujos nós se valem de funções de base radial, e uma segunda camada que nada mais é que um combinador linear das funções da camada anterior;
2. Redes MLP produzem aproximações globais de um mapeamento não-linear de entrada e saída. Por outro lado, os nós ocultos de uma rede RBF podem utilizar funções de ativação não-lineares com decaimento exponencial (função gaussiana) para produzir aproximações locais em mapeamentos não-lineares de entrada e saída;
3. Como estratégia de treinamento, redes MLP utilizam a técnica de retropropagação do erro, o que faz essas redes apresentarem um aprendizado relativamente lento. Todavia, sua capacidade de generalização é considerada robusta. Por outro lado, o treinamento de uma rede RBF é dado em dois estágios: a primeira etapa consiste em definir a função de base radial a ser utilizada através de técnicas não-supervisionadas; já a segunda, visa determinar o vetor de pesos utilizando uma técnica de treinamento

supervisionado de rápida convergência. O erro final obtido por uma rede RBF é, geralmente, menor que o erro final obtido em uma rede MLP.

# Capítulo 3

## Metodologia

### 3.1 Escolha dos parâmetros de cálculo e modelagem do problema

Primeiramente, para construir um modelo matemático que venha substituir o método de MCGINLEY (1992a e 1992b), que estima a dose de nêutrons além das barreiras laminadas, foi feita uma seleção de parâmetros para a construção do modelo de cálculo, bem como uma modelagem do problema a partir dos mesmos.

A escolha dos parâmetros de cálculo foi realizada tendo como base: a facilidade de obtenção dos mesmos (presentes no planejamento da sala de radioterapia) e na influência direta de tais parâmetros na produção e/ou atenuação de fotonêutrons ao longo da barreira laminada. Logo, os parâmetros selecionados que satisfazem as condições supracitadas são: espectro de fótons ( $E$ ), material metálico da barreira ( $M$ ), distância do isocentro à face interna da barreira ( $D$ ), número total de TVLs da barreira ( $n_{TTVL}$ ), espessura da primeira camada de concreto da barreira ( $T_1$ ), espessura da segunda camada de concreto da barreira ( $T_2$ ) e espessura da camada metálica da barreira ( $T_m$ ).

Cabe ressaltar que poderiam ser escolhidos mais parâmetros, porém o trabalho realizado foi no âmbito computacional e o aumento no número destes impacta diretamente no número de combinações possíveis da modelagem – podendo inviabilizar o trabalho pelo número excessivo de casos a serem simulados. Em adição, o aumento no número de parâmetros não garante que o resultado final seja influenciado de modo substancial.

Após a seleção dos parâmetros essenciais à construção do modelo de cálculo proposto, foi necessária a modelagem do problema em si, de modo a reproduzir o

cenário para o qual tentamos obter a solução. Sendo assim, a modelagem estabelecida representa casos de salas de radioterapia com dimensões reais em que o feixe de fótons produzido pelo acelerador incide em diferentes configurações de barreiras primárias laminadas.

A composição da barreira primária foi considerada como sendo uma combinação de concreto comum e de lâminas metálicas. Os metais utilizados para este fim foram o ferro e o chumbo, ambos com número atômico elevado – agindo como uma potencial fonte de fotonêutrons.

A modelagem apresentada neste tópico compreende os casos em que há a produção de fotonêutrons para salas de radioterapia de dimensões reais. Logo, os parâmetros selecionados anteriormente devem variar em intervalos encontrados em salas cujas dimensões sejam não só possíveis como praticáveis e, que a emissão de fotonêutrons possa representar um potencial risco para a segurança radiológica dos envolvidos (ou não) no processo. Deste modo, os parâmetros foram delimitados da seguinte forma: os espectros de fótons emitidos pelo acelerador linear foram escolhidos como 15 MV e 18 MV, descritos por DARYOUSH e ROGERS (2002); os materiais da barreira sendo chumbo ou ferro; distância do isocentro à face interna da barreira variando de 2 a 6 m em passos de 1 em 1 m; espessura da primeira camada de concreto da barreira variando de 0 a 5,5 TVLs em passos de 0,5 TVLs; espessura da segunda camada de concreto da barreira variando igual ao da primeira camada; espessura da camada metálica da barreira variando de 0,5 a 2 TVLs em passos de 0,5 TVLs.

Com o propósito de abranger algumas das possibilidades viáveis de construção, as lâminas metálicas consideradas foram posicionadas em três localizações distintas: na superfície interna, no meio e na superfície externa da barreira de concreto. A espessura total da barreira foi configurada para ter 4, 5 ou 6 TVLs, levando em consideração valores típicos para uma sala que abriga um

acelerador linear cujos espectros de fótons produzidos possam alcançar energias de 15 ou 18 MeV.

Além disso, o esquema contou com um tamanho de campo (F) de  $40 \times 40 \text{ cm}^2$  projetado sobre o isocentro e dois detectores, um fixado no isocentro para dose de raios-X ( $D_x$ ) e o outro a 30 cm da face externa da barreira primária (na mesma direção do feixe de fótons) para estimar o equivalente de dose de nêutrons ( $H_n$ ). Sendo assim, tanto o tamanho de campo quanto a posição dos dois detectores se manterão fixas daqui em diante e, portanto, não serão levados em consideração como parâmetros variáveis no modelo final. A Figura 3.1 ilustra a geometria e os parâmetros pertinentes à modelagem.

Para as simulações desse trabalho foi utilizado o concreto convencional cuja densidade é de  $2,35 \text{ g.cm}^{-3}$  (NCRP, 2005). Quanto à composição do concreto, esta foi baseada em JAEGER *et al.* (1975).

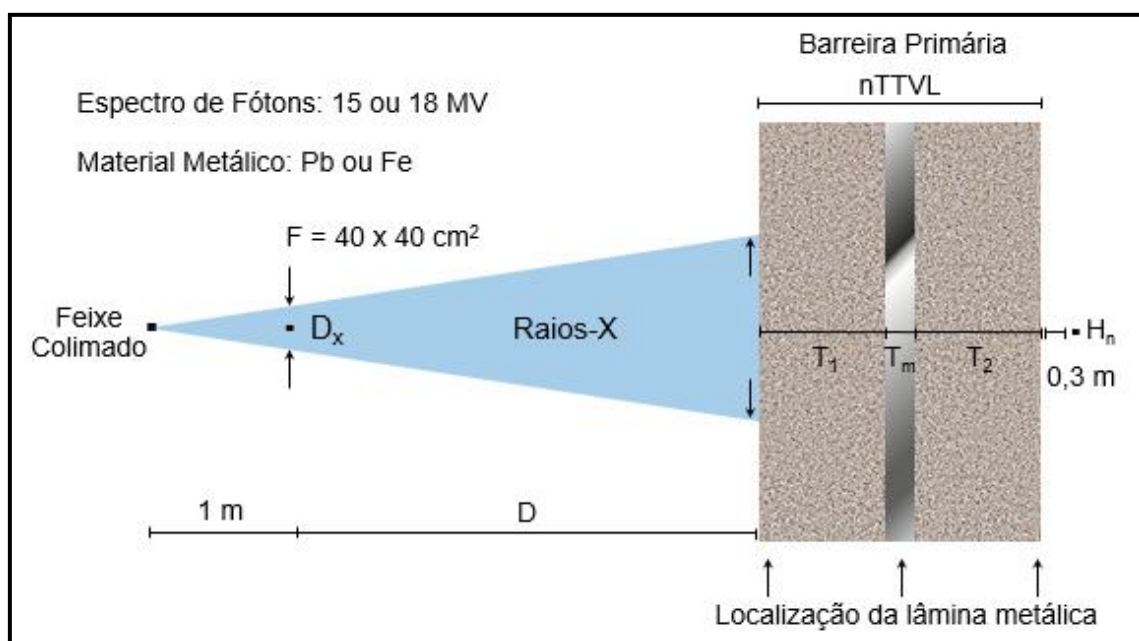


Figura 3.1 – Ilustração da geometria vista de perfil e a identificação dos parâmetros pertinentes à modelagem.

### 3.2 Geração, organização e simulação dos inputs do MCNPX

A próxima etapa após a seleção dos parâmetros e modelagem do problema foi estabelecer um meio computacional para simular os processos físicos envolvidos no ambiente de interesse e, por fim, obter os equivalentes de dose de nêutrons após combinações distintas de barreiras laminadas.

Para o nível proposto para essa pesquisa, foi necessária a escolha de um código computacional robusto e com uma vasta biblioteca de seções de choque. Logo, para solucionar essa questão, foi utilizada a versão 2.6 do Código MCNPX. Versão esta capaz de fornecer todo o suporte exigido tanto para o leque de interações físicas de interesse (seções de choque) quanto para as faixas energéticas envolvidas nesse trabalho.

Por outro lado, a construção de um *input* que contenha todos os comandos necessários para a execução de uma simulação no MCNPX, exige tempo e certo trabalho. Em adição, o elevado número de combinações pertinente à modelagem faz com que seja necessária a construção de vários *inputs* para representar caso a caso dentro das geometrias possíveis. Logo, pode-se notar que o extenso número de *inputs* facilmente inviabilizaria esse trabalho – pelo tempo exigido ou propensão ao erro humano, é claro, pela quantidade de combinações propostas.

Com o propósito de contornar esse obstáculo, foi utilizada a versão 2010.a do MATLAB para a construção e execução de uma rotina capaz de não só produzir todos os *inputs* correspondentes às combinações possíveis da modelagem descrita, como também, codificar o nome de cada um destes e de organizá-los em pastas e subpastas.

Para fins práticos, os inputs foram organizados em três grandes grupos. Cada um desses grupos foi formado por um par composto de energia máxima do espectro de fótons e material, sendo eles: 18 MeV e chumbo; 15 MeV e chumbo; 18 MeV e ferro. Cabe ressaltar que a combinação entre 15 MeV e Fe não será aproveitada, pois



um espectro de menor energia incidindo em ferro não produz uma quantidade suficiente nêutrons para que seja necessária uma medida extra de proteção.

O número de *inputs* compreendido em cada uma das três pastas correspondentes às combinações de energia e material foi de 180 *inputs*, totalizando 540 *inputs* a serem simulados. Para chegar a este valor, deve-se multiplicar o número de possibilidades correspondentes ao posicionamento do metal na barreira (três posições) e suas respectivas TVLs (quatro valores distintos), vezes o número de possibilidades da distância do isocentro à face interna da barreira (cinco possibilidades), vezes o número de casos possíveis de TVLs da barreira primária (três casos) e, por fim, multiplicar o número obtido anteriormente (que corresponde a 180) pelo número de grupos pertinentes à combinação de energia e material - três grandes grupos. O esquema organizacional é descrito na Figura 3.2.

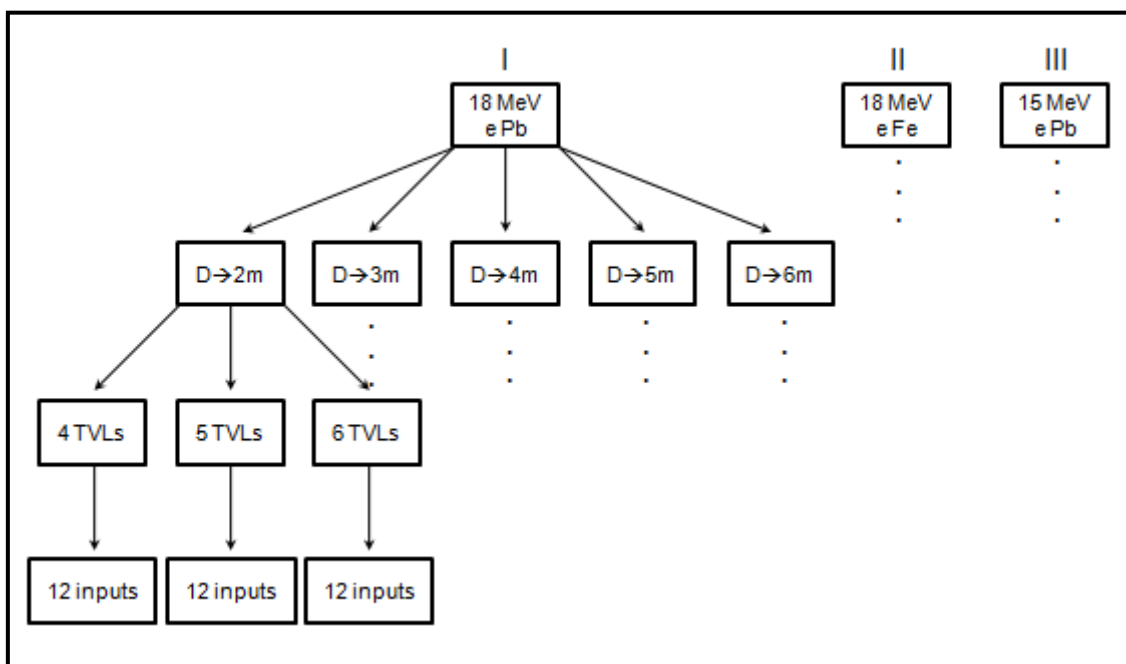


Figura 3.2 – Ilustração do esquema organizacional correspondente à geração e armazenamentos dos inputs.

Outro aspecto solucionado foi a codificação dos nomes de cada arquivo de *input* gerado e armazenado, de modo que a informação presente em cada um destes pudesse ser acessada rapidamente a partir da visualização de seu nome. Para tal,

foram selecionados indicadores mnemônicos alfanuméricos a fim de identificar diretamente os principais parâmetros utilizados na modelagem, totalizando sete caracteres – descritos no anexo.

Os resultados das simulações no MCNPX foram obtidos utilizando o comando F5 “*tally*” em conjunto com os cartões DF e DE para converter a fluência neutrônica obtida de partículas/cm<sup>2</sup> em equivalente de dose ambiente (Sv). Para reduzir as incertezas a um nível aceitável, cada simulação foi executada em um período de 48 horas, e o número médio de histórias simuladas para cada input de treinamento foi de  $7 \times 10^8$  - levando em conta a média dos 540 inputs das três redes. Em adição, foi utilizada a técnica de redução de variância baseada na divisão geométrica de células para reduzir a incerteza dos resultados dentro do tempo computacional estipulado para as simulações. Todos os equivalentes de dose ambiente para nêutrons gerados como resultados das simulações no MCNPX encontram-se normalizados por gray de dose absorvida de fótons no isocentro.

### **3.3 Validação das simulações no MCNPX**

A validação das simulações no MCNPX foi feita utilizando-se os dados obtidos por FACURE *et al.* (2008). Na referência citada foi executado um conjunto de *inputs* no intuito de reproduzir os resultados experimentais de CARDMAN (1981) para o espectro de emissão de fotonêutrons observado para chumbo-208 após a excitação por raios gama de 13,27MeV. Para estabelecer uma comparação entre os resultados das simulações e os valores medidos, foi calculada a área comum entre os dois gráficos, sendo esta correspondente a 80%. Logo, pode-se inferir que há uma boa concordância entre esses valores, como mostrado na Figura 3.3. Todas as incertezas das simulações apresentaram-se abaixo de 1%.

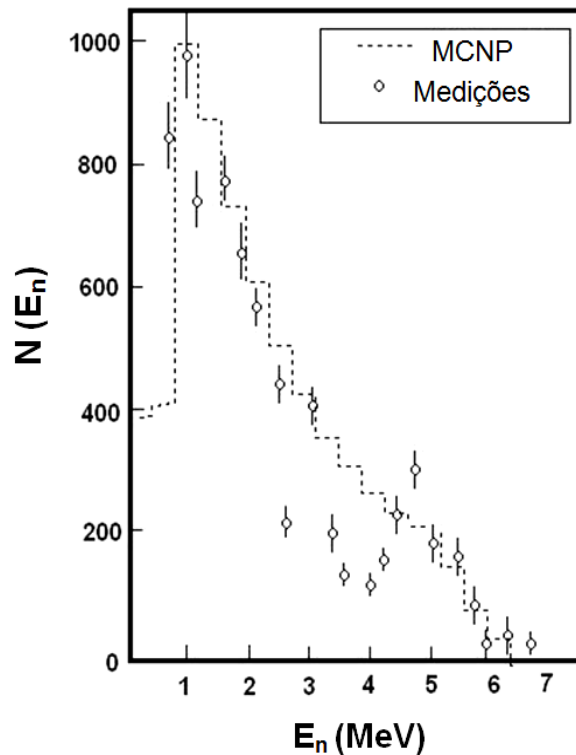


Figura 3.3 – Comparação entre os valores experimentais e simulados para o espectro de emissão de nêutrons gerado pela incidência de raios gama de 13,27MeV em lâminas de chumbo-208 (FACURE *et al.*,2008).

### 3.4 Treinamento das redes neuronais

Após a conclusão das simulações computacionais, o próximo passo é utilizar os resultados provenientes destas, ou seja, os equivalentes de dose de nêutrons, para treinar redes neuronais que sejam capazes de “aprender” o comportamento matemático – curva que melhor se ajusta aos dados de treinamento – que está por trás do processo físico relacionado ao problema.

Neste trabalho, o objetivo final ao se treinar uma rede neuronal, que estabeleça uma curva ou superfície que melhor se ajusta aos dados de treinamento, é poder prever o resultado do equivalente de dose de nêutrons em variações da geometria estudada – capacidade de generalização da rede.

Para que isso seja possível, primeiramente deve-se selecionar o tipo de rede neuronal que mais se adéqua ao caso a ser estudado. Logo, a escolha da rede deve ser feita de acordo com o que se quer solucionar, pois há uma variedade de

arquitecturas de redes e, cada uma destas é voltada para um determinado tipo de problema específico.

Como a rede neuronal exigida para essa pesquisa visa, basicamente, realizar um ajuste de curva, o termo “aprender” nada mais é que o equivalente a encontrar uma superfície, em um espaço multidimensional, que forneça o melhor ajuste para os dados de treinamento. Logo, a rede de base radial se torna a melhor alternativa para esse tipo de problema.

Cabe ressaltar que uma rede *perceptron* de múltiplas camadas também foi considerada, uma vez que ela também é capaz de solucionar o problema em questão. Entretanto, para a proposta de treinamento exigida nessa pesquisa, a rede RBF foi nitidamente mais rápida e nos forneceu um erro final muito menor em relação à rede MLP. Portanto, para o treinamento das redes em geral, só foram utilizadas as redes RBF por razões óbvias.

A utilização das redes em vez do uso direto do MCNPX pode ser justificada pelos seguintes aspectos: as redes apresentam respostas extremamente rápidas quando comparadas ao MCNPX; um cenário complexo exige muito conhecimento e trabalho para sua concepção e simulação no MCNPX. Além disso, as simulações podem levar dias para apresentar uma incerteza satisfatória; por fim, a criação de uma interface gráfica simples, decorrente de uma rede, pode ser uma ferramenta útil, uma vez que não é necessário o conhecimento de códigos de Monte Carlo para a obtenção da solução de um determinado tipo de problema.

Neste trabalho foram treinadas três redes no total, sendo estas identificadas pelo par material e energia máxima do espectro de fótons: Pb/15MeV, Pb/18MeV e Fe/18MeV. Cada uma dessas redes é capaz de computar o equivalente de dose de nêutrons somente para um dado tipo de espectro e material, explicando assim a razão de serem três redes e não uma. Tal escolha foi baseada, primeiramente, no fato de que incluir o material metálico da barreira nos dados de treinamento não faz o menor sentido no que diz respeito a um ajuste de curva. Segundo, a inclusão de somente

duas possibilidades de espectros de fótons configura certa carência no montante de valores disponíveis para o treinamento.

Os dados de treinamento que foram utilizados para treinar cada uma das três redes de base radial foram compreendidos pelas variáveis de entrada e saída. As variáveis de entrada foram dadas pelos seguintes parâmetros:  $D$ ,  $T_1$ ,  $T_2$  e  $T_m$ . Já os dados de saída corresponderam somente aos equivalentes de dose de nêutrons obtidos pelas simulações. A variável  $nTTVL$  não foi utilizada por razões óbvias, uma vez que tal informação já estaria presente na soma de  $T_1$ ,  $T_2$  e  $T_m$ .

Antes que qualquer rede fosse treinada, tanto os dados de entrada quanto os de saída foram tratados de modo que se tornassem próprios para o treinamento. Para isso foi feita uma rotina no MATLAB (versão 2010.a) capaz de extrair, dos *outputs* do MCNPX, as informações relativas ao valor de cada variável de entrada e saída, bem como capaz de organizar e salvar tais informações em uma matriz dentro de um arquivo no próprio MATLAB. A matriz incumbida de armazenar as informações foi composta por 5 linhas e 180 colunas, onde as quatro primeiras linhas correspondem aos dados de entrada e, a última linha, aos dados de saída. Já as 180 colunas representam o número total de outputs simulados no MCNPX para o treinamento de uma única rede. Restando assim mais 360 outputs para as outras duas redes.

Para o treinamento das três redes de base radial foi utilizada uma ferramenta do MATLAB v. 2010.a – *toolbox* – específica para redes neuronais. O comando realizado para este fim foi o *newgrnn*, que corresponde a uma rede de base radial generalizada. O *spread* selecionado para otimizar o treinamento da rede foi de 0.3 e não o padrão (*spread* 1.0). A razão de um *spread* 0.3 está no fato de que este valor corresponde a um menor alargamento das funções de Green, contribuindo assim para um melhor ajuste aos picos e vales produzidos pelos pontos dos equivalentes de dose, que se encontram muito próximos. A figura 3.4 ilustra a arquitetura da rede de base radial utilizada no presente trabalho.

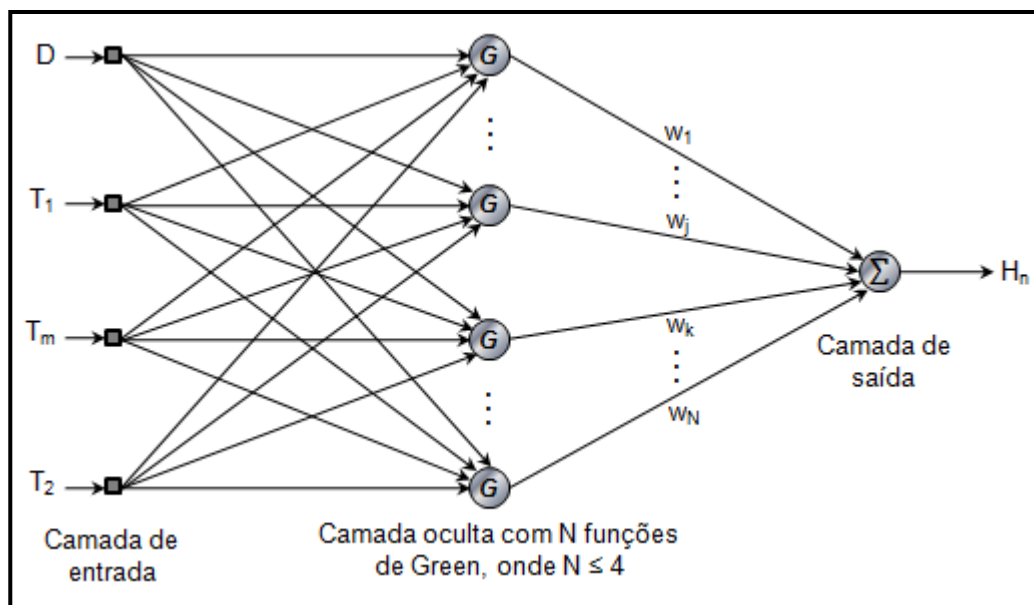


Figura 3.4 – Ilustração da arquitetura da rede de base radial generalizada utilizada.

### 3.5 Capacidade de generalização das redes neurais treinadas

A capacidade de generalização de uma rede neuronal se refere ao fato de a mesma poder produzir saídas adequadas para entradas que não estavam presentes durante o seu treinamento (HAYKIN, 2001). Neste sentido, a verificação da capacidade de generalização da rede pode ser feita alimentando-a com dados de entrada novos e estabelecendo uma comparação entre seus dados de saída com um valor de referência. A validação ou comprovação do bom desempenho das redes foi realizada tendo os resultados das simulações do MCNPX como referência.

Para checar a validade das três redes treinadas neste trabalho, foram feitas tabelas e gráficos comparativos entre os resultados gerados pelo MCNPX, pelo método de McGinley e pelas redes treinadas. O número de resultados comparados, para cada uma das redes, foi de 10% do número total de inputs do treinamento de cada rede, ou seja, 18 inputs. Logo, cada tabela e gráfico comparativos contaram com 18 novos casos, onde os parâmetros variáveis foram diferentes daqueles inseridos durante o treinamento das redes.

A escolha dos valores dos parâmetros foi feita ao acaso, porém, levando em conta os valores limítrofes dos dados de treinamento. Em adição, foram pré-selecionadas diferentes regiões dentro do hiperplano da função de equivalente de dose de nêutrons para que esses parâmetros fossem sorteados. A necessidade de selecionar previamente determinadas regiões se deu por uma razão óbvia: uniformizar ao máximo os dados dentro do raio de ação do modelo, sem retirar a imparcialidade do teste. Assim, foi garantido que um pouco de cada região estivesse sendo testada. Para melhor entender como e quais foram as regiões pré-selecionadas do hiperplano, basta visualizar a Figura 3.5.

Olhando o modo como foram armazenados os inputs do MCNPX, pode-se inferir que as regiões do parâmetro distância (D) são fundamentais na varredura de todo o modelo. Deste modo, foram destinados três casos (ou inputs-teste) para as regiões de contorno (D = 2m e D = 6m) e quatro casos para cada uma das outras regiões. Portanto, dentro de cada região representada por um valor de D, um input-teste pôde compreender quaisquer valores de  $T_1$ ,  $T_m$  e  $T_2$ , desde que estivessem dentro dos limites especificados no treinamento.

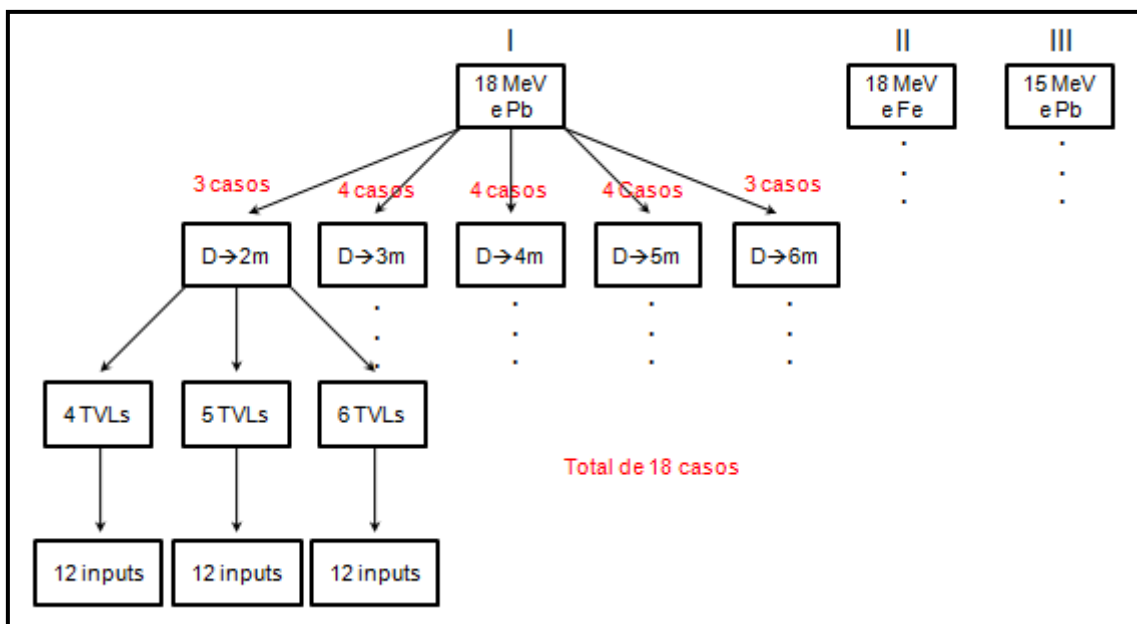


Figura 3.5 – Distribuição dos inputs-teste de acordo com as regiões.

Para avaliar o nível de ruído inserido nas redes, foram elaborados histogramas contendo as incertezas inerentes aos equivalentes de dose de nêutrons dos 180 inputs de treinamento – para cada uma das três redes. Deste modo, pôde ser feita uma análise geral da “qualidade” dos dados produzidos pelas simulações no MCNPX. Por fim, foi necessária a elaboração de um gráfico que tivesse a capacidade de nos fornecer a distribuição espacial dos erros. Para tal, o mesmo foi construído tendo em um de seus eixos uma sequência (baseada na codificação dos nomes de cada um dos inputs) de todos os 180 inputs e, no outro eixo, as incertezas dos equivalentes de dose de nêutrons inerentes a cada um dos inputs.



# Capítulo 4

## Resultados e Discussões

### 4.1.1 Análise do ruído inserido na rede neuronal Pb18

O ruído presente nas redes neuronais deste trabalho está vinculado às incertezas presentes em cada resultado do equivalente de dose dos dados de treinamento. Neste sentido, antes que qualquer análise possa ser feita no tocante ao comportamento de uma rede específica, devemos avaliar o ruído embutido em seu conjunto de dados de treinamento. A Figura 4.1 ilustra o histograma das incertezas dos equivalentes de dose de nêutrons ( $H_n$ ) correspondentes aos dados de treinamento da rede Pb18 - combinação entre chumbo e espectro de fótons de 18 MV.

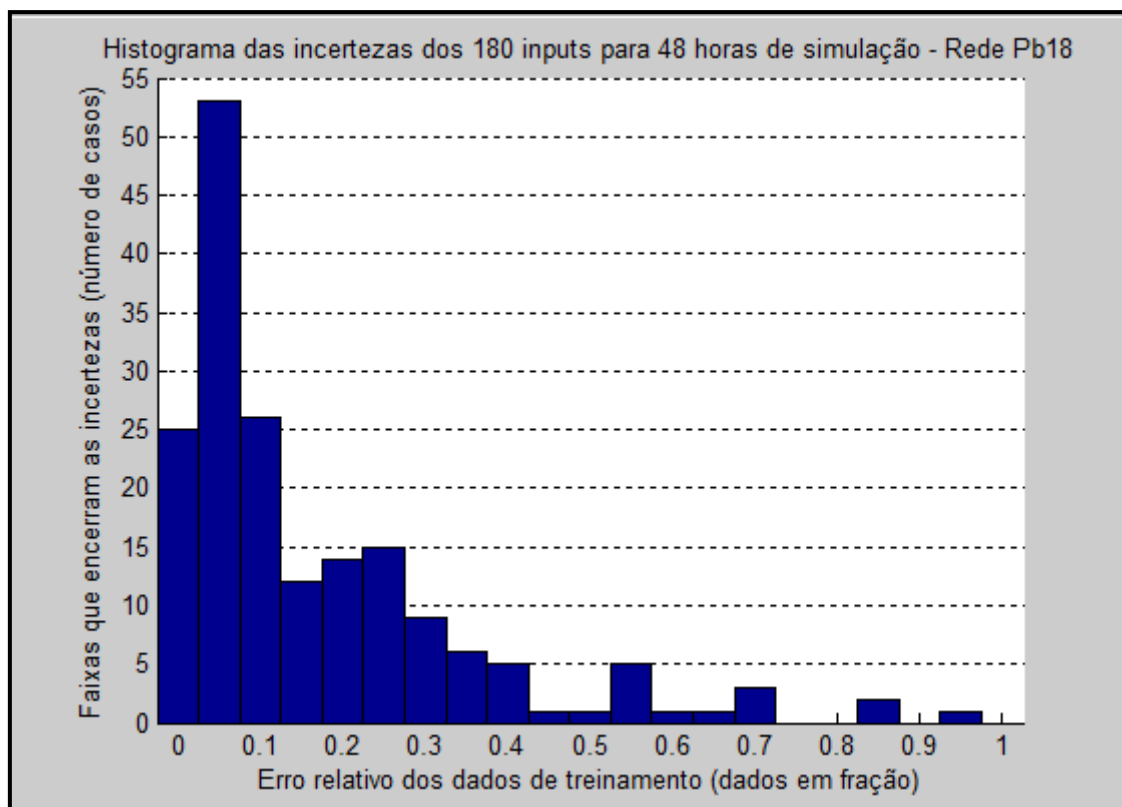


Figura 4.1 – Histograma dos erros relativos dos inputs de treinamento da rede Pb18.

De acordo com o histograma da Figura 4.1, os valores de  $H_n$  cujas incertezas são inferiores a 30% correspondem a 80,56% do total do conjunto de treinamento. E dentro desse montante, 71,72% dos casos possuem incertezas abaixo de 15%. Considerando o vasto volume de material atenuador presente nas barreiras primárias, é notável que os valores observados das incertezas tenham alcançado um patamar relativamente baixo – do ponto de vista de monitoração ambiental. Cabe ressaltar que, na construção dos inputs do MCNPX, foi implementada uma técnica de redução de variância (divisão geométrica) a fim de reduzir, ao máximo, as incertezas de  $H_n$ .

Por outro lado, os 19,44% dos resultados que possuem incertezas acima de 30%, contribuem para a inserção de ruídos acima do que foi considerado como razoável. Entretanto, torna-se demasiadamente complexo reduzir esses valores para dentro de uma faixa considerada “razoável”, pois existem limitações físicas e matemáticas que impedem tal execução. Logo, em vez de descartar esses valores, basta considerar que em algumas regiões do hiperplano de  $H_n$  o comportamento da função não será preciso.

Para determinar quais regiões do hiperplano de  $H_n$  oferecerão as repostas mais (ou menos) adequadas, foi necessário observar o comportamento das incertezas em relação à sequência codificada dos inputs de treinamento (Figura 4.2). Como mencionado anteriormente, a codificação dos inputs foi feita utilizando-se indicadores mnemônicos alfanuméricos a fim de identificar, diretamente, os principais parâmetros da modelagem presentes em um determinado input. Dessa forma, foi possível “rastrear” as regiões responsáveis pelas incertezas mais elevadas através de uma observação minuciosa. Examinando a Figura 4.2, pode-se notar que há um comportamento cíclico que se repete cinco vezes. Por inferência direta, podemos associar esse comportamento ao próprio padrão de armazenamento dos inputs, observado na Figura 3.2, onde o parâmetro distância isocentro-barreira (D) encerra cinco regiões distintas. Dentro de cada uma dessas cinco regiões ocorre um padrão similar que se repetirá para cada valor distinto de D. Esse padrão pode ser facilmente

visualizado, nas três redes, como a varredura dos três valores do número total de TVL (nTTVL), que se repete para cada um dos cinco valores de D (2, 3, 4, 5 e 6 m).

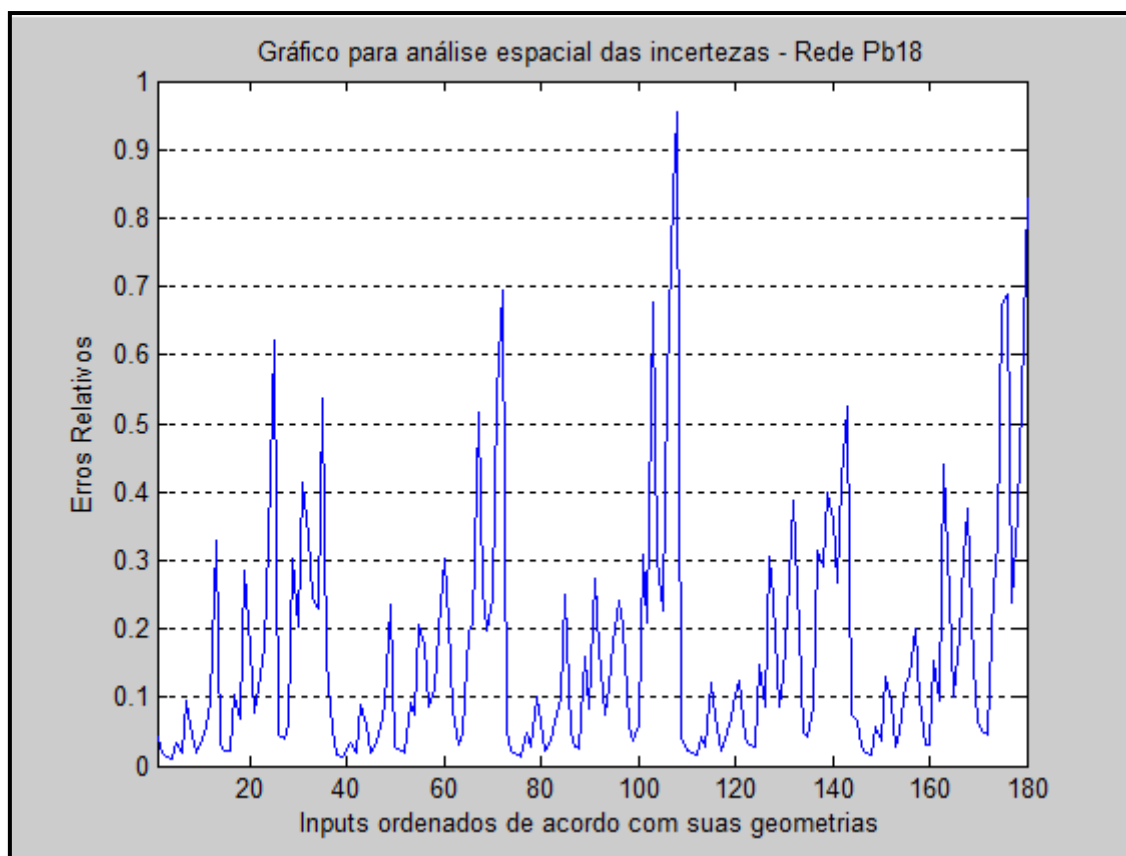


Figura 4.2 – Ilustração do gráfico de análise espacial das incertezas da rede Pb18.

Como esperado, as incertezas tendem a ser menores em regiões onde há um menor valor de nTTVL e um maior valor de  $T_m$ . Uma possível explicação para esse evento se baseia no fato de que barreiras menos espessas não só atenuam menos o feixe de fótons como também os nêutrons oriundos de reações fotonucleares. Ademais, um maior valor de  $T_m$  oferece mais material para interações entre um fóton e um núcleo metálico, por conseguinte, mais nêutrons serão ejetados do material e menor será a incerteza final no detector  $H_n$ . Uma conclusão direta que pode ser retirada da observação acima é que a rede Pb18 é capaz de operar com maior precisão nas regiões onde o equivalente de dose de nêutrons é mais elevado. Um comportamento desejável para o propósito final do modelo.

#### 4.1.2 Estudo da capacidade de generalização da rede neuronal Pb18: comparação entre a rede, o MCNPX e o método de McGinley

De acordo com o que foi mencionado no tópico 3.5, a escolha ao acaso dos parâmetros de entrada, em regiões previamente determinadas, foi necessária para que a capacidade de generalização de uma dada rede fosse avaliada. Assim, para explorar a capacidade de produzir saídas adequadas na rede Pb18, foram simulados 18 inputs cujos parâmetros podem ser visualizados na Tabela 4.1.

Tabela 4.1 – Valores dos parâmetros inseridos nos inputs de teste da rede Pb18.

Valores dos parâmetros de entrada dos inputs-teste da rede Pb18					
Inputs	D(m)	nTTVL	T1	Tm	T2
1	2	4	0	0.4	3.6
2	2	4	3.65	0.35	0
3	2	5	2.4	0.2	2.4
4	3	5	0	0.9	4.1
5	3	5	0	1.9	3.1
6	3	5	4.3	0.7	0
7	3	6	2.65	0.7	2.65
8	4	4	1.2	1.6	1.2
9	4	4	1.45	1.1	1.45
10	4	6	0	1.2	4.8
11	4	6	5.2	0.8	0
12	5	4	0	1.4	2.6
13	5	4	2.7	1.3	0
14	5	5	1.85	1.3	1.85
15	5	5	3.4	1.6	0
16	6	5	0	1.7	3.3
17	6	5	3.1	1.9	0
18	6	6	2.1	1.8	2.1

As Tabelas 4.2, 4.3 e 4.4 estabelecem uma comparação entre os resultados do método de McGinley e do MCNPX, da rede Pb18 e do MCNPX e, por fim, da rede Pb18 e do método de McGinley. Os resultados exibidos são dados em taxa de equivalente de dose ambiente para nêutrons ( $\mu\text{Sv/semana}$ ).

Tabela 4.2 – Comparação entre o MCNPX e do método de McGinley – Pb18.

<b>Quadro comparativo entre os resultados do MCNPX e do método de McGinley</b>				
Inputs	Resultado do MCNPX (uSv/sem)	Incerteza do MCNPX	Resultado Eq. McGinley (uSv/sem)	Razão MCNPX/McGinley
1	2.27E+0	6.5%	1.05E-1	21.62
2	9.41E+2	16.4%	2.87E+2	3.28
3	5.38E-1	42.4%	8.88E-2	6.06
4	1.76E-1	6.0%	1.29E-2	13.64
5	4.02E+0	2.3%	8.39E-1	4.79
6	1.38E+2	21.5%	6.68E+1	2.07
7	3.82E-2	51.5%	1.69E-2	2.26
8	4.04E+2	4.0%	1.59E+2	2.54
9	1.09E+2	7.6%	3.79E+1	2.88
10	7.46E-3	4.3%	7.00E-4	10.66
11	7.93E+0	47.9%	9.13E+0	0.87
12	2.05E+1	1.9%	7.03E+0	2.92
13	3.15E+3	5.3%	2.37E+3	1.33
14	6.66E+0	23.2%	3.01E+0	2.21
15	4.55E+2	13.6%	4.48E+2	1.02
16	9.54E-1	3.2%	3.63E-1	2.63
17	7.91E+2	10.8%	8.45E+2	0.94
18	7.23E-1	34.8%	5.26E-1	1.37

Tabela 4.3 – Comparação entre os resultados do MCNPX e da rede neuronal Pb18.

<b>Quadro comparativo entre os resultados do MCNPX e da rede neuronal Pb18</b>				
Inputs	Resultado do MCNPX (uSv/sem)	Incerteza do MCNPX	Resultado da Rede (uSv/sem)	Razão MCNPX/Rede
1	2.27E+0	6.5%	2.89E+0	0.79
2	9.41E+2	16.4%	1.27E+3	0.74
3	5.38E-1	42.4%	1.36E+0	0.40
4	1.76E-1	6.0%	2.41E-1	0.73
5	4.02E+0	2.3%	6.15E+0	0.65
6	1.38E+2	21.5%	2.01E+2	0.69
7	3.82E-2	51.5%	1.25E-1	0.31
8	4.04E+2	4.0%	3.90E+2	1.04
9	1.09E+2	7.6%	9.35E+1	1.17
10	7.46E-3	4.3%	1.05E-2	0.71
11	7.93E+0	47.9%	6.15E+0	1.29
12	2.05E+1	1.9%	2.78E+1	0.74
13	3.15E+3	5.3%	3.58E+3	0.88
14	6.66E+0	23.2%	1.06E+1	0.63
15	4.55E+2	13.6%	5.43E+2	0.84
16	9.54E-1	3.2%	1.26E+0	0.76
17	7.91E+2	10.8%	7.29E+2	1.09
18	7.23E-1	34.8%	9.48E-1	0.76

Tabela 4.4 – Comparação entre os resultados da rede Pb18 e do método de McGinley.

<b>Quadro comparativo entre os resultados da rede Pb18 e do método de McGinley</b>				
<b>Inputs</b>	<b>Resultado do MCNPX (uSv/sem)</b>	<b>Incerteza do MCNPX</b>	<b>Resultado da Rede (uSv/sem)</b>	<b>Resultado Eq. McGinley (uSv/sem)</b>
1	2.27E+0	6.5%	2.89E+0	1.05E-1
2	9.41E+2	16.4%	1.27E+3	2.87E+2
3	5.38E-1	42.4%	1.36E+0	8.88E-2
4	1.76E-1	6.0%	2.41E-1	1.29E-2
5	4.02E+0	2.3%	6.15E+0	8.39E-1
6	1.38E+2	21.5%	2.01E+2	6.68E+1
7	3.82E-2	51.5%	1.25E-1	1.69E-2
8	4.04E+2	4.0%	3.90E+2	1.59E+2
9	1.09E+2	7.6%	9.35E+1	3.79E+1
10	7.46E-3	4.3%	1.05E-2	7.00E-4
11	7.93E+0	47.9%	6.15E+0	9.13E+0
12	2.05E+1	1.9%	2.78E+1	7.03E+0
13	3.15E+3	5.3%	3.58E+3	2.37E+3
14	6.66E+0	23.2%	1.06E+1	3.01E+0
15	4.55E+2	13.6%	5.43E+2	4.48E+2
16	9.54E-1	3.2%	1.26E+0	3.63E-1
17	7.91E+2	10.8%	7.29E+2	8.45E+2
18	7.23E-1	34.8%	9.48E-1	5.26E-1
<b>Legenda de Cores</b>				
Taxa de dose de nêutrons acima do limite para o público - 20 uSv/sem				
Taxa de dose de nêutrons acima do limite para o IOE - 400 uSv/sem				
Valores em que a rede respondeu de maneira mais eficiente que a Eq. de McGinley				
Ponto em que não houve diferença significativa nos resultados				

Os resultados fornecidos pelo MCNPX foram normalizados por gray de dose absorvida no isocentro devido aos raios-X do feixe do acelerador ( $\mu\text{Sv}/\text{Gy}$ ). Logo, para a obtenção dos resultados das taxas de equivalente de dose em  $\mu\text{Sv}/\text{semana}$ , foi necessário multiplicar cada resultado proveniente do MCNPX pela carga de trabalho semanal do acelerador, cujo valor médio considerado foi de 1000 Gy/semana.

Ao observar a Tabela 4.2 constatou-se que aproximadamente 72% dos resultados comparados entre o MCNPX e o método de McGinley apresentaram razões acima de dois (desvios acima de 100%), alcançando um patamar de 21.62 para o input 1. Por outro lado, somente 28% dos resultados apresentaram desvios abaixo de dois e acima de 0.5.

Na Tabela 4.3, os resultados que apresentaram razões abaixo de 2 e acima de 0.5 correspondem a 89% do total dos resultados, e somente 11% apresentaram razões abaixo de 0.5. Os dois pontos que apresentaram os maiores desvios estão localizados em uma região de baixo equivalente de dose de nêutrons e incertezas elevadas. Cabe ressaltar que os resultados provenientes de regiões onde a dose é muito baixa não são relevantes do ponto de vista da radioproteção, uma vez que o principal objetivo do modelo é fornecer resultados conservativos nas regiões críticas – regiões em que as doses estão acima do limite do público ou dos IOEs.

Para conceber uma comparação direta entre o método de McGinley e as três redes neuronais – Pb18, Pb15 e Fe18 – foi necessário estabelecer três critérios. O primeiro critério considerou que se ambos os resultados de uma rede e do método de McGinley estiverem dentro da margem de erro do valor de referência fornecida pelo MCNPX, estes não serão considerados com diferenças significativas. Já o segundo critério determina que, caso um único resultado esteja dentro da margem de erro do valor de referência, este será o resultado válido. No terceiro e último critério, caso nenhum resultado esteja dentro da margem de incerteza do valor de referência, será considerado válido aquele que tiver o maior valor - medida conservativa. Tal comparação foi estabelecida na Tabela 4.4.

Analisando a Tabela 4.4 nota-se que a rede se adapta melhor aos resultados do MCNPX, obtendo melhores respostas para aproximadamente 78% dos casos testados. O restante dos 22% não apresentou diferenças significativas. Em adição, a rede Pb18 se mostrou mais consistente ao longo de todas as regiões. Um aspecto que deve ser evidenciado é que o método de McGinley nos fornece resultados que, em sua maioria, subestimam os equivalentes de dose de nêutrons. Neste sentido, a equação de McGinley fere um dos princípios básicos da radioproteção, que é tomar medidas conservativas quando se trata de proteção radiológica. Em contrapartida, os equivalentes de dose de nêutrons obtidos com a rede Pb18 quando não estão muito

próximos do valor de referência superestimam, em sua maioria, os valores de  $H_n$ . Assim, essa se torna mais uma característica positiva da rede Pb18.

Com a finalidade de corroborar as análises, previamente realizadas, do comportamento da rede Pb18 em relação ao MCNPX (referência) e ao método de McGinley, foi feito, adicionalmente, um gráfico comparativo com o valor normalizado do equivalente de dose de nêutrons para cada um dos 18 inputs de teste (Figura 4.3). As duas setas no gráfico indicam os pontos de maior desvio entre o MCNPX e a rede, localizados em regiões de baixas doses - valores da mesma ordem de grandeza do *background* radioativo.

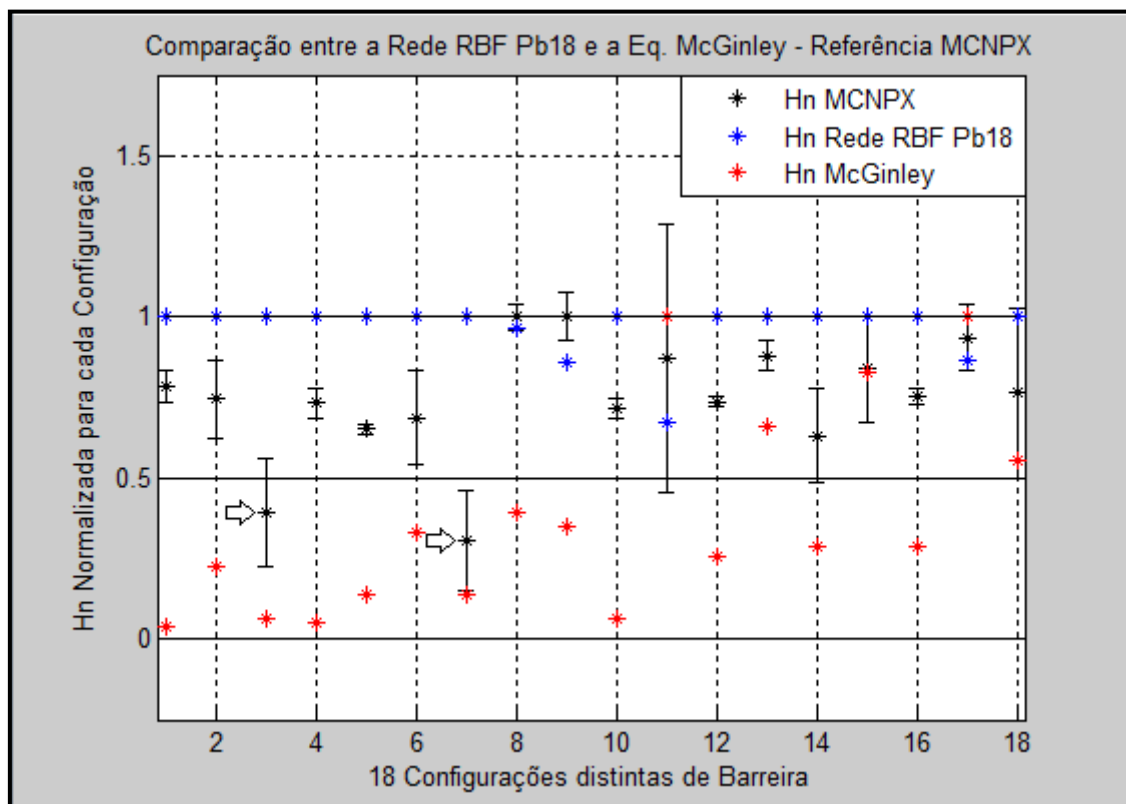


Figura 4.3 – Ilustração do gráfico normalizado de  $H_n$  comparando o MCNPX, a rede Pb18 e o método de McGinley.



#### 4.2.1 Análise do ruído inserido na rede neuronal Pb15

Seguindo um raciocínio similar ao da rede Pb18, foi realizada a análise do ruído presente no conjunto de dados de treinamento da rede Pb15. A Figura 4.4 ilustra o histograma das incertezas dos equivalentes de dose de nêutrons ( $H_n$ ) correspondentes aos dados de treinamento da rede Pb15.

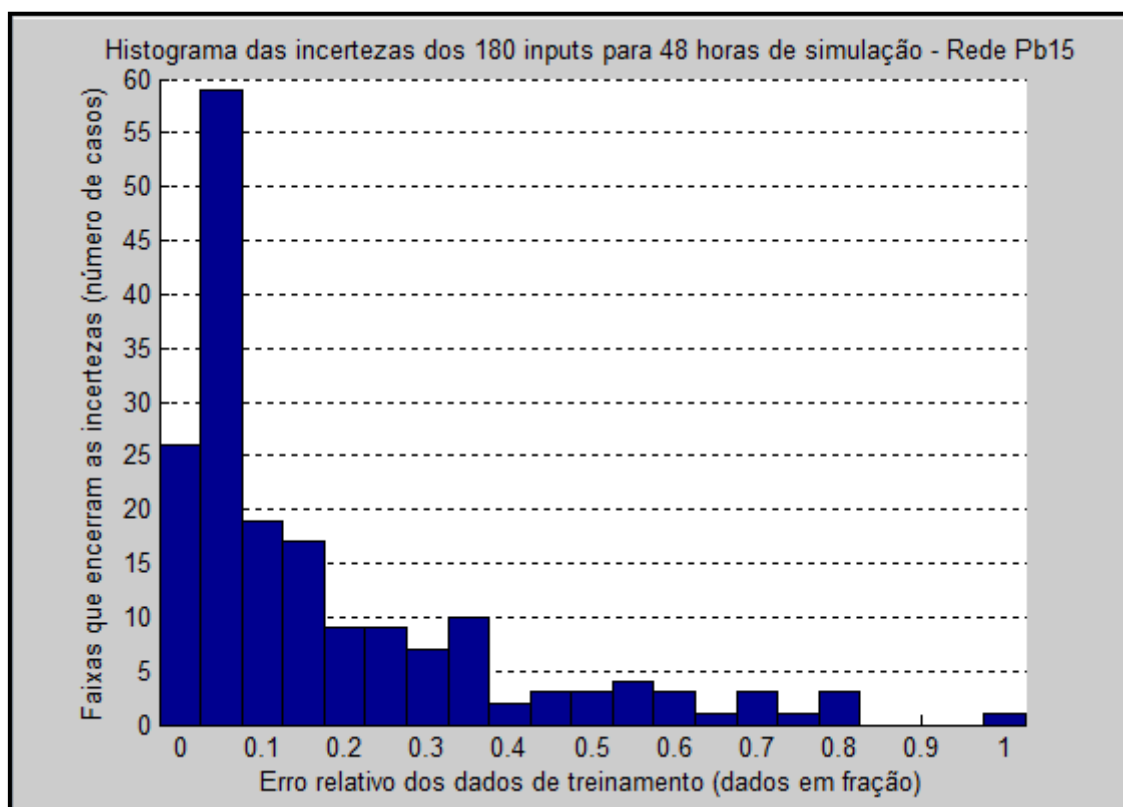


Figura 4.4 – Histograma dos erros relativos dos inputs de treinamento da rede Pb15.

Segundo o histograma da Figura 4.4, os valores de  $H_n$  cujas incertezas são inferiores a 30% correspondem a 77,22% do total do conjunto de treinamento. E dentro desse montante, 74,82% dos casos possuem incertezas abaixo de 15%, enquanto que 22,78% dos resultados que possuem incertezas acima de 30%. Os valores apresentados como ruído na rede Pb15 seguem um padrão semelhante ao da rede Pb18, uma vez que o material é o mesmo e as energias dos espectros são muito

próximas. Logo, as considerações relacionadas ao ruído feitas para a rede anterior valem também para a rede Pb15.

Feitas as considerações referentes ao histograma dos erros relativos da rede Pb15, surge a necessidade de determinar quais regiões do hiperplano da rede Pb15 oferecerão mais ou menos ruído. Para tal, foi necessário observar o comportamento das incertezas em relação à sequência codificada dos inputs de treinamento (Figura 4.5).

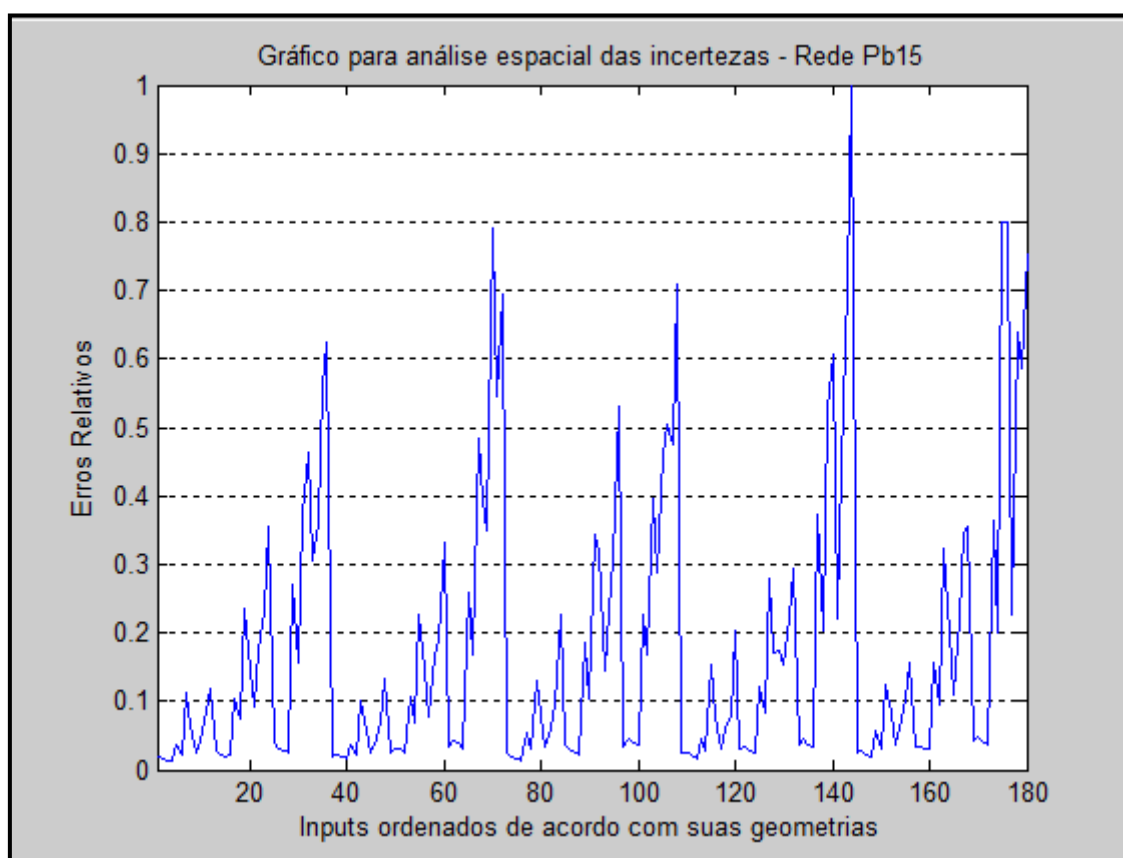


Figura 4.5 – Ilustração do gráfico de análise espacial das incertezas da rede Pb15.

Seguindo o mesmo padrão comportamental da rede Pb18, as incertezas da rede Pb15 tendem a ser menores em regiões onde há um menor valor de nTTVL e um maior valor de  $T_m$  – regiões que apresentam os maiores equivalentes de dose. Logo, a partir da observação acima, a rede Pb15, assim como a rede Pb18, é capaz de operar com maior precisão nas regiões críticas.

#### 4.2.2 Estudo da capacidade de generalização da rede neuronal Pb15: comparação entre a rede, o MCNPX e o método de McGinley

Para explorar a capacidade de generalização da rede Pb15, foram simulados 18 inputs cujos parâmetros podem ser visualizados na Tabela 4.5. Novamente foi feita a escolha ao acaso dos parâmetros de entrada, em regiões previamente determinadas, para que a capacidade de generalização da rede fosse avaliada.

Tabela 4.5 – Valores dos parâmetros inseridos nos inputs de teste da rede Pb15.

Valores dos parâmetros de entrada dos inputs-teste da rede Pb15					
Inputs	D(m)	nTTVL	T1	Tm	T2
1	2	4	0	0.45	3.55
2	2	4	3.6	0.4	0
3	2	5	2.325	0.35	2.325
4	3	5	0	1.2	3.8
5	3	5	0	1.7	3.3
6	3	5	4.2	0.8	0
7	3	6	2.55	0.9	2.55
8	4	4	1.3	1.4	1.3
9	4	4	1.65	0.7	1.65
10	4	6	0	1.1	4.9
11	4	6	4.8	1.2	0
12	5	4	0	1.3	2.7
13	5	4	2.4	1.6	0
14	5	5	1.8	1.4	1.8
15	5	5	3.3	1.7	0
16	6	5	0	1.8	3.2
17	6	5	3.1	1.9	0
18	6	6	2.15	1.7	2.15

As Tabelas 4.6, 4.7 e 4.8 estabelecem, respectivamente, uma comparação entre os resultados do método de McGinley e do MCNPX, da rede Pb15 e do MCNPX e, por fim, da rede Pb15 e do método de McGinley. Os resultados exibidos são dados em taxa de equivalente de dose ambiente para nêutrons ( $\mu\text{Sv/semana}$ ).

Tabela 4.6 – Comparação entre o MCNPX e do método de McGinley – Pb15.

Quadro comparativo entre os resultados do MCNPX e do método de McGinley				
Inputs	Resultado do MCNPX (uSv/sem)	Incerteza do MCNPX	Resultado Eq. McGinley (uSv/sem)	Razão MCNPX/McGinley
1	1.34E+0	1.8%	4.77E-2	28.10
2	6.26E+2	14.6%	6.79E+1	9.22
3	4.78E-1	19.6 %	3.70E-2	12.92
4	3.60E-1	2.8%	1.73E-2	20.81
5	1.78E+0	2.4%	1.28E-1	13.91
6	9.14E+1	28.9%	1.81E+1	5.05
7	1.09E-1	40.5%	9.00E-3	12.11
8	1.36E+2	5.6%	2.30E+1	5.91
9	3.30E+1	12.8%	2.54E+0	12.99
10	4.77E-3	5.1%	2.00E-4	23.85
11	1.54E+1	63.5%	4.82E+0	3.20
12	1.10E+1	2.8%	1.45E+0	7.59
13	2.75E+3	4.7%	8.04E+2	3.42
14	4.45E+0	13.9%	9.69E-1	4.59
15	3.61E+2	12.7%	1.16E+2	3.11
16	9.93E-1	3.1%	1.90E-1	5.23
17	4.52E+2	14.9%	1.75E+2	2.58
18	7.02E-1	26.5%	1.07E-1	6.56

Tabela 4.7 – Comparação entre os resultados do MCNPX e da rede neuronal Pb15.

Quadro comparativo entre os resultados do MCNPX e da rede neuronal Pb15				
Inputs	Resultado do MCNPX (uSv/sem)	Incerteza do MCNPX	Resultado da Rede (uSv/sem)	Razão MCNPX/Rede
1	1.34E+0	1.8%	1.66E+0	0.81
2	6.26E+2	14.6%	7.62E+2	0.82
3	4.78E-1	19.6 %	1.05E+0	0.46
4	3.60E-1	2.8%	4.29E-1	0.84
5	1.78E+0	2.4%	2.04E+0	0.87
6	9.14E+1	28.9%	8.95E+1	1.02
7	1.09E-1	40.5%	2.61E-1	0.42
8	1.36E+2	5.6%	1.73E+2	0.79
9	3.30E+1	12.8%	2.32E+1	1.42
10	4.77E-3	5.1%	4.74E-3	1.01
11	1.54E+1	63.5%	9.01E+0	1.71
12	1.10E+1	2.8%	1.54E+1	0.71
13	2.75E+3	4.7%	2.63E+3	1.04
14	4.45E+0	13.9%	6.10E+0	0.73
15	3.61E+2	12.7%	3.38E+2	1.07
16	9.93E-1	3.1%	1.42E+0	0.70
17	4.52E+2	14.9%	5.30E+2	0.85
18	7.02E-1	26.5%	5.04E-1	1.39

Tabela 4.8 – Comparação entre os resultados da rede Pb15 e do método de McGinley.

<b>Quadro comparativo entre os resultados da rede Pb15 e do método de McGinley</b>				
Inputs	Resultado do MCNPX (uSv/sem)	Incerteza do MCNPX	Resultado da Rede (uSv/sem)	Resultado Eq. McGinley (uSv/sem)
1	1.34E+0	1.8%	1.66E+0	4.77E-2
2	6.26E+2	14.6%	7.62E+2	6.79E+1
3	4.78E-1	19.6 %	1.05E+0	3.70E-2
4	3.60E-1	2.8%	4.29E-1	1.73E-2
5	1.78E+0	2.4%	2.04E+0	1.28E-1
6	9.14E+1	28.9%	8.95E+1	1.81E+1
7	1.09E-1	40.5%	2.61E-1	9.00E-3
8	1.36E+2	5.6%	1.73E+2	2.30E+1
9	3.30E+1	12.8%	2.32E+1	2.54E+0
10	4.77E-3	5.1%	4.74E-3	2.00E-4
11	1.54E+1	63.5%	9.01E+0	4.82E+0
12	1.10E+1	2.8%	1.54E+1	1.45E+0
13	2.75E+3	4.7%	2.63E+3	8.04E+2
14	4.45E+0	13.9%	6.10E+0	9.69E-1
15	3.61E+2	12.7%	3.38E+2	1.16E+2
16	9.93E-1	3.1%	1.42E+0	1.90E-1
17	4.52E+2	14.9%	5.30E+2	1.75E+2
18	7.02E-1	26.5%	5.04E-1	1.07E-1
<b>Legenda de Cores</b>				
Taxa de dose de nêutrons acima do limite para o público - 20 uSv/sem				
Taxa de dose de nêutrons acima do limite para o IOE - 400 uSv/sem				
Valores em que a rede respondeu de maneira mais eficiente que a Eq. de McGinley				
Ponto em que não houve diferença significativa nos resultados				

Os resultados fornecidos pelo MCNPX foram normalizados por gray de dose absorvida no isocentro devido aos raios-X do feixe do acelerador ( $\mu\text{Sv}/\text{Gy}$ ). Logo, para a obtenção dos resultados das taxas de equivalente de dose em  $\mu\text{Sv}/\text{semana}$ , foi necessário multiplicar cada resultado proveniente do MCNPX pela carga de trabalho semanal do acelerador, cujo valor médio considerado foi de 1000 Gy/semana.

Na Tabela 4.6, foi constatado que todos os resultados comparados entre o MCNPX e o método de McGinley apresentaram desvios cujas razões foram maiores que 2, alcançando uma razão de 28.10 para o input 1. Analisando os mesmos dados, foram observadas razões superiores a 5 em aproximadamente 72% dos resultados da Tabela 4.6. Isso expõe claramente a dissonância do modelo de McGinley em relação ao cálculo do equivalente de dose de nêutrons dentro do escopo deste trabalho.

Observando a Tabela 4.7 pode-se notar que 89% do total de resultados apresentaram razões entre 0.5 e 2, enquanto que somente 11% apresentaram razões abaixo de 0.5. Assim como na rede Pb18, os dois pontos que apresentaram os maiores desvios estão localizados em uma região de baixo equivalente de dose de nêutrons.

Para uma melhor visualização do comportamento da rede Pb15 em relação ao MCNPX e ao método de McGinley, foi feito um gráfico comparativo com o valor normalizado do equivalente de dose de nêutrons para cada um dos 18 inputs de teste (Figura 4.6). As duas setas no gráfico, assim como na rede Pb18, indicam os pontos de maior flutuação da rede, localizados em regiões de baixas doses (*background*) cujas incertezas apresentam-se elevadas.

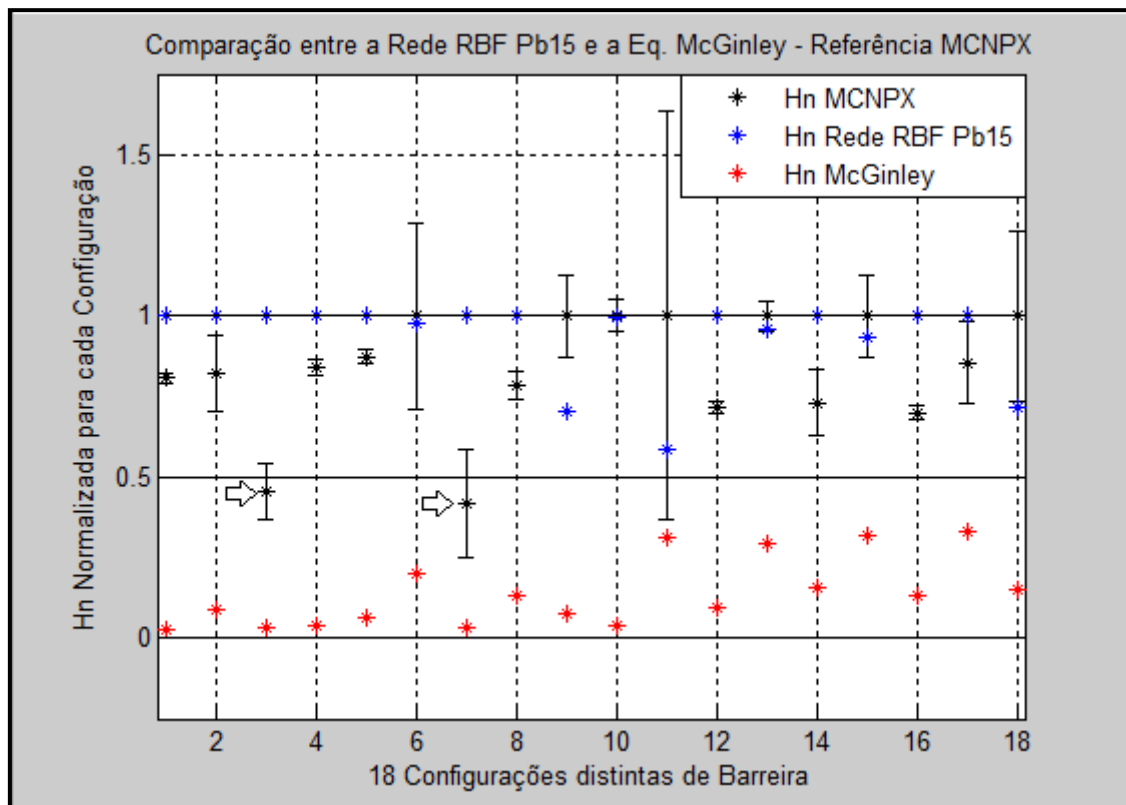


Figura 4.6 – Ilustração do gráfico normalizado de  $H_n$  comparando o MCNPX, a rede Pb15 e o método de McGinley.

Uma característica notável apresentada pela rede Pb15 foi sua robustez (razões próximas de 1), respondendo de modo mais eficiente para 100% dos casos testados (Tabela 4.8). Um comportamento esperado tendo em vista as informações das tabelas 4.6 e 4.7. Outro aspecto positivo da rede Pb15 foi que os equivalentes de dose de nêutrons obtidos quando não estão muito próximos do valor de referência superestimaram, em sua maioria, os valores de  $H_n$ . Seguindo o caminho oposto, o método de McGinley nos forneceu resultados que, em sua maioria, subestimam os equivalentes de dose de nêutrons por um fator 5 - corroborando os resultados apresentados por REZENDE *et al.* (2014).

#### 4.3.1 Análise do ruído inserido na rede neuronal Fe18

Por último, foi realizada a análise do ruído presente no conjunto de dados de treinamento da rede Fe18, como disposto na Figura 4.7.

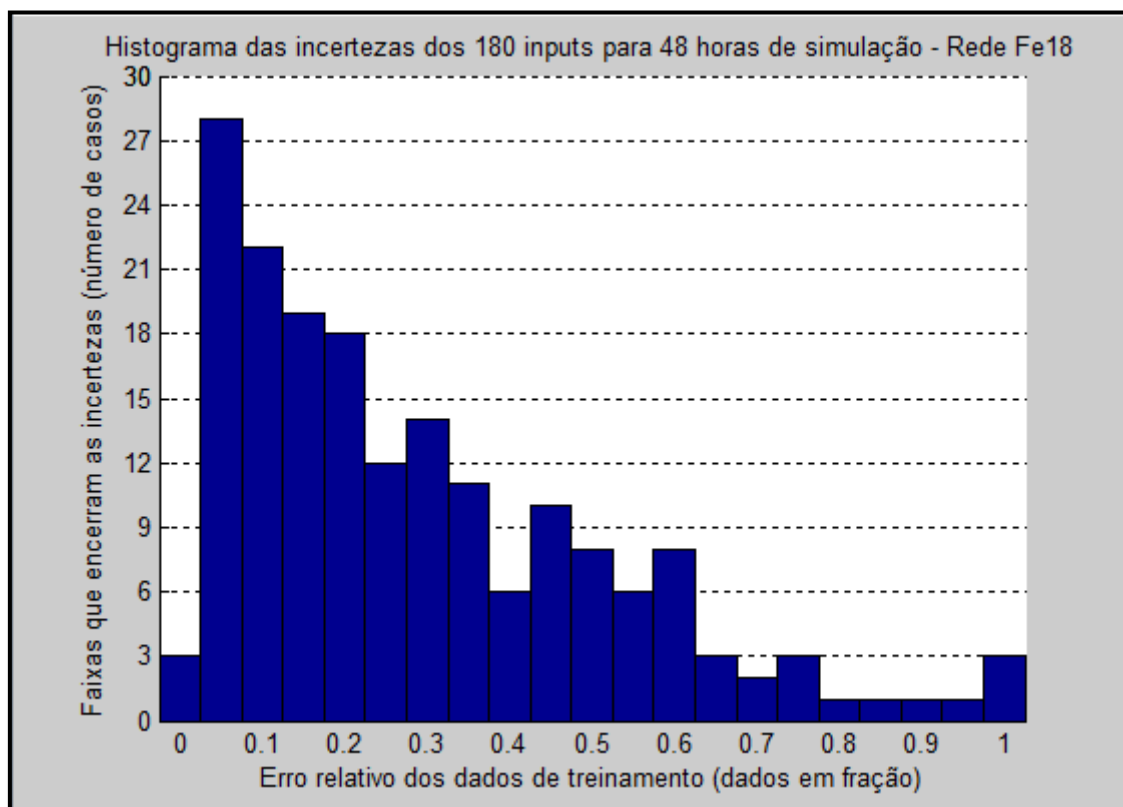


Figura 4.7 – Histograma dos erros relativos dos inputs de treinamento da rede Fe18.

Segundo o histograma da Figura 4.7, os valores de  $H_n$  cujas incertezas são inferiores a 30% correspondem a 56,66% do total do conjunto de treinamento. E dentro desse montante, 51,96% dos casos possuem incertezas abaixo de 15%. Diferentemente das duas redes apresentadas anteriormente, o material metálico (ferro) presente nessa configuração de barreira laminada possui um limiar energético mais elevado para o início das interações fotonucleares - 11,20 MeV ante 6,74 MeV do chumbo. Isso acarreta em uma menor taxa de emissão de fotonêutrons, implicando uma menor fluência dessas partículas, dentro e fora da barreira primária. Logo, o aumento das incertezas observadas nos resultados pode ser atribuído a um decréscimo nas contagens de nêutrons no detector alvo ( $H_n$ ), resultado de uma redução nas interações fotonucleares do feixe de fótons do acelerador com a barreira primária. Confirmando a tendência no aumento das incertezas, foi observado que 43,34% dos resultados apresentaram incertezas acima de 30%. Contudo, cabe adiantar que, mesmo com valores de incerteza maiores que as duas redes anteriores, a rede Fe18 ainda conseguiu resultados consistentes.

Para “rastrear” quais regiões do hiperplano de  $H_n$  oferecerão as repostas mais (ou menos) adequadas, foi necessário observar o comportamento das incertezas em relação à sequência codificada dos inputs de treinamento (Figura 4.8). Logo, a identificação das regiões responsáveis pelas incertezas mais elevadas torna-se possível através de uma observação criteriosa. O comportamento das incertezas observadas na Figura 4.8 mostra-se semelhante ao das duas redes já descritas. Deste modo, as incertezas da rede Fe18 tendem a ser menores em regiões onde há um menor valor de  $nTTVL$  e um maior valor de  $T_m$  – regiões onde os equivalentes de dose apresentam-se mais elevados. No entanto, como exposto acima, o ferro possui um limiar energético para ocorrência de emissão de fotonêutrons mais elevado, logo, foi observado, de modo geral, menores equivalentes de dose e maiores incertezas associadas a estes valores.



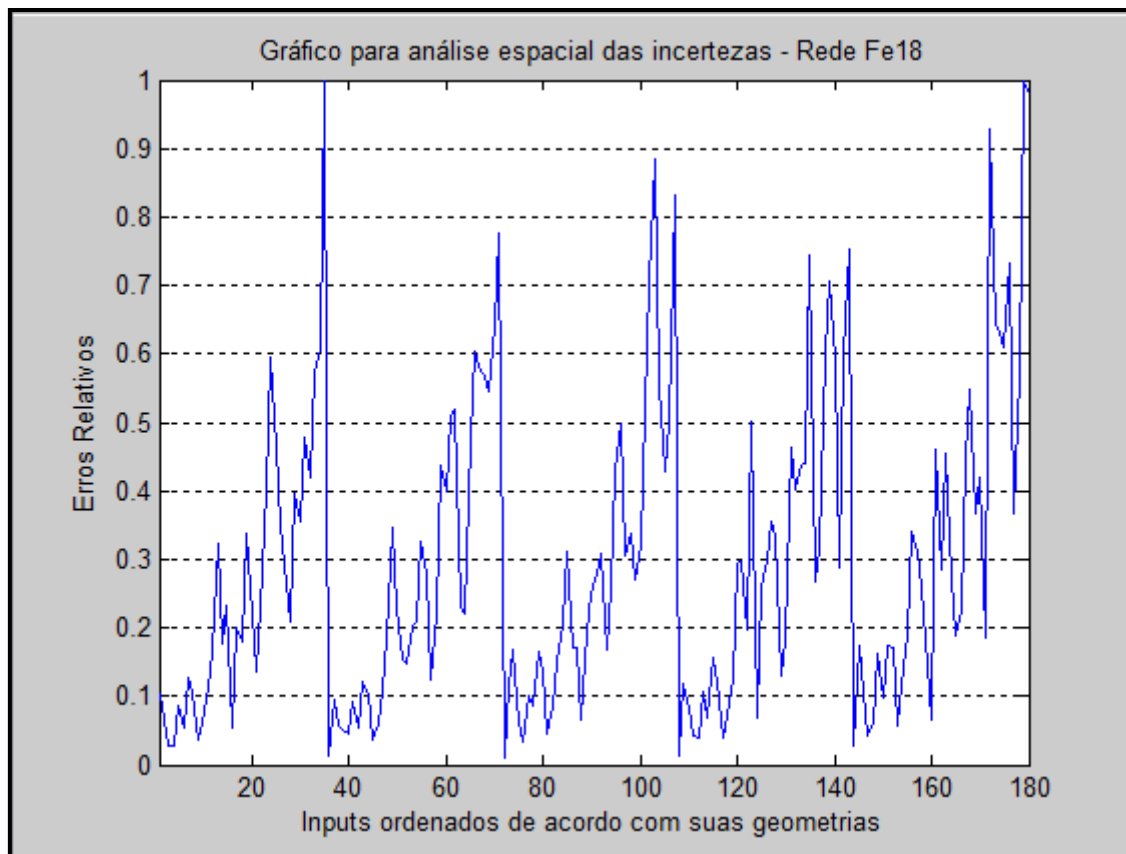


Figura 4.8 – Ilustração do gráfico de análise espacial das incertezas da rede Fe18.

#### 4.3.2 Estudo da capacidade de generalização da rede neuronal Fe18: comparação entre a rede, o MCNPX e o método de McGinley

Para avaliar a capacidade de generalização da rede Fe18 foi necessária uma escolha ao acaso dos parâmetros de entrada, em regiões previamente determinadas – Tópico 3.5. Desta maneira, para explorar a capacidade de produzir saídas adequadas na rede Fe18, foram simulados 18 inputs cujos parâmetros podem ser visualizados na Tabela 4.9.

Tabela 4.9 – Valores dos parâmetros inseridos nos inputs de teste da rede Fe18.

Valores dos parâmetros de entrada dos inputs-teste da rede Fe18					
Inputs	D(m)	nTTVL	T1	Tm	T2
1	2	4	0	0.35	3.65
2	2	4	3.6	0.4	0
3	2	5	2.275	0.45	2.275
4	3	5	0	1.1	3.9
5	3	5	0	1.8	3.2
6	3	5	3.55	1.45	0
7	3	6	2.55	0.9	2.55
8	4	4	1.2	1.6	1.2
9	4	4	1.6	0.8	1.6
10	4	6	0	1.3	4.7
11	4	6	4.25	1.75	0
12	5	4	0	1.4	2.6
13	5	4	2.65	1.35	0
14	5	5	1.8	1.4	1.8
15	5	5	3.35	1.65	0
16	6	5	0	1.75	3.25
17	6	5	3.2	1.8	0
18	6	6	2.05	1.9	2.05

As Tabelas 4.10, 4.11 e 4.12 estabelecem, respectivamente, uma comparação entre os resultados do método de McGinley e do MCNPX, da rede Fe18 e do MCNPX e, por fim, da rede Fe18 e do método de McGinley. Os resultados exibidos são dados em taxa de equivalente de dose ambiente para nêutrons ( $\mu\text{Sv}/\text{semana}$ ).

Os resultados fornecidos pelo MCNPX foram normalizados por gray de dose absorvida no isocentro devido aos raios-X do feixe do acelerador ( $\mu\text{Sv}/\text{Gy}$ ). Logo, para a obtenção dos resultados das taxas de equivalente de dose em  $\mu\text{Sv}/\text{semana}$ , foi necessário multiplicar cada resultado proveniente do MCNPX pela carga de trabalho semanal do acelerador, cujo valor médio considerado foi de 1000 Gy/semana.

Foi constatado que aproximadamente 72% dos resultados comparados entre o MCNPX e o método de McGinley apresentaram discrepâncias cujas razões foram maiores que 2, alcançando uma razão de 306.58 para o input 1 (Tabela 4.10). Além disso, aproximadamente 44% dos resultados apresentaram razões acima de 5.

Tabela 4.10 – Comparação entre o MCNPX e do método de McGinley – Fe18.

<b>Quadro comparativo entre os resultados do MCNPX e do método de McGinley</b>				
Inputs	Resultado do MCNPX (uSv/sem)	Incerteza do MCNPX	Resultado Eq. McGinley (uSv/sem)	Razão MCNPX/McGinley
1	2.33E+0	12.1%	7.60E-3	306.58
2	2.25E+2	26.6%	2.77E+1	8.12
3	1.70E-1	48.6 %	1.47E-2	11.56
4	1.32E-1	25.5%	2.60E-3	50.77
5	1.32E-1	8.7%	4.80E-2	2.75
6	1.84E+2	23.5%	2.62E+1	7.02
7	1.36E-2	55.2%	2.40E-3	5.67
8	2.09E+1	12.7%	1.59E+1	1.31
9	4.56E+0	15.1%	1.19E+0	3.83
10	1.07E-3	20.8%	1.00E-4	10.70
11	2.93E+1	51.0%	5.38E+0	5.45
12	1.77E+0	6.2%	6.14E-1	2.88
13	5.88E+2	8.6%	1.93E+2	3.05
14	2.49E-1	21.9%	3.10E-1	0.80
15	1.19E+2	19.9%	3.95E+1	3.01
16	5.76E-2	17.8%	3.90E-2	1.48
17	8.92E+1	24.6%	5.39E+1	1.66
18	4.99E-2	69.0%	5.95E-2	0.84

Tabela 4.11 – Comparação entre os resultados do MCNPX e da rede neuronal Fe18.

<b>Quadro comparativo entre os resultados do MCNPX e da rede neuronal Fe18</b>				
Inputs	Resultado do MCNPX (uSv/sem)	Incerteza do MCNPX	Resultado da Rede (uSv/sem)	Razão MCNPX/Rede
1	2.33E+0	12.1%	2.06E+0	1.13
2	2.25E+2	26.6%	2.55E+2	0.88
3	1.70E-1	48.6 %	2.12E-1	0.80
4	1.32E-1	25.5%	7.85E-2	1.68
5	1.32E-1	8.7%	1.99E-1	0.66
6	1.84E+2	23.5%	1.22E+2	1.51
7	1.36E-2	55.2%	4.06E-3	3.35
8	2.09E+1	12.7%	2.18E+1	0.96
9	4.56E+0	15.1%	5.86E+0	0.78
10	1.07E-3	20.8%	2.32E-3	0.46
11	2.93E+1	51.0%	2.05E+1	1.42
12	1.77E+0	6.2%	1.99E+0	0.89
13	5.88E+2	8.6%	6.46E+2	0.91
14	2.49E-1	21.9%	4.55E-1	0.55
15	1.19E+2	19.9%	7.21E+1	1.65
16	5.76E-2	17.8%	6.52E-2	0.88
17	8.92E+1	24.6%	1.28E+2	0.70
18	4.99E-2	69.0%	3.80E-2	1.31

Tabela 4.12 Comparação entre os resultados da rede Fe18 e do método de McGinley.

Quadro comparativo entre os resultados da rede Fe18 e do método de McGinley				
Inputs	Resultado do MCNPX (uSv/sem)	Incerteza do MCNPX	Resultado da Rede (uSv/sem)	Resultado Eq. McGinley (uSv/sem)
1	2.33E+0	12.1%	2.06E+0	7.60E-3
2	2.25E+2	26.6%	2.55E+2	2.77E+1
3	1.70E-1	48.6 %	2.12E-1	1.47E-2
4	1.32E-1	25.5%	7.85E-2	2.60E-3
5	1.32E-1	8.7%	1.99E-1	4.80E-2
6	1.84E+2	23.5%	1.22E+2	2.62E+1
7	1.36E-2	55.2%	4.06E-3	2.40E-3
8	2.09E+1	12.7%	2.18E+1	1.59E+1
9	4.56E+0	15.1%	5.86E+0	1.19E+0
10	1.07E-3	20.8%	2.32E-3	1.00E-4
11	2.93E+1	51.0%	2.05E+1	5.38E+0
12	1.77E+0	6.2%	1.99E+0	6.14E-1
13	5.88E+2	8.6%	6.46E+2	1.93E+2
14	2.49E-1	21.9%	4.55E-1	3.10E-1
15	1.19E+2	19.9%	7.21E+1	3.95E+1
16	5.76E-2	17.8%	6.52E-2	3.90E-2
17	8.92E+1	24.6%	1.28E+2	5.39E+1
18	4.99E-2	69.0%	3.80E-2	5.95E-2
Legenda de Cores				
Taxa de dose de nêutrons acima do limite para o público - 20 uSv/sem				
Taxa de dose de nêutrons acima do limite para o IOE - 400 uSv/sem				
Valores em que a rede respondeu de maneira mais eficiente que a Eq. de McGinley				
Ponto em que não houve diferença significativa nos resultados				

Ao analisarmos a Tabela 4.11 foi apurado que 89% do total de resultados apresentaram razões entre 0.5 e 2. Por outro lado, 11% apresentaram razões fora da faixa citada. Assim como foi verificado nas duas redes anteriores, os dois pontos que apresentaram os maiores desvios estão localizados em uma região cujo equivalente de dose de nêutrons é inexpressivo.

Embora a rede Fe18 tenha sido treinada com um nível mais elevado de ruído, esta respondeu de modo mais eficiente para aproximadamente 94% dos casos testados (Tabela 4.12). Esse ponto foi crucial para salientar porque foram escolhidas as redes RBF generalizadas e não um método de interpolação qualquer. Essas redes contam com o termo de regularização  $\beta_c$  que penalizam o ruído, contribuindo para uma melhor capacidade de generalização (HAYKIN, 2006). Assim como as redes

anteriores, a rede Fe18 apresentou razões muito próximas de 1, sendo evidenciada sua maior consistência quando comparada ao método de McGinley.

O gráfico comparativo final com o valor normalizado dos equivalentes de dose de nêutrons dos 18 inputs de teste pode ser observado na Figura 4.9. As duas setas no gráfico indicam os pontos de maior flutuação da rede, localizados em regiões de baixas doses (*background*) cujas incertezas apresentam-se elevadas.

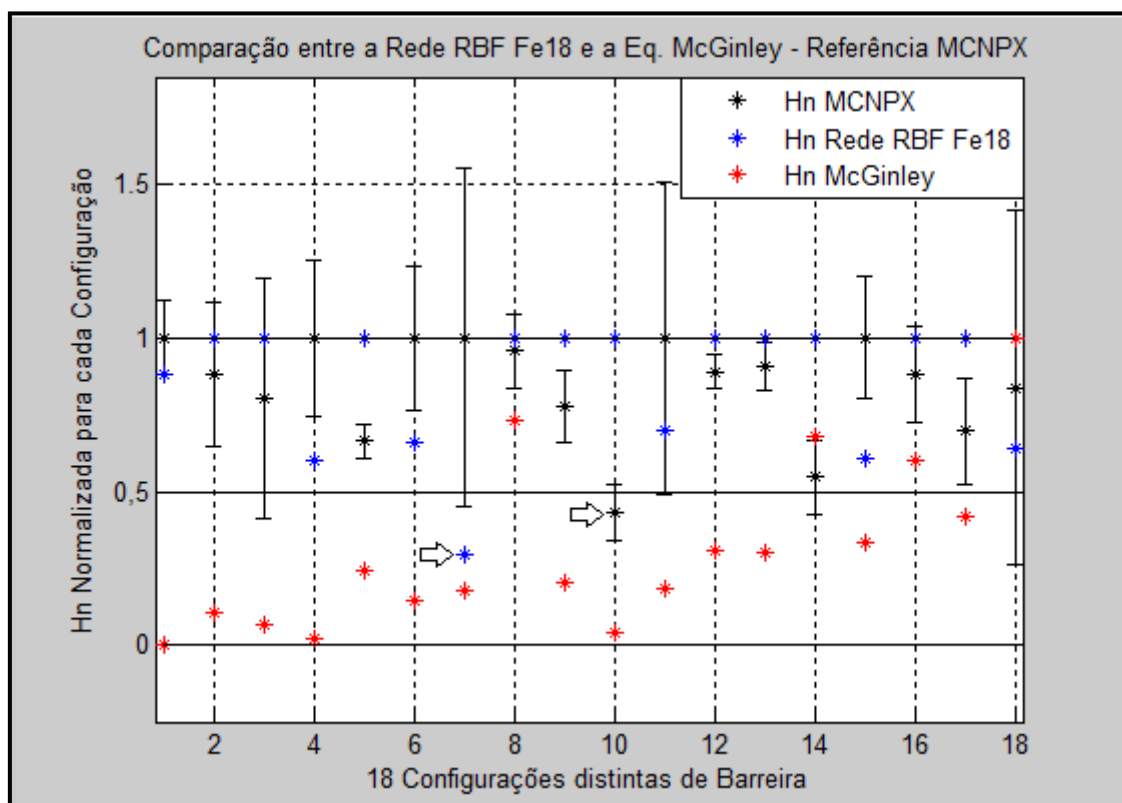


Figura 4.9 – Ilustração do gráfico normalizado de  $H_n$  comparando o MCNPX, a rede Fe18 e o método de McGinley.

# Capítulo 5

## Conclusões

O presente trabalho apresenta uma combinação entre duas áreas distintas no campo computacional: simulação com método de Monte Carlo e inteligência artificial. O objetivo final da combinação dessas duas áreas foi o desenvolvimento de um modelo computacional capaz de quantificar o equivalente de dose de nêutrons em um ponto além das barreiras primárias laminadas de salas de radioterapia.

Para a realização deste trabalho foi necessária uma modelagem dos cenários mais prováveis onde uma emissão considerável de fotonêutrons pudesse ocorrer, selecionando, assim, os parâmetros físicos de interesse. Em seguida, a automatização da geração dos inputs utilizando o MATLAB – contendo todas as informações dos cenários a serem simulados no MCNPX – foi essencial para a viabilização do trabalho em tempo hábil. No que concerne às simulações, estas foram realizadas e seus resultados utilizados para o treinamento das três redes que constituem o modelo computacional descrito nesse trabalho.

A preferência no uso das redes em vez da utilização direta do MCNPX pode ser fundamentada nos seguintes argumentos: uma rede é capaz de fornecer respostas extremamente rápidas quando comparadas ao MCNPX; possibilidade de contornar e solucionar, de modo eficaz e rápido, problemas complexos que exigiriam muito conhecimento e trabalho para sua concepção e simulação no MCNPX; uma rede pode servir de base para a construção de uma interface gráfica simples, capaz de fornecer respostas rápidas para o usuário sem que o mesmo tenha conhecimento sobre códigos de Monte Carlo; dependendo do grau de complexidade do cenário físico em questão, a simulação do mesmo pode levar dias para reduzir a incerteza da grandeza de interesse a um nível satisfatório.

Analisando os resultados da rede Pb18 foi constatado que a mesma exibiu um bom ajuste em relação aos dados de treinamento do MCNPX, exibindo melhores respostas que o método de McGinley em aproximadamente 78% dos casos testados. Além disso, a rede Pb18 se mostrou mais consistente ao longo de todas as regiões, fornecendo resultados que, em sua maioria, superestimam os equivalentes de dose de nêutrons – característica recomendada em proteção radiológica.

Em relação à rede Pb15, uma característica notável apresentada pela mesma foi sua robustez, apresentando melhores resultados para 100% dos casos testados. Um aspecto evidente foram as discrepâncias consideráveis entre os resultados do MCNPX e do método de McGinley. Uma possível explicação para tais discrepâncias é o baixo valor do coeficiente R (para o espectro de 15 MV), constante de ajuste na equação de McGinley referente à emissão de fotonêutrons.

Embora a rede Fe18 tenha sido treinada com um nível mais elevado de ruído, esta ainda foi capaz de apresentar melhores respostas para aproximadamente 94% dos casos testados, quando comparada ao modelo de McGinley. Nas redes RBF, o termo de regularização  $\beta_c$  representa uma função que penaliza o ruído, evidenciando a razão pela qual foram escolhidas as redes RBF generalizadas e não um método de interpolação qualquer.

Um aspecto notado no corpo da tese foi que o método de McGinley nos forneceu resultados que, em sua maioria, subestimam os equivalentes de dose de nêutrons para as situações estudadas – ratificando os estudos já realizados (REZENDE, 2011, REZENDE *et al.*, 2014). Neste sentido, o método fere um dos princípios básicos da radioproteção, que é tomar medidas conservativas quando se trata de proteção radiológica. Isso expõe claramente a dissonância do modelo de McGinley em relação ao cálculo do equivalente de dose de nêutrons. Por outro lado, os equivalentes de dose de nêutrons obtidos com as redes Pb18, Pb15 e Fe18 quando não estão muito próximos do valor de referência superestimam, em sua maioria, os valores de  $H_n$ . Ademais, se fossem levados em conta somente as configurações de

barreira para as situações ditas críticas (valores de  $H_n$  acima do limite do público ou dos IOEs) a robustez das redes seria ainda mais evidenciada.

Cabe ressaltar que o processo metodológico descrito no corpo da tese não está limitado ao fenômeno de emissão de fotonêutrons em barreiras laminadas. Esse processo se aplica a qualquer caso onde a utilização das redes supera os benefícios do uso direto do MCNPX ou de qualquer código de simulação. Deste modo, um problema bem condicionado, com o uso de uma ferramenta robusta para simulação e geração dos dados de saída, bem como a escolha adequada do tipo de rede que será treinada pode produzir um modelo robusto, com uma ótima capacidade de generalização.

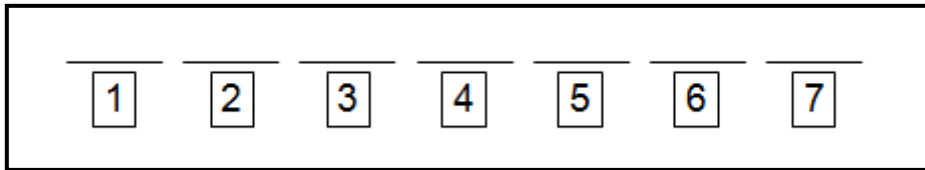
Por fim, a elaboração do modelo descrito neste trabalho, a partir da conjunção do código de Monte Carlo MCNPX e de redes de base radial generalizadas, foi pertinente e oportuna. Uma vez que os resultados finais das três redes estudadas mostraram que o modelo computacional proposto, quando comparado ao modelo corrente, revelou-se mais consistente, tornando-se mais adequado para o cálculo do equivalente de dose de nêutrons em barreiras laminadas de salas de radioterapia.



## Anexo

### Codificação dos Inputs do MCNPX

Abaixo, seguem os sete indicadores mnemônicos alfanuméricos que identificam diretamente os principais parâmetros utilizados na modelagem. Cada número (de 1 à 7) corresponde a um caractere específico.



- 1** → Material Metálico da Barreira: “P” para chumbo ou “F” para ferro.
  - 2** → Espectro de Fótons: “1” para 15 MV ou “2” para 18 MV.
  - 3** → Distância Isocentro-Barreira: [2, 3, 4, 5, 6]; valores dados em metros.
  - 4** → Número total de TVLs da barreira primária: [4, 5, 6].
  - 5** → Codificação alfabética para o número de TVLs da primeira camada de concreto: A = 0 TVL, ..., L = 5,5 TVLs; as letras de “A” à “L” estão associadas à variação de 0 a 5,5 TVLs, em passos de 0,5 TVL.
  - 6** → Codificação numérica para os valores de TVLs da camada de metal: “1” = 0 TVL, ..., “4” = 2.0 TVLs; os números de “1” à “4” estão associadas à variação de 0 a 2.0 TVLs, em passos de 0,5 TVL.
  - 7** → Codificação alfabética para o número de TVLs da segunda camada de concreto: A = 0 TVL, ..., L = 5,5 TVLs; as letras de “A” à “L” estão associadas à variação de 0 a 5,5 TVLs, em passos de 0,5 TVL.
- \* A soma dos valores, em TVL, dos caracteres 5, 6 e 7 deve ser sempre igual ao valor determinado pelo quarto caractere.

## Referências Bibliográficas

- AIRES, M. M., FAVARETTO, A. L. V., BIANCO, A. C. *et al.*, 1999, *Fisiologia*. 2ª ed. Rio de Janeiro, Guanabara Koogan S.A.
- ATTIX, F. H., 1986, *Introduction to Radiological Physics and Radiation Dosimetry*, 1ª ed., Wisconsin, USA, John Wiley & Sons.
- AUCOLFFE, R., DAUTRAY, R., FORSTER, A., *et al.*, 1985, *Monte Carlo methods and applications in neutronics, photonics and statistical physics*. 1ª ed. Provençe, Berlin, Springer.
- BALDWIN, G. C., KLAIBER, G. S., 1947, "Photo-fission in Heavy elements", *Physical Review*, v. 73, pp. 3-10.
- BALDWIN, G. C., KLAIBER, G. S., 1948, "X-ray yield curves for  $\gamma$ -n reactions", *Physical Review*, v. 73, pp. 1156-1163.
- BERTSEKAS, D. P., 1995, *Dynamic Programming and Optimal Control*, v.1 e v.2, Belmont, Athenas Scientific.
- BISHOP, C. M., 1995, *Neural Networks for Pattern Recognition*, 1ª ed. Birmingham, Clarendon Press.
- BOWMAN, C. D., SIDHU, G. S., BERMAN B. L., 1967, "On Threshold photoneutron cross section for Fe<sup>56</sup>", *Physical Review*, v. 163, pp. 951-958.
- BROOMHEAD, D.S., LOWE, D., 1988, "Multivariable functional interpolation and adaptive networks", *Complex Systems*, v.2, pp. 321-355.
- CASHWELL, E. D., NEERGAARD, J. R., EVERETT, C. J. *et al.*, 1973, *Monte Carlo Photon Codes: MCG and MCP*. In: Report LA-5157-MS, Los Alamos National Laboratory, California.

- Comissão Nacional de Energia Nuclear, 2014, "Diretrizes Básicas de Proteção Radiológica NN-3.01", Rio de Janeiro, CNEN.
- COVER, T. M., 1965, "Geometrical and statistical properties of systems of linear inequalities with applications in pattern recognition", *IEEE Transactions on Electronic Computers*, vol. EC-14, pp. 326-334.
- DARYOUSH, S. B., and ROGERS, D. W. O., 2002, "Monte Carlo calculation of nine megavoltage photon beam spectra using the BEAM code", *Medical Physics*, v. 29, pp. 391-402.
- DAVIS, P. J., 1963, *Interpolation and Approximation*. New York, Blaisdell.
- DUDERSTADT, J. J., HAMILTON L. J., 1976, *Nuclear Reactor Analysis*, 1ª ed., New York, USA, John Wiley and Sons.
- EISBERG, R., RESNICK, R., 1994, *Física Quântica: Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos e Partículas*. 9ª ed. New York, John Wiley & Sons.
- EKMAN, L. L., 2008, *Neurociência: Fundamentos para a Reabilitação*. 3ª ed. Amsterdam, Holland, Elsevier.
- EMBED, M., FERNÁNDEZ, R., GARCÍA-SANZ, J.M., GONZÁLEZ, E., 1999, "Systematic uncertainties on Monte Carlo simulation of lead based ADS". Nuclear Energy Agency, pp. 1-19.
- FACURE, A., DA SILVA, A. X., ROSA, L. A. R., CARDOSO, S.C., REZENDE, G. F. S., 2008, "On the production of neutrons in laminated barriers for 10 MV medical accelerator rooms", *Medical Physics*. v. 35, n. 7, pp. 3285-3292.
- GENTLE, J. E., 2003, *Random Number Generation and Monte Carlo Methods*. 2ª ed. New York, Springer-Verlag.
- HAYKIN, S., 2001, *Redes Neurais princípios e prática*. 2ª ed. Ontario, Prentice Hall.

- HOPFIELD, J. J., 1982, "Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities", *Proceedings of the National Academy of Sciences*, v.79, pp. 2554-2558.
- Instituto Nacional de Câncer, 2001, "1º Seminário em Radioterapia", INCA, Angra dos Reis, Brasil, Ministério da Saúde.
- Instituto Nacional de Câncer, 2012, "Incidência de câncer no Brasil", INCA, Rio de Janeiro, Brasil, Ministério da Saúde.
- International Agency for Research on Cancer, 2012, "GLOBOCAN 2012: Estimated Cancer Incidence, Mortality and Prevalence Worldwide in 2012", IARC, Lyon, France. Disponível em: <<http://globocan.iarc.fr>> Acesso em: 21/06/2014.
- JAEGER, R. G., BLIZARD, E. P., CHILTON, A. B. *et al.*, 1975, *Engineering Compendium on Radiation Shielding*, Volume 2, 1ª ed., New York, USA, Springer Berlin/Heidelberg.
- JAIN, R., 1991, *The Art of Computer Systems Performance Analysis - Techniques for Experimental Design, Measurement, Simulation, and Modeling*. 1ª ed. New York, John Wiley & Sons.
- KALOS, M. H., WHITLOCK, P. A., 1986, *Monte Carlo Methods*, Vol. 1. New York, John Wiley & Sons.
- LAMARSH, J. R., 1966, *Introduction to Nuclear Reactor Theory*, 1ª ed., Massachusetts, USA, Addison-Wesley Publishing Company.
- LEHMER, D. H., 1951, "Mathematical methods in large-scale computing units". In: *Proceedings of the Second Symposium on Large Scale Digital Computing Machinery*, pp. 141-146, Massachusetts.
- LEVINGER, J. S., RAZAVY, M., ROJO, O., WEBRE, N., 1960, "Perturbation theory applied to the nuclear many-body problem", *Physical review*, v. 119, pp. 230-240.

- MARSAGLIA, G., 1985, "A Current View of Random Number Generators". In: *Billard, Ed., Computer Science and Statistics: Proc. 16th Symposium on the Interface*, pp. 3-10, Amsterdam.
- MARTIN, J. H., 1998, *Neuroanatomia*. 2<sup>a</sup> ed. Porto Alegre, Artes Médicas.
- MCCULLOCH, W. S., PITTS, W., 1943, "A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity", *Bulletin of Mathematical Biophysics*, v.5, pp. 115-133.
- MCGINLEY, P. H., 1992a, "Photoneutron production in the primary barriers of medical accelerator rooms", *Health Physics*, v. 63, n. 3, pp. 359-362.
- MCGINLEY, P. H., 1992b, "Photoneutron Fields in medical accelerator rooms with primary barriers constructed of concrete and metals", *Health Physics*, v. 63, n. 6, pp. 698-701.
- MCGINLEY, P. H., 1998, *Shielding Techniques for Radiation Oncology Facilities*, 2<sup>a</sup> ed., Wisconsin, USA, Medical Physics Publishing.
- MENDEL, J. M., MCLAREN, R. W., 1970, "Reinforcement-learning control and pattern recognition systems", *Adaptative, Learning and Pattern Reconignition Systems: Theory and Applications*, v.66, pp. 287-318.
- MICCHELLI, C. A., 1986, "Interpolation of scattered data: Distance Matrices and conditionally positive definite functions", *Constructive Approximation*,v.2, pp.11-22.
- MINSKY, M. L., PAPERT, S.A., 1969, "Perceptrons", MIT Press, Cambridge.
- National Council on Radiation Protection and Measurements, 1976, *Structural shielding design and evaluation for medical use of x-ray and gamma rays of energies up to 10 MeV*, NCRP report n. 49, Washington, USA, NCRP publications.
- National Council on Radiation Protection and Measurements, 2005, *Structural Shielding Design and Evaluation for Megavoltage X- and Gamma-Ray Radiotherapy Facilities*, NCRP report n. 151, Bethesda, USA, NCRP publications.

- PELOWITZ, D. B., DURKEE, J. W., ELSON, J. S. *et al.*, 2011, *MCNPX 2.7.0 Extensions* In: Report LA-UR-11-02295, Los Alamos National Laboratory, California.
- POGGIO, T., GIROSI, F., 1990, "Networks for approximation and learning", *Proceedings of the IEEE*, vol. 78, pp. 1481-1497.
- REZENDE, G. F. S., 2011, "Avaliação das doses de nêutrons além das barreiras primárias de salas que abrigam aceleradores lineares clínicos", Dissertação de M.Sc., Instituto de Radioproteção e Dosimetria, Rio de Janeiro, Brasil.
- REZENDE G. F. S., ROSA L. A. R., FACURE A., 2014, "Production of neutrons in laminated barriers of radiotherapy rooms: comparison between the analytical methodology and Monte Carlo simulations", *Journal of Applied Clinical Medical Physics* v.15, n. 6, pp. 247-255.
- ROGERS, D.W.O., 2006, "Fifty years of Monte Carlo simulations for medical physics", *Physics in Medicine and Biology*, v. 51, n. 13, pp. R237-R301.
- ROSENBLATT, F., 1958, "The Perceptron: A probabilistic model for information storage and organization in the brain", *Psychological Review*, v.65, pp. 386-408.
- RUMELHART, D. E., ZIPSER, D., 1985, "Feature discovery by competitive learning", *Cognitive Science*, v.9, pp. 75-112.
- RUMELHART, D. E., HINTON, G. E., WILLIAMS, R. J., 1986, "Learning representations of back-propagation errors", *Nature (London)*,v.323, pp. 533-536.
- RUMELHART, D. E., MCCLELAND, J. L., 1986, *Learning internal representations by error propagation*. eds. Cambridge, MIT Press.
- SAGE, A. P., 1990, *Concise Encyclopedia of Information Processing in Systems and Organizations*, 1 ed. New York, Pergamon.
- SPETH, J., WOUDE, A. V. D., 1981, "Giant resonance in nuclei", *Reports on Progress in Physics*, v. 44, n. 7, pp. 1-719.

- SWEEZY, J. E., BOOTH, T. E., BROWN, F. B. *et al.*, 2003, *MCNP - A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, version 5*. In: Report LA-UR-03-1987, Los Alamos National Laboratory, California.
- TIKHONOV, A. N., 1963, "On solving incorrectly posed problems and method of regularization", *Doklady Akademii Nauk USSR*, vol. 151, pp. 501-504.
- TIKHONOV, A. N., ARSENIN, V.Y., 1977, *Solutions of Ill-posed problems*, Washington, DC, W. H. Winston.
- TOSI, G., TORRESIN, A., AGOSTEO, S., FOLGIO PARA, A., SANGIUST, V., ZENI, L., SILARI, M., 1991, "Neutron measurements around medical electron accelerators by active and passive detection techniques", *Medical Physics*, v. 18, pp. 54-60.
- WALCK, C., 1996, *Hand-book on Statistical Distributions for Experimentalists*. 1<sup>a</sup> ed. Stockholm.
- WATERS, L. S., HUGHES, H. G., ANDERSON, J. L., 2003, *MCNPX User manual (version 2.1.5)* In: Report LA-UR-99-1992, Los Alamos National Laboratory, California.
- WAY, K., 1939, "The liquid drop model and nuclear moments", *Physical Review*, v. 55, pp. 963-965.
- World Health Organization, 2014, "The top 10 causes of death". Fact sheet n. 310, Geneva, Switzerland. Disponível em: <[www.who.int/mediacentre/factsheets/fs310](http://www.who.int/mediacentre/factsheets/fs310)> Acesso em: 05/08/2014.
- YORIYAZ, H., 2009, "Monte Carlo Method: principles and applications in Medical Physics", *Revista Brasileira de Física Médica*, v.3, n.1, pp. 141-149.
- ZAIDI, H., SGOUROS, G., 2003, *Therapeutic Applications of Monte Carlo Calculations in Nuclear Medicine*, 1<sup>a</sup> ed. Philadelphia, USA, Taylor & Francis.
- ZAMBONI, C. B., 2007, *Fundamentos da Física de Nêutrons*. 1<sup>a</sup> ed. São Paulo, Livraria da Física.