



## PLANO DE TRABALHO

INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES – CNEN/IPEN

EDITAL COPDE 6/2020

2020.06.IPEN.18

### DADOS DO PROJETO

#### DESCRIÇÃO DO PROJETO

Título do Projeto:

Aplicação de inteligência artificial para caracterização química de materiais no galpão de salvaguardas, IPEN/SP

Prazo Execução:

36 Meses

#### **Objetivo Geral (Objeto da Proposta):**

O IPEN/SP tem compromisso com o atendimento da legislação ambiental (lei 9.605/98 e Resoluções CONAMA 357/05 e 430/11, por exemplo) e de normas técnicas (Normas CNEN e ABNT, por exemplo) no que diz respeito à guarda e gerenciamento de substâncias químicas. O Serviço de Salvaguardas está iniciando uma sequência de atividades nos prédios 86 e 86A, com a finalidade de atender a esse compromisso e atualizar o inventário dos itens sob salvaguardas nacional.

A espectrometria de fluorescência de raios X (XRFS) é uma técnica analítica instrumental que atende à demanda de análises química aos materiais e produtos químicos salvaguardados. Ela permite realizar análises em amostras sólidas (metais, pós e outros) ou líquidas, com pequenas quantidades de amostra (cerca de 50 mg) e muita rapidez na reportagem de resultados, além disso, o ensaio é não destrutivo, permitindo preservar as amostras e produzir mínima quantidade de resíduos. Entretanto, a sensibilidade pode ser questionada dependendo da matriz da amostra, ou seja, conteúdo dos elementos majoritários, usualmente conhecido como efeito matriz.

O efeito matriz, juntamente com o espalhamento de fundo (*scattering background*) e ruídos eletrônicos tem sido um problema complexo para calcular a concentração elementar. Deste modo, a exatidão das análises quantitativas tem se tornado um dos principais focos em XRFS. Os métodos de análises quantitativas por XRFS podem ser classificados em duas categorias; método semiquantitativo, fundamentados em mecanismos físicos (método de parâmetros fundamentais, método de coeficiente empírico e outros) e métodos quantitativos, fundamentados em princípios estatísticos (mínimo quadrado parcial - PLS), rede neural artificial (RNA), análises *wavelet* e outros métodos quimiométricos.



## PLANO DE TRABALHO

INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES – CNEN/IPEN

EDITAL COPDE 6/2020

2020.06.IPEN.18

### Justificativa Resumida:

A moderna gestão de salvaguardas de materiais nucleares do IPEN/SP verificou que no Galpão de Salvaguardas (prédio 86 e 86A) estão armazenadas inúmeras embalagens contendo produtos químicos e resíduos, dos quais a maior parte são desconhecidos. O problema remete às responsabilidades legais por conta do risco de acidentes em função da inadequação condições de armazenamento. Em uma primeira interpretação, a solução seria realizar ensaios físico-químicos para a identificação e posterior destinação adequada fora do IPEN, ou reaproveitamento em algum processo interno. Ocorre que, em decorrência das atividades anteriormente realizadas no IPEN (desenvolvimento de materiais nucleares), muitos desses produtos e resíduos podem conter urânio e tório. Desse modo, fica descartada a hipótese de ensaios por terceiros, visto que, as características mencionadas desses “materiais” devem seguir protocolos e normas específicas em função dos aspectos estratégicos que assumem. Assim, as análises devem ser realizadas no IPEN, o que não é problemático, uma vez que, alguns Centros possuem infraestrutura adequada, assim como, protocolos, pessoal qualificado e técnicas analíticas suficientes. Dentre as técnicas analíticas disponíveis (NAA, ICP-OES, ICP-MS, AAS e outras), a espectrometria de fluorescência de raios X (XRFS) é potencialmente adequada, uma vez que, apresenta vantagens, tais como: ensaio direto e não destrutivo, pouca quantidade de amostra e mínimo preparo, rápida resposta e custo significativamente baixo. Por outro lado, a interação dos raios X com a amostra produz alguns fenômenos (absorção/intensificação, efeitos interelementos, sobreposição de linhas espectrais, entre outros) demonstrando desvantagens, especialmente no limite de detecção. Nesse contexto, o objetivo deste projeto de pesquisa é desenvolver um modelo matemático por meio de inteligência artificial (redes neurais artificiais), para criar um banco de dados e um *software* que possibilite corrigir os efeitos interelementos e aumentar a sensibilidade dos espectrômetros de fluorescência de raios X de comprimento de onda dispersivo (WDXRF) e energia dispersiva (EDXRF). Deste modo, estabelecer uma metodologia analítica direta e não destrutiva, com mínimo manuseio de amostra e baixo custo, para quantificar simultaneamente elementos maiores, menores e traços, presentes nos materiais salvaguardados no IPEN. A literatura tem reportado nesses últimos anos inúmeras metodologias para a determinação elementar em diversos tipos de materiais, incluindo os de interesse nuclear, utilizando diferentes técnicas instrumentais. Contudo, um método direto, não destrutivo, sem tratamentos químicos prévios no preparo de amostras e multielementar, para quantificar simultaneamente maiores e menores constituintes e traços, é inexistente. Deste modo, este projeto de pesquisa tem um caráter inédito. O presente projeto prevê a expansão e modernização das técnicas WDXRF e EDXRF para qualificar quimicamente material armazenado no galpão de salvaguardas, potencializando o Centro de Química e Meio Ambiente, o IPEN, e consequentemente a CNEN, assim fornecer um atendimento um nível acima do que hoje existe, otimizado, mais ágil e com menor custo.

**Palavras-chave:** inteligência artificial, redes neurais, fluorescência, raios X, salvaguarda