



Modelização fracionária do comportamento de atenuação linear de metais puros

Bruno Manuel Ribeiro Alves¹

¹ Engenheiro Técnico – Colégio da especialidade química e biológica (OET - Portugal)
Rue de l' usine 37, 6010 Couillet - Bélgica

{Ribeiro Alves, Bruno Manuel} b.bruno.a@gmail.com

Resumo. Os valores de coeficiente de atenuação linear, LAC, obtidos numericamente ajustaram-se ao modelo fracionário de Grünwald-Letnikov implementado em Python, para avaliar a capacidade de descrição do comportamento da radiação em diferentes metais. O ajuste analisa-se através dos valores de R^2 , RMSE, AIC e BIC complementada por testes estatísticos de diagnóstico dos resíduos como o teste de Shapiro-Wilk (de normalidade dos resíduos), de Breusch-Pagan (homoscedasticidade dos resíduos) e de Durbin-Watson (autocorrelação dos resíduos). Paralelamente aplica-se a regressão de Ridge como método de regularização do ajuste para os 8 metais estudados.

Abstract. The linear attenuation coefficient values, LAC, obtained numerically were adjusted to a fractional Grünwald-Letnikov model implemented in Python, to evaluate its ability to describe the behavior of radiation in different metals. The adjustment is analyzed through the values of R^2 , RMSE, AIC and BIC complemented by statistical tests for the diagnosis of residuals such as the Shapiro-Wilk test (normality of residuals), Breusch-Pagan (homoscedasticity) and Durbin-Watson (autocorrelation). At the same time, Ridge regression was applied as a regularization fit method for the eight metals studied.

1. Introdução

A análise de propriedades de atenuação dos metais é relevante no projeto de estruturas para blindagem da radiação ionizante em diversos contextos, tal como a proteção de instalações nucleares, de instalações radiológicas e em aeroespacial na proteção contra a radiação cósmica [Podgorsak, 2005]. Aqui, o desempenho dos metais depende das propriedades físicas e atômicas como a densidade, o número atômico e a configuração eletrônica [Attix, 2004] em relação à radiação manifestada em forma de partículas α , partículas β , raios- γ e raios-X.

A atenuação de raios-X e raios- γ envolve materiais com alta densidade e número atômico como o chumbo (Pb), ligas de aço e tungstênio, e, a atenuação de com recurso a materiais com baixo número atômico e elevado teor em hidrogénio, como a água, o polietileno e ainda compostos específicos de boro e cádmio, pelo que se justifica a utilização de placas de polietileno com boro disperso na matriz para a atenuação de radiação [Bushberg et al., 2012]. Para que um material seja considerado eficiente na blindagem radiológica deve reunir-se características de alta densidade, resistência

mecânica adequada, baixa reatividade química, baixa cotação e elevado ponto de fusão [Bushberg et al., 2012].

Os mecanismos de interação entre a radiação e a matéria são o efeito fotoelétrico, a difusão de Compton, a produção de pares e no caso dos neutrões os processos de absorção e difusão elástica/ inelástica. Para radiação γ e radiação $-X$, o efeito fotoelétrico predomina para baixos valores energéticos, a difusão de Compton em valores energéticos médios e a produção de pares para altos valores energéticos [Hubbel & Seltzer, 1996]. As partículas β , interagem através da ionização e da excitação atômica, e, geram radiação secundária para materiais de elevado número atômico. As partículas α , com alta carga e massa, perdem rapidamente energia por ionização no meio, resultando em distâncias curtas de dispersão [Knoll, 2010].

Os parâmetros físicos utilizados para a caracterização da eficiência de uma blindagem são: o coeficiente de atenuação mássica (MAC), o coeficiente de atenuação linear (LAC), a espessura de meia-camada (HVL) e a espessura de décima camada (TVL), que correspondem à espessura necessária para a redução a 50% e 10%, respectivamente, e, o caminho médio livre (MFP) que indica a distância média percorrida por um fóton antes de interagir com o material. Por sua vez o FNRCs (Fast neutron removal cross section) quantifica a probabilidade de remoção de neutrões rápidos por unidade de espessura, considerando-se fenômenos de difusão, captura e reações nucleares [El Khayatt, 2013].

O cálculo destes parâmetros exige conhecimento rigoroso da densidade atômica e composição elementar do material, pelo que, é com softwares especializados como o Phy-X, ou o X-COM do NIST que se realiza [Agostinelli et al., 2003; Hubbel & Seltzer, 1995]. Estes programas permitem cálculo das propriedades fundamentais da interação como o MAC, LAC, HVL, TVL e MFP, tanto para materiais puros como para complexos [El Khayatt, 2013; Sakar et al., 2020]. O Phy-x é reconhecido no desenvolvimento de materiais de blindagem e os resultados geralmente validam-se via simulações Montecarlo em contextos em que o fluxo de radiação é deveras crítico.

Contudo, o software Phy-x apresenta limitações tal como dependência de bases de dados tabuladas, ausência de modelagem estatística avançada (como regressões Grünwald-Letnikov e Ridge) e a suposição de materiais homogêneos e puros, o que pode introduzir erros na extrapolação dos resultados para ligas metálicas ou compósitos reais. Ainda assim, o software é uma ferramenta essencial para análises preliminares e validação teórica de medições experimentais.

Diversos estudos ilustram a aplicabilidade das propriedades fundamentais de interação. Em 2023, sistemas vítreos enriquecidos com nióbio foram aplicadas em radiopacidade pelo que a obtenção de valores MAC compreendidos entre 0,2 e 0,4 cm²/g para energias próximas de 70 KeV (faixa típica de radiografias odontológicas), confirmaram o potencial deste material para dispositivos médicos e blindagens ligeiras [Furioso et al., 2023]. Já o LAC do alumínio foi calculado usando uma fonte de amerício-241, garante de uma contribuição para otimização de sistemas de proteção radiológica em contextos biomédicos e industriais [Zabine, 2023]. Parâmetros como HVL e TVL, amplamente utilizados na avaliação da eficácia de blindagens, graças a detectores de estado sólido permitiram substituir câmaras de ionização em ambientes clínicos de tomografia computadorizada [Fukuda et al., 2024].



Finalmente, a incorporação de modelos matemáticos avançados como Grünwald-Letnikov e regressão Ridge complementa análises Phy-X, previamente validadas permitindo ajustes fracionários e regularização de parâmetros que melhorem a precisão e robustez preditiva. Essa integração entre modelagem teórica, cálculo computacional e validação estatística é uma abordagem moderna e poderosa, para caracterizar e otimizar materiais para blindagem face à radiação ionizante.

O principal objetivo deste trabalho consiste, portanto, na análise e modelagem do comportamento atenuante de diferentes metais face à radiação ionizante utilizando uma abordagem combinada entre o modelo fracionário de Grünwald-Letnikov e regressão Ridge para avaliar a eficácia e a precisão dos parâmetros de atenuação linear obtidos por via computacional (Phy-X) e numérica.

De forma específica este estudo procura determinar os coeficientes de determinação linear de diferentes metais (ferro, cobre, alumínio, chumbo, cobre, zinco, tungstênio, cádmio e bismuto) com base em dados obtidos através de software Phy-X para quantitativamente caracterizar a capacidade de blindagem à radiação ionizante. Em seguida é aplicado o modelo fracionário de Grünwald-Letnikov para ajustar valores de atenuação e identificar parâmetro fracionário, α , representativo da dinâmica de interação entre a radiação e o metal. Posteriormente recorre-se à regressão Ridge, como técnica de regularização e aperfeiçoamento do modelo Grünwald-Letnikov, avaliando-se o impacto na melhoria dos indicadores estatísticos, como o coeficiente de determinação (R^2), erro quadrático médio (RMSE), critérios AIC e BIC, testes de normalidade, homoscedasticidade e de autocorrelação dos resíduos. Finalmente procura-se a realização de uma análise crítica de resultados, discutindo-se as principais vantagens, limitações e complementaridades na descrição matemática do comportamento atenuante dos metais referidos; e identificar limitações do software Phy-X para propor a integração de métodos analíticos e matemáticos complementares que possam aumentar a precisão e robustez dos modelos preditivos.

2. Metodologia

2.1. Obtenção de resultados de LAC com software Phy-X

O software Phy-x/ PSD (Photon shielding dosimetry) utiliza-se para cálculo de propriedades de atenuação de diversos metais. Para o alcance deste objetivo 8 metais ($n=8$) com propriedades distintas selecionaram-se para valor teórico de 500 gramas, como é possível observar na Tabela 1.

Tabela 1. Características dos metais a analisar

Metal puro	massa (g)	n (moles)	Massa volúmica (Kg/m ³)
Ferro (Fe)	500	8,953	7,874
Alumínio (Al)	500	19,546	2,968
Chumbo (Pb)	500	2,413	11,340
Cobre (Cu)	500	7,868	8,960
Zinco (Zn)	500	7,648	7,140
Tungstênio (W)	500	2,720	19,250



Cádmio (Cd)	500	4,448	8,650
Bismuto (Bi)	500	2,393	9,780

Em Phy-X introduz-se o valor de energia que se compreende entre 0,015 MeV e 15 MeV. Finda a etapa de identificação das amostras, introduz-se o número de moles de metal identificado e o valor de massa volúmica. Em seguida é lançada a análise.

2.2. Validação dos dados com simulação Montecarlo

Desta forma realiza-se uma simulação de Montecarlo com o software Python para os dados LAC dos diferentes metais. Os dados obtidos são transformados em logaritmos e uma distribuição simulada gera-se com base na média e nos desvios padrão dos dados de LAC de Phy-X. A aplicação do teste de Kolmogorov-Smirnov permite demonstrar que os dados simulados representam corretamente os dados Phy-X, ou seja, cujo p-valor seja superior a 0,05 verificando-se se o intervalo de confiança é plausível bem como se a assimetria dos dados é preservada.

2.3. Ajuste com o modelo de Grünwald-Letnikov e regressão de Ridge

Nesta fase os valores de LAC validados utilizam-se para o desenvolvimento de um ajuste computacional em Python baseado em Grünwald-Letnikov e explora-se a capacidade do modelo em reproduzir e descrever o comportamento experimental dos valores de atenuação linear, tal como a possibilidade da derivada fracionária garantir representação precisa da dinâmica de interação entre a radiação e a matéria.

O estudo, posteriormente concentra-se para cada metal estudado na avaliação da qualidade de ajuste, na capacidade preditiva do modelo e da sua aderência aos dados de LAC, verificando-se, e, nas eventuais violações de pressupostos clássicos de regressão. Finalmente aplica-se o modelo de regressão de Ridge como extensão da análise, permitindo refinar e reduzir o sobreajuste, através da regularização dos parâmetros do modelo de Grünwald-Letnikov, o que garante em princípio mais estabilidade, robustez e capacidade preditiva.

3. Resultados

3.1. Simulação Phy-X

Os valores obtidos de LAC para os oito metais apresentam tendência de decaimento exponencial com o aumento da energia de radiação incidente, como esperado pela interação fóton-matéria. Para baixos valores energéticos (0,015 MeV), os valores de LAC que são elevados para metais com número atômico elevado como tungsténio, bismuto e chumbo indicam excelente capacidade de blindagem para radiação γ e radiação X. Para o alumínio e ferro valores menores de LAC significam baixa eficiência de atenuação. À medida que o valor energético aumenta os metais apresentam queda dos valores de LAC para valores de 0,3 MeV, pois o efeito fotoelétrico passa a não ser mais dominante. Assim, após 0,5 MeV existe estabilização de valores e predominância do efeito Compton. Para energias superiores a 1,0 MeV os compostos mais eficazes na blindagem são o bismuto, o chumbo e o tungsténio enquanto o menor valor pertence ao alumínio.

Desta forma, o tungsténio tem utilidade para blindagem pesada ao passo que o cobre, zinco e cádmio são úteis como materiais compósitos ou em estruturas em



sanduíche bem como camadas secundárias para blindagem. Já o alumínio e o ferro utilizam-se quando leveza é mais importante que proteção radiológica. A presença de picos em 0,662 MeV e 0,284 permite a avaliação da resposta dos metais face a fontes específicas Cs-137.

A Tabela 2 e 3 apresenta os valores de LAC obtidos para os metais analisados em Phy-X. Por sua vez estes resultados estão apresentados na sua forma gráfica na Figura 1.

Tabela 2. Resultados LAC dos metais analisados (parte 1)

Energia (MeV)	Ferro (cm ⁻¹)	Alumínio (cm ⁻¹)	Chumbo (cm ⁻¹)	Cobre (cm ⁻¹)
0,015	449,489	21,463	1265,242	663,515
0,020	202,226	9,286	979,480	302,842
0,030	64,381	3,044	343,799	97,780
0,040	28,576	1,534	162,838	43,561
0,050	15,412	0,993	91,191	23,411
0,060	9,488	0,750	56,923	14,270
0,080	4,687	0,554	27,436	6,836
0,100	2,927	0,460	62,927	4,108
0,150	1,547	0,372	22,845	1,986
0,200	1,150	0,330	11,324	1,397
0,284	0,895	0,288	5,147	1,042
0,300	0,865	0,281	4,572	1,003
0,400	0,740	0,250	2,634	0,843
0,500	0,663	0,228	1,830	0,749
0,600	0,607	0,210	1,415	0,683
0,662	0,579	0,201	1,250	0,651
0,800	0,528	0,185	1,006	0,592
1,000	0,472	0,166	0,805	0,529
1,500	0,384	0,135	0,592	0,430
2,000	0,336	0,117	0,522	0,377
3,000	0,285	0,096	0,480	0,322
4,000	0,261	0,084	0,476	0,297
5,000	0,248	0,077	0,484	0,285
6,000	0,241	0,072	0,498	0,278
8,000	0,236	0,066	0,530	0,275
10,000	0,236	0,063	0,564	0,278
15,000	0,243	0,059	0,642	0,291

Tabela 3. Resultados LAC dos metais analisados (parte 2)

Energia (MeV)	Zinco (cm ⁻¹)	Tungstênio (cm ⁻¹)	Cádmio (cm ⁻¹)	Bismuto (cm ⁻¹)
0,015	579,562	2673,522	361,391	1134,092
0,020	265,556	1265,106	166,097	875,435
0,030	86,153	437,530	325,662	308,223
0,040	38,442	205,374	153,762	146,233
0,050	20,652	114,540	84,578	81,939
0,060	12,569	71,468	51,704	51,178
0,080	5,973	150,321	23,798	24,662
0,100	3,551	85,411	13,182	56,112
0,150	1,672	30,438	4,838	20,366
0,200	1,155	15,101	2,628	10,106
0,284	0,848	6,985	1,468	4,587
0,300	0,815	6,233	1,359	4,073

0,400	0,681	3,705	0,976	2,339
0,500	0,603	2,653	0,800	1,619
0,600	0,549	2,104	0,698	1,249
0,662	0,523	1,883	0,652	1,101
0,800	0,475	1,553	0,577	0,884
1,000	0,424	1,274	0,504	0,706
1,500	0,345	0,962	0,404	0,517
2,000	0,302	0,853	0,358	0,456
3,000	0,259	0,784	0,320	0,419
4,000	0,240	0,777	0,308	0,415
5,000	0,230	0,790	0,306	0,422
6,000	0,226	0,811	0,308	0,434
8,000	0,224	0,861	0,319	0,462
10,000	0,227	0,914	0,333	0,491
15,000	0,238	1,037	0,368	0,559

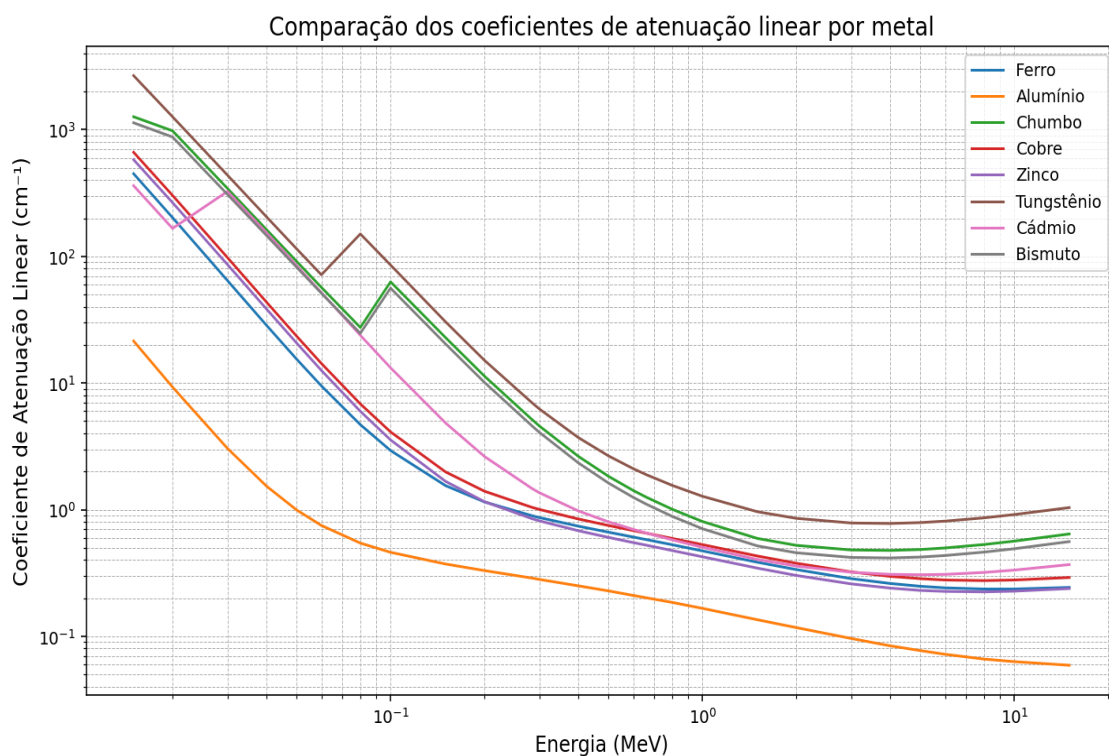


Figura 1. Comparação dos coeficientes de atenuação linear por metal

3.2. Simulação de Montecarlo com distribuição log-normal

Nesta seção transformam-se em logaritmos os dados para lidar com a sua assimetria, para um valor de 10000 valores simulados com base na média e no desvio-padrão dos dados apresentados nas Tabela 2 e Tabela 3 log-transformadas. Realiza-se o teste de Kolmogorov-Smirnov para os dados simulados e verifica-se que a simulação é correta e que o intervalo de confiança gerado para a média de 95% é fisicamente coerente. A tabela 4 apresenta a validação de resultados.

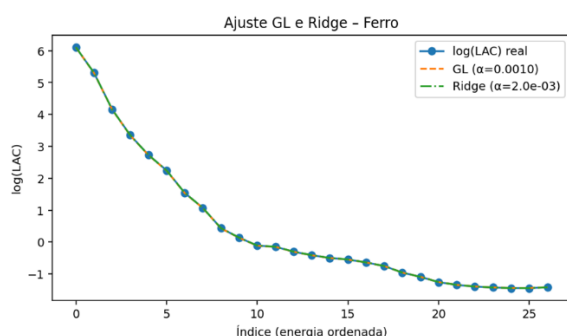
Tabela 4. Tabela de validação de resultados log-normal

Metal	Média (log)	Desvio-padrão (log)	p-valor (log) Kolmogorov - Smirnov	Intervalo de confiança 95%
Ferro	0,442	2,130	0,092	0,024-97,820
Alumínio	-1,165	1,460	0,481	0,0166-5,443
Chumbo	1,700	2,518	0,268	0,038-806,680
Cobre	0,661	2,238	0,077	0,026-154,050
Zinco	0,474	2,271	0,074	0,019-135,550
Tungstênio	2,141	2,515	0,215	0,066-1211,310
Cádmio	1,002	2,436	0,098	0,023-352,730
Bismuto	1,577	2,529	0,272	0,033-738,710

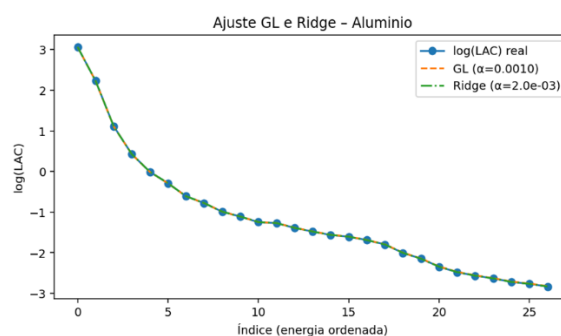
Pela interpretação da tabela 4, e, como o p-valor de todos os metais é superior a 0,05 os dados seguem distribuição normal, validam-se os dados originais de LAC. Por conseguinte, tungstênio, bismuto e chumbo têm intervalos de confiança mais amplos pelo que a capacidade de atenuar energia a mais baixos valores energéticos é superior. Já o alumínio tem baixa capacidade de blindagem.

3.3. Aplicação do modelo fracionário de Grünwald-Letnikov

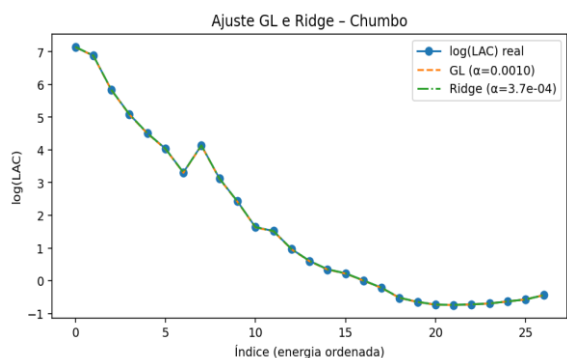
Da aplicação do modelo fracionário de Grünwald-Letnikov e da regressão Ridge resultam os ajustes evidenciados pelas Figuras 2 que contêm os dados log-transformados de LAC com os valores obtidos para o parâmetro α .



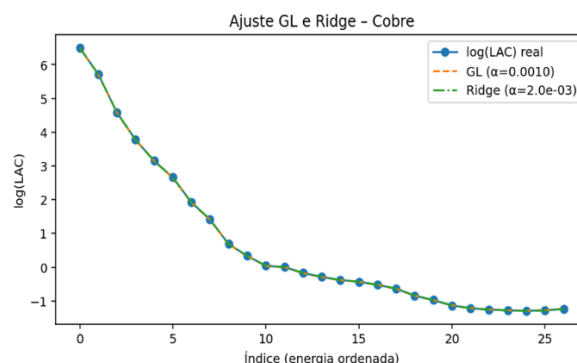
a)



b)



c)



d)

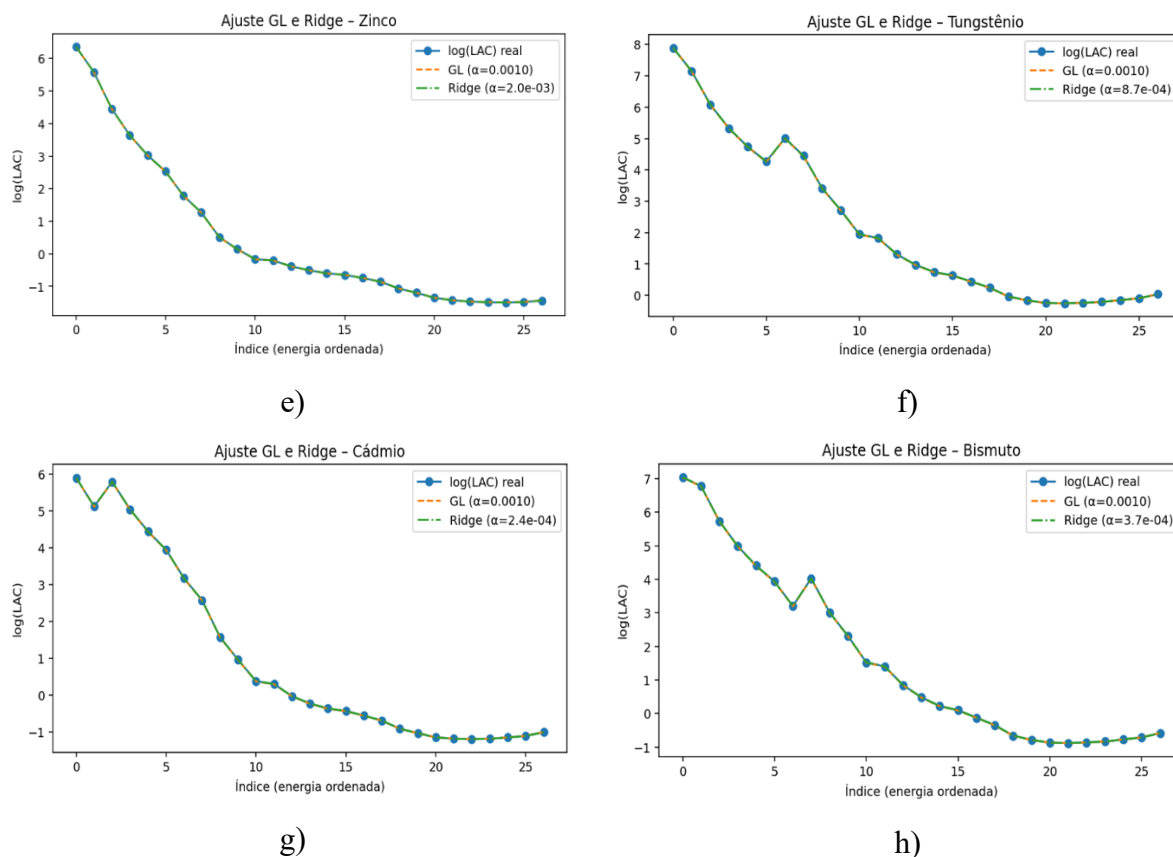
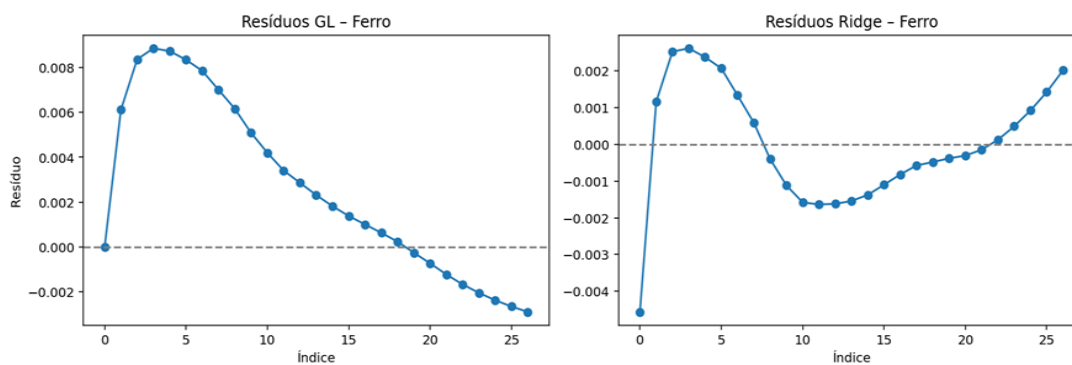
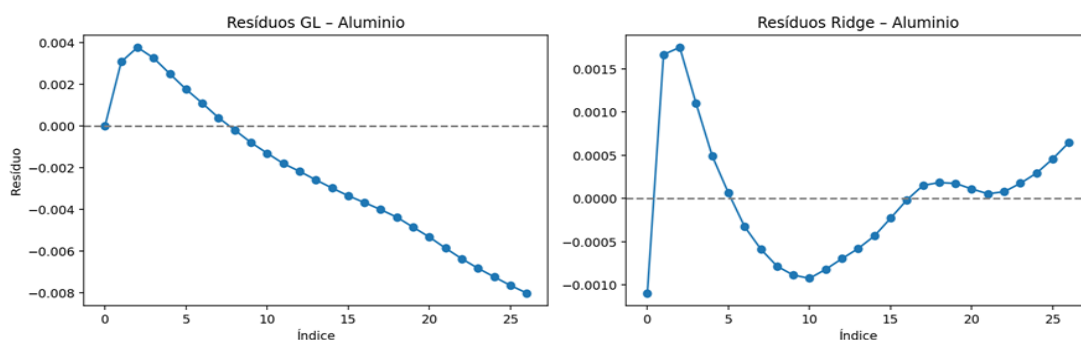


Figura 2. Ajuste Grünwald-Letnikov e Ridge para: a) ferro; b) alumínio; c) chumbo; d) cobre; e) zinco; f) tungstênio; g) cádmio e h) bismuto.

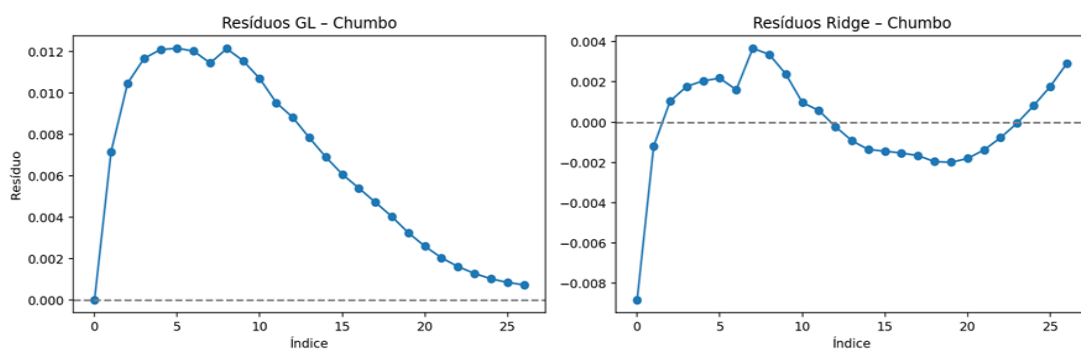
A análise dos resíduos (Figura 3) evidencia diferenças claras entre os modelos. No caso do modelo de Grünwald-Letnikov, a estrutura é não aleatória, com resíduos sistematicamente positivos e decrescentes ao longo do índice, o que sugere sub-ajuste inicial e sobreajuste final. Em contraste, o modelo Ridge apresenta resíduos centrados em zero, com variação simétrica e menor amplitude, indicando maior robustez e ausência de padrões estruturados. Estes resultados suportam a superioridade do modelo Ridge para este conjunto de dados.



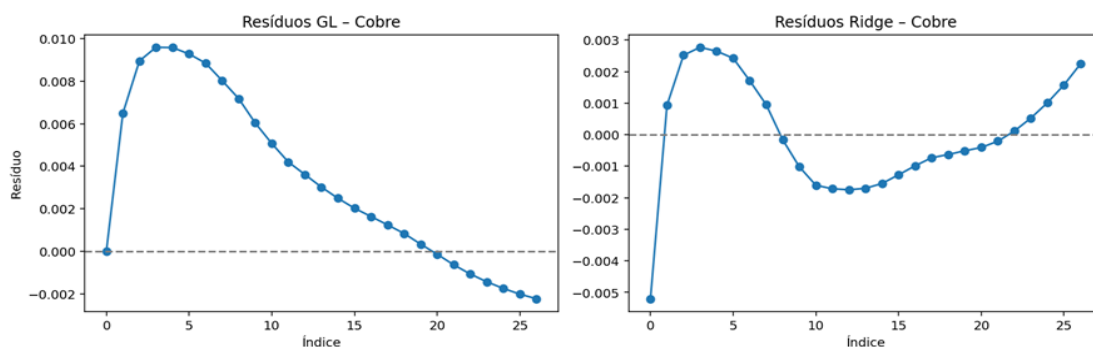
a)



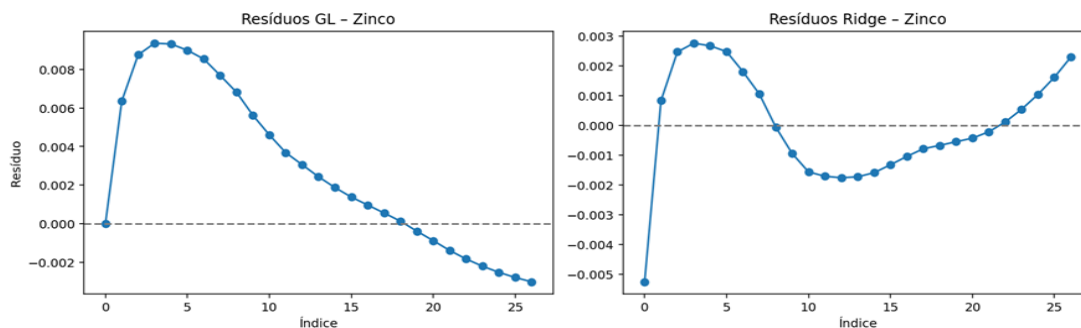
b)



c)



d)



e)

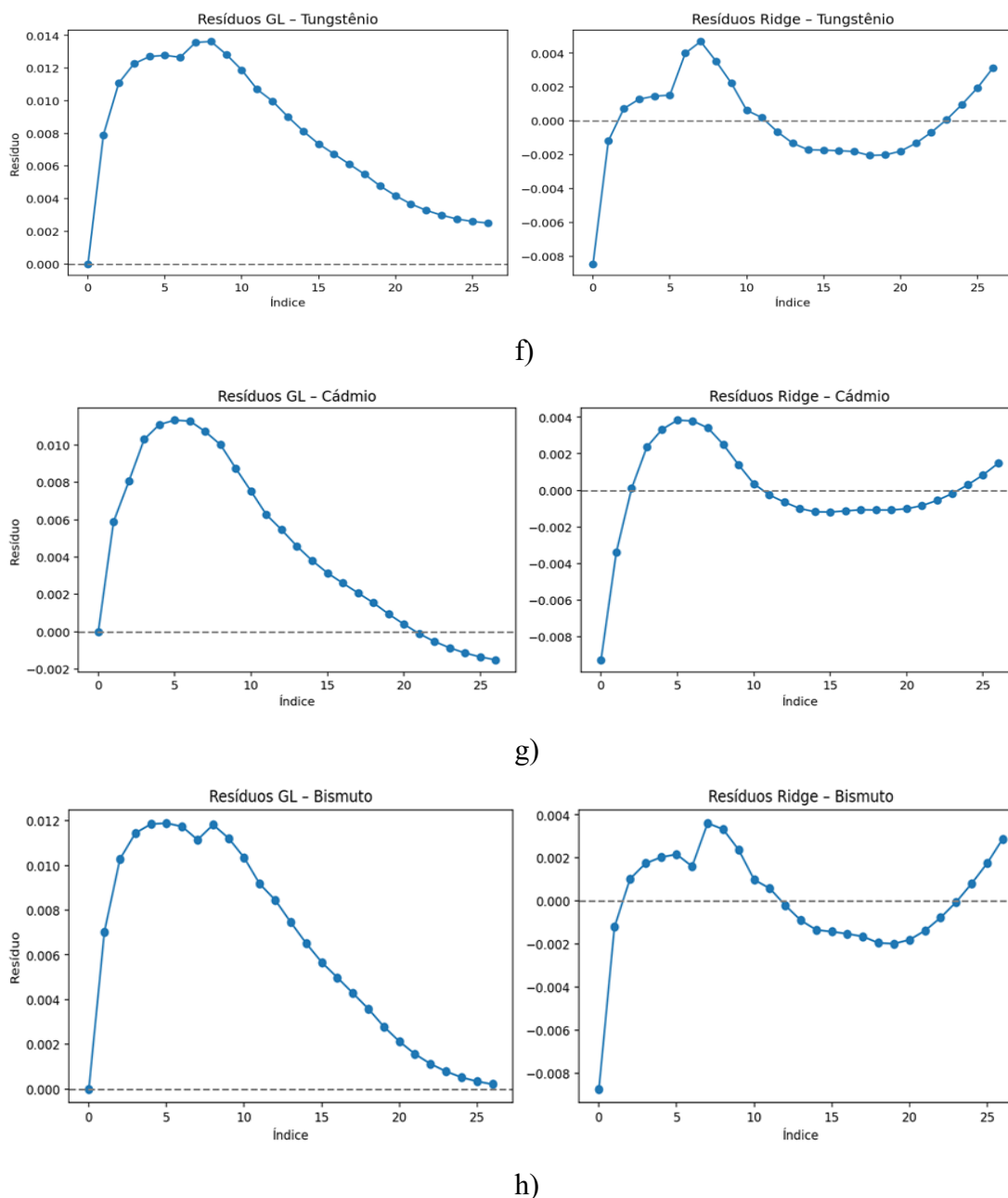


Figura 2. Resíduos de Grünwald-Letnikov e Ridge para: a) ferro; b) alumínio; c) chumbo; d) cobre; e) zinco; f) Tungstênio; g) cádmio e h) bismuto.

As Tabelas 5 e 6 apresentam os indicadores de validação do ajuste log-normal obtido, respectivamente, com o modelo GL puro, e, com a regressão Ridge para os metais puros. Em ambos os casos, os valores de R^2 refletem a elevada capacidade explicativa do modelo, mas, os restantes critérios permitem distinguir claramente o desempenho entre abordagens. O modelo GL puro apresenta RMSE sistematicamente superior, bem como valores de AIC e BIC menos favoráveis, indicando menor parcimônia e maior erro residual. Além disso, os testes de normalidade (Shapiro–Wilk) e de heterocedasticidade (Breusch–Pagan) revelam desvios significativos, sugerindo que os resíduos não seguem uma distribuição aleatória e independente. Os valores reduzidos do teste Durbin–Watson reforçam a presença de autocorrelação positiva dos resíduos.

Em contraste, a regressão Ridge conduz a uma redução expressiva do RMSE em todos os metais, acompanhada de melhorias consistentes nos critérios AIC e BIC. Os valores de Shapiro–Wilk aproximam-se mais do regime de normalidade, e os testes Breusch–Pagan apresentam maior estabilidade, indicando menor heterocedasticidade. O aumento dos valores de Durbin–Watson demonstra redução da autocorrelação residual, aproximando-se do intervalo considerado aceitável para independência. Estes resultados evidenciam que a regularização Ridge melhora substancialmente a estrutura dos resíduos, conduzindo a um ajuste mais robusto e numericamente consistente do modelo log-normal.

Tabela 5. Tabela de validação de resultados log-normal baseado no ajuste GL puro para os metais puros.

Metal	R ²	RMSE	AIC	BIC	SW	BP	DW
Ferro	1,000	0,0047	>- 345	> -344	0,0045	0,0002	0,085
Alumínio	1,000	0,0042	-293,2	-291,9	0,398	<0,0001	0,0333
Cobre	1,000	0,0052	-282,4	-281,1	0,030	0,0001	0,0781
Chumbo	1,000	0,0079	-259,7	-258,4	0,009	0,0001	0,0438
Zinco	1,000	0,0050	-284,2	-282,9	0,030	0,0002	0,0814
Tungstênio	1,000	0,0089	-253,2	-251,9	0,0467	0,0003	0,0393
Cadmio	1,000	0,0063	-271,7	-270,4	0,0192	0,0003	0,0517
Bismuto	1,000	0,0076	-261,4	-260,1	0,0061	0,0001	0,0456

Tabela 6. Tabela de validação de resultados log-normal baseado no ajuste GL em regressão Ridge para os metais puros.

Metal	R ²	RMSE	AIC	BIC	SW	BP	DW
Ferro	1,000	0,0016	-345	-344	0,1745	0,066	0,550
Alumínio	1,000	0,0007	-389,2	-387,9	0,0793	0,0013	0,663
Cobre	1,000	0,0018	-339,6	-338,3	0,0887	0,0100	0,524
Chumbo	1,000	0,0022	-322,6	-321,3	0,0022	0,068	0,474
Zinco	1,000	0,0018	-339,1	-337,8	0,0807	0,0113	0,509
Tungstênio	1,000	0,0026	-320,1	-318,9	0,0185	0,0621	0,422
Cadmio	1,000	0,0003	-320,2	-318,9	0,0007	0,0115	0,329
Bismuto	1,000	0,0076	-261,4	-260,1	0,0023	0,0687	0,470

Em relação ao parâmetro de ordem fracionária, ambos os ajustes têm valores apresentados na tabela 7, cujo α se associa ao coeficiente LAC, tanto para o ajuste GL puro como para o ajuste com regressão Ridge. No modelo GL puro, todos os metais apresentam um valor constante de $\alpha = 0,0010$, sugerindo que o operador fracionário atua de forma praticamente nula, com memória residual mínima e comportamento quase

inteiramente local. Esta uniformidade indica que o ajuste GL, apesar de estável, não é sensível às diferenças estruturais entre metais.

Com a introdução da regularização Ridge, observa-se uma diferença clara entre metais. Para alguns (Ferro, Alumínio, Cobre, Zinco e Bismuto), o valor de α aumenta para aproximadamente 0,0020, indicando maior influência fracionária e uma componente de memória ligeiramente pronunciada. Para outros (Chumbo, Tungstênio e Cádmio), o valor de α diminui significativamente, atingindo ordens de grandeza inferiores sugerindo que a regularização reduz a complexidade dinâmica e aproxima o comportamento do operador fracionário de um regime quase clássico.

Estes resultados mostram que a regressão Ridge não somente melhora os resíduos e a parcimônia do modelo, como ajusta α melhor. Assim, o parâmetro α deixa de ser uniforme e passa a refletir características intrínsecas de metal, revelando que a regularização introduz uma componente adaptativa que não está presente no ajuste GL puro.

Tabela 7. Tabela de validação de resultados log-normal

Metal	α (Grünwald-Letnikov)	α (Grünwald-Letnikov + regressão Ridge)
Ferro	0,0010	0,0020
Alumínio	0,0010	0,0020
Cobre	0,0010	0,0020
Chumbo	0,0010	0,00037
Zinco	0,0010	0,0020
Tungstênio	0,0010	0,00087
Cádmio	0,0010	0,00024
Bismuto	0,0010	0,0037

Em suma, o parâmetro fracionário revela que a regressão Ridge introduz uma componente adaptativa que permite ao modelo log-normal capturar diferenças estruturais entre metais, algo que o ajuste GL puro não consegue evidenciar.

4. Interpretação de resultados

A análise do coeficiente de atenuação linear (LAC) para $n=8$ metais conduziram-se para um modelo de Grünwald-Letnikov, posteriormente aprimorado pela regressão de Ridge e que permitiu a incorporação do índice de GL como variáveis explicativas. Essa abordagem avalia não somente a capacidade de ajuste, mas também a estabilidade numérica e a generalização dos modelos.

O modelo de Grünwald-Letnikov tem desempenho notável para todos os metais analisados com coeficiente de determinação de 1,0 e RMSE baixos que variam de 0,0042 a 0,0089, e, cujos valores confirmam que o modelo fracionário reproduz o comportamento experimental em LAC, capturando com fidelidade a variação energética. As métricas do ajuste reforçam a qualidade do ajuste e a adequação do modelo.

Contudo a análise dos resíduos revela limitações relevantes do modelo de Grünwald-Letnikov, revelando que apenas alguns metais apresentam resíduos compatíveis com a normalidade (p -valor Shapiro Wilk $> 0,05$). Para a maioria (ferro, cobre, chumbo, zinco, tungstênio, cádmio e bismuto), a hipótese de normalidade foi



rejeitada sugerindo-se sobreajuste. Além disso todos os metais apresentam heterocedasticidade significativa (p -valor, Breusch-Pagan $< 0,05$) indicando variância não constante ao longo do índice de energia. Já os valores baixos de Durbin-Watson (0,033-0,085) revelam forte autocorrelação positiva que é característica de dados que reproduzem com fidelidade excessiva e regularização adequada. Desta forma, embora o ajuste numérico seja perfeito o modelo de Grünwald-Letnikov isolado demonstra enviesamento estrutural nos resíduos o que compromete a validade inferencial e a extrapolação dos resultados.

A aplicação da regressão Ridge permitiu melhoria substancial na robustez estatística. Manteve-se $R^2 = 1.000$, mas, o modelo regularizado apresenta redução expressiva no RMSE (0,0007-0,0026) e melhor desempenho nos critérios AIC e BIC, confirmando maior parcimônia e regularização eficiente. Os testes diagnósticos evidenciam melhoria da heterocedasticidade normalidade e autocorrelação, pelo que em metais como o alumínio e o cobre a normalidade foi parcialmente restabelecida enquanto para ferro, chumbo, cádmio, bismuto a rejeição da hipótese da normalidade persistiu ainda que diminuta e atenuada. O teste de Breusch-Pagan revelou redução significativa da heterocedasticidade, com alguns metais a apresentarem p -valor $> 0,05$ como o chumbo e o bismuto indicando estabilização da variância dos resíduos. E relativamente aos valores de Durbin-Watson que aumentaram de forma expressiva (0,32-0,66) evidencia-se diminuição substancial da autocorrelação ainda que com vestígios residuais em alguns metais.

O modelo Grünwald-Letnikov demonstra precisão numérica excepcional, mas não cumpre integralmente os pressupostos clássicos de regressão (normalidade, homoscedasticidade e independência dos resíduos), o que compromete inferências estatísticas ou extrapolações. Já a regressão Ridge mantém a precisão de Grünwald-Letnikov melhorando a estabilidade estatística reduzindo autocorrelação e heteroscedasticidade o que torna o modelo mais confiável para extrapolação e generalização.

A consistência dos coeficientes entre metais reforça a hipótese de que a relação entre LAC e energia segue padrões físicos universais, apoiando a validade da abordagem combinada Ridge com Grünwald-Letnikov embora persistam desvios de normalidade residual sugerindo que modelos robustos adicionais, regressões ainda mais robustas ou modelos fracionários generalizados poderiam aperfeiçoar o ajuste. Apesar da elevada precisão numérica, o modelo Grünwald-Letnikov não satisfaz plenamente os pressupostos clássicos de regressão, limitando a validade inferencial. A regressão Ridge melhora a estabilidade estatística, reduzindo autocorrelação e heteroscedasticidade, mas persistem desvios de normalidade residual. Para ultrapassar estas limitações, podem ser considerados métodos mais robustos, como regressões M-estimadas, que são menos sensíveis a outliers e distribuições não-gaussianas. Em paralelo, modelos fracionários mais gerais — como Caputo, Caputo-Fabrizio, Atangana-Baleanu ou operadores multi-ordem — podem capturar de forma mais realista a memória física do sistema, potencialmente reduzindo os desvios estruturais observados. A consistência dos coeficientes entre metais sugere que a relação entre LAC e energia segue padrões universais, reforçando a pertinência de explorar estas extensões robustas e fracionárias para obter um ajuste estatística e fisicamente mais coerente

Os dados foram obtidos através do software Phy-X cuja base é composta por valores experimentais e tabulados de LAC. Apesar de amplamente reconhecido o software tem limitações de interpolação, cobertura de materiais e precisão, sobretudo em regiões próximas às bandas de absorção onde as variações energéticas são mais abruptas, pois, é, nessas regiões que a interpolação introduz erros sistemáticos significativos o que afeta a precisão dos cálculos de blindagem.

Desta forma o Phy-X, assume materiais como homogêneos e puros o que pode levar à subestimação ou superestimação em condições reais. Pequenos desvios na densidade ou na entrada de energia podem igualmente impactar os resultados. Além disso o software não trata adequadamente interações múltiplas, espalhamento ou efeitos secundários de fótons, adequando-se para análises de primeira ordem. Outro ponto relevante é a restrição à extrapolação uma vez que o software é apenas confiável dentro de intervalos energéticos para materiais tabulados, fornecendo resultados imprecisos para energias elevadas (> 10 MeV) ou ainda materiais exóticos. O Phy-X embora útil para cálculos rápidos e visualização de propriedades não incorpora rotinas de regressão, regularização ou modelagem fracionária, o que justifica o desenvolvimento e integração de scripts externos em Python para análises avançadas e automatizadas.

Para trabalhos futuros aconselha-se a aplicação do framework Grünwald-Letnikov com regressão Ridge a outros metais e ligas aplicados à blindagem de forma a avaliar a generalização do modelo e a sensibilidade do parâmetro fracionário α . É ainda aconselhado a exploração de outras técnicas de regularização como Lasso e ElasticNet, bem como modelos de regressão não lineares ou bayesianos capazes de incorporar incertezas experimentais. Adicionalmente é sugerida a análise do impacto de diferentes discretizações no cálculo da derivada fracionária de Grünwald-Letnikov para avaliação de variações significativas de valor α ótimo e a sua influência sobre o desempenho preditivo.

A discussão sobre o significado físico de uma derivada de Grünwald-Letnikov de ordem $\alpha=0,001$ exige reconhecimento de operações num regime matemático onde a ordem fracionária se aproxima perigosamente do limite clássico. Quando α se aproxima de 0, a derivada fracionária tende para a identidade, e o operador deixa de introduzir memória significativa no sistema. Assim, quando se observam valores pequenos como $\alpha=0,001$, está-se perante comportamento que, do ponto de vista fenomenológico, é indistinguível de um material puramente elástico, com uma dissipação residual tão ténue que só se manifesta em condições experimentais de elevada resolução temporal ou espectral. No caso do ferro, por exemplo, a estimativa obtida pelo ajuste de Grünwald-Letnikov sugere um regime quase-elástico, onde a resposta do material se domina pela componente instantânea, e a contribuição de memória — embora matematicamente presente — é fisicamente marginal. Trata-se de uma dissipação de lei-potência fraca, cuja existência é teoricamente plausível, mas cuja medição empírica exige dados de qualidade excepcional, livres de ruído instrumental, mas com densidade suficiente para capturar variações subtis na curvatura temporal.

Neste sentido, em modelação fracionária e em muitos sistemas físicos, ordens fracionárias muito baixas podem emergir não por razões estruturais, mas como consequência de regularização numérica, limitações de escala temporal ou mesmo correlação entre parâmetros. No entanto, quando o valor se mantém estável entre diferentes metais e diferentes ajustes, como ocorre no modelo GL puro, isso sugere que

o operador fracionário está a colapsar para um regime trivial, incapaz de distinguir entre materiais com comportamentos mecânicos e eletrônicos profundamente distintos. É precisamente aqui que a introdução da regularização Ridge se torna relevante: ao permitir que α se afaste do valor uniforme de 0,001, o modelo passa a capturar nuances específicas de cada metal, revelando que a ordem fracionária não é apenas um parâmetro matemático, mas um indicador sensível da microestrutura e da dissipação interna.

Ainda assim, mesmo quando a regularização permite que o parâmetro α aumente para valores como 0,002 ou diminua para ordens de grandeza inferiores, continuamos num regime onde a memória é fraca. A diferença, porém, é conceptual, pois, um α ligeiramente maior implica que o material apresenta um relaxamento mais lento, uma perda interna mais distribuída no tempo, ou ainda uma assinatura viscoelástica que, embora subtil, é consistente com fenómenos de dispersão eletrônica ou microplasticidade. Já valores menores, como os observados no chumbo ou no cádmio após regularização, sugerem que a dinâmica é puramente local, com a resposta dominada por mecanismos instantâneos e uma contribuição fracionária que se aproxima do limiar da irrelevância física.

O debate, portanto, não é apenas sobre a magnitude de α , mas sobre o que significa operar num regime fracionário tão próximo do limite clássico. A questão fundamental é compreender se estes valores devem ser interpretados como evidência de que os metais estudados exibem apenas vestígios de comportamento de memória — algo compatível com a sua estrutura cristalina e com a natureza dos processos de atenuação — ou se, pelo contrário, revelam que o modelo Grünwald-Letnikov puro é incapaz de explorar a verdadeira complexidade do sistema, sendo a regularização Ridge a única via para extrair informação diferenciada, pelo que o que está em causa é a própria legitimidade da modelação fracionária em regimes de ordem extremamente baixa: se estes valores são fisicamente significativos ou se representam somente o limite inferior da sensibilidade do método.

5. Conclusão

Os resultados obtidos demonstram um ajuste praticamente perfeito entre os valores experimentais e os modelos aplicados, uma vez que tanto o modelo de Grünwald-Letnikov (GL) como o modelo Ridge apresentaram coeficientes de determinação (R^2) iguais a 1.0000 e valores de RMSE extremamente baixos (0.0007–0.0089). Estes resultados confirmam a alta capacidade preditiva e a precisão numérica das abordagens implementadas para a modelação dos coeficientes de atenuação linear (LAC) dos metais analisados.

Observou-se consistência entre os diferentes metais, evidenciada pela coerência dos coeficientes padronizados: o coeficiente associado à energia apresentou valores negativos, refletindo a tendência decrescente da atenuação com o aumento da energia, enquanto o termo fracionário (GL_pred) manteve-se fortemente positivo, corroborando a robustez estrutural e física do modelo fracionário e a sua capacidade de captar a natureza não linear das interações entre radiação e matéria.

A regressão Ridge revelou-se particularmente eficaz na redução da autocorrelação e da heterocedasticidade dos resíduos, sem comprometer o desempenho global do modelo (mantendo $R^2 = 1.0000$) e melhorando as métricas de informação (AIC e BIC). Estes resultados indicam que a combinação entre o modelo fracionário GL e a



regularização Ridge constituiu uma abordagem estável, robusta e confiável, adequada para o tratamento de dados radioativos complexos.

No entanto, persistem limitações a considerar. Apesar da melhoria geral, alguns resíduos não seguem perfeitamente a distribuição normal, conforme indicado por valores de $p < 0.05$ no teste de Shapiro–Wilk em determinados metais. Essa violação da normalidade pode introduzir restrições às inferências estatísticas clássicas e afetar extrapolações fora da faixa energética analisada. Adicionalmente, o teste de Durbin–Watson (DW) apresenta valores mais próximos da quase ausência de autocorrelação após a aplicação do Ridge, mas, ainda se verifica dependência sequencial parcial dos resíduos, sugerindo que ajustes temporais ou funcionais adicionais poderiam ser explorados em trabalhos futuros.

A análise do parâmetro fracionário evidencia que ordens tão pequenas como $\alpha = 0,001$ colocam o sistema num regime limítrofe entre a dinâmica clássica e a fracionária, onde a memória existe apenas como vestígio matemático e a dissipação assume um papel quase imperceptível. A aparente trivialidade deste valor, longe de desvalorizar o modelo, revela antes a sensibilidade extrema necessária para captar fenómenos dissipativos de baixa intensidade em materiais metálicos. Ao mesmo tempo, a forma como a regularização Ridge permite que α se afaste deste valor uniforme demonstra que a ordem fracionária não é um mero artefato numérico, mas um indicador da microestrutura e da resposta interna de cada metal. Assim, o estudo confirma que a modelação fracionária, mesmo em ordens muito baixas, continua a oferecer uma lente diferenciadora sobre a dissipação e a memória material, desde que acompanhada de métodos de estabilização capazes de revelar a variabilidade física que o ajuste clássico tende a ocultar.

Importa salientar que os dados de entrada foram obtidos a partir do software Phy-X, o qual, apesar de amplamente utilizado, possui limitações inerentes aos métodos de interpolação e à base de dados de materiais tabelados. Assim, os resultados refletem estas restrições e não garantem precisão fora do intervalo energético validado pelo próprio software, devendo as previsões ser interpretadas dentro do contexto experimental e computacional delimitado.

6. Referências

- AGOSTINELLI, S. et al. GEANT4—a simulation toolkit. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, v. 506, n. 3, p. 250–303, 2003. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0168-9002\(03\)01368-8](https://doi.org/10.1016/S0168-9002(03)01368-8)
- ATTIX, Frank Herbert. *Introduction to Radiological Physics and Radiation Dosimetry*. Weinheim: Wiley-VCH, 2004.
- Bushberg, J. T., Seibert, J. A., Leidholdt, E. M., & Boone, J. M. (2012). *The Essential Physics of Medical Imaging* (3rd ed.). Lippincott Williams & Wilkins.
- El-Khayatt, A. M., & Akkurt, I. (2013). The effect of barite proportion on neutron and gamma-ray shielding. *Annals of Nuclear Energy*, 51, 5–9. <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2012.08.026>
- Fukuda, A., Ichikawa, N., Matsubara, K., Hayashi, T., Hirose, A., & Takamatsu, K. (2024). Half-value layer measurements using solid-state detectors and single-rotation technique with lead apertures in spiral computed tomography with and without a tin



- filter. *Radiological Physics and Technology*, 17(1), 207–218. <https://doi.org/10.1007/s12194-023-00767-6>
- Furioso, L. C., Soares, V. O., & Muniz, R. F. (2023). Uso de radiografias digitais e simulações de atenuação de massa na determinação da radiopacidade de materiais. *Anais do EAIC 2023*. Universidade Estadual de Maringá.
- Disponível em <https://www.eaic.uem.br/eaic2023/anais/artigos/6526.pdf>
- Hubbell, J. H., & Seltzer, S. M. (1995). Tables of X-ray mass attenuation coefficients and mass energy-absorption coefficients 1 keV to 20 MeV for elements $Z = 1$ to 92 and 48 additional substances of dosimetric interest. *National Institute of Standards and Technology*. Disponível em <https://www.nist.gov/pml/x-ray-mass-attenuation-coefficients>
- Knoll, G. F. (2010). *Radiation Detection and Measurement* (4^a ed.). John Wiley & Sons
- Podgorsak, E. B. (Ed.). (2005). *Radiation Oncology Physics: A Handbook for Teachers and Students*. International Atomic Energy Agency.
- Şakar, E., Özpolat, Ö. F., Alım, B., Sayyed, M. I., & Kurudirek, M. (2020). Phy-X/PSD: Development of a user-friendly online software for calculation of parameters relevant to radiation shielding and dosimetry. *Radiation Physics and Chemistry*, 166, 108496. <https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2019.108496>
- Zabine, L. (2023). *Otimização de um setup para medidas de atenuação de radiação do ^{241}Am* [Iniciação Científica, Universidade Estadual de Maringá]. Repositório Institucional da UEM. Disponível em: <https://www.uem.br/repositorio>