

IEN - 27 / 91

BR3230399
IEN - 27

COMISSÃO NACIONAL
DE ENERGIA NUCLEAR



INSTITUTO DE
ENGENHARIA NUCLEAR

QUASAR - UM PROGRAMA INTERATIVO PARA
ANÁLISE DE ESPECTROS EM
COMPUTADORES PESSOAIS

POR

LUIZ TELMO AULER
JOSÉ DE ANCHIETA WANDERLEY DA NÓBREGA

CAIXA POSTAL 68550
CIDADE UNIVERSITÁRIA - ILHA DO FUNDAÇÃO

RIO DE JANEIRO
BRASIL

G O V E R N O D O B R A S I L

**QUASAR - UM PROGRAMA INTERATIVO PARA
ANÁLISE DE ESPECTROS EM
COMPUTADORES PESSOAIS**

por

**LUIZ TELMO AULER
JOSÉ DE ANCHIETA WANDERLEY DA NÓBREGA**

**INSTITUTO DE ENGENHARIA NUCLEAR
CIDADE UNIVERSITÁRIA - ILHA DO FUNDÃO
CAIXA POSTAL 68550
21945 RIO DE JANEIRO, RJ
BRASIL**

INSTITUTO DE
ENGENHARIA NUCLEAR

IEN-27

Novembro de 1991

**QUASAR - UM PROGRAMA INTERATIVO PARA
ANÁLISE DE ESPECTROS EM
COMPUTADORES PESSOAIS**

por

**Luiz Telmo Auler
José de Anchieta Wanderley da Nóbrega**

RESUMO

O programa QUASAR, para análise interativa e relatório de dados de espectro, de energia (altura de pulsos) e de tempo (multicontador), é descrito. São apresentados com detalhes as instruções de operação e os métodos matemáticos e algoritmos utilizados pelo programa. Este programa é uma extensão do programa PULSAR.

Palavras-chaves: analisadores multicanal, análise de espectros, software, computadores pessoais.

QUASAR - An Interactive Program
for Spectrum Analysis in
Personal Computers

by

Luiz Telmo Auler
José de Anchieta Wanderley da Nóbrega

ABSTRACT

The QUASAR software for the interactive analysis and report of energy (pulse-height) and time (multichannel scaling) spectra is described. The operating instructions as well as the mathematical methods and algorithms used by the program are presented in detail. This program is an extension to the PULSAR program.

Keywords: multichannel analyzers, spectrum analysis, software, personal computers.

SUMÁRIO

	pag.
1. INTRODUÇÃO	1
2. INSTRUÇÕES DE OPERAÇÃO	2
2.1. Menu Principal	4
2.2. Menu In/Out	5
2.3. Menu Modify	6
2.4. Menu ROI	7
2.5. Menu Analyze	7
2.5.1. Menu ANALPHA	7
2.5.1.1. Menu PkShape	8
2.5.2. Menu ANALMCS	9
3. ANÁLISE DE ESPECTROS DE ALTURA DE PULSOS	10
3.1. Amaciamento de Espectros	10
3.2. Localização dos Picos	13
3.3. Cálculo dos Parâmetros dos Picos	15
3.4. Minimização pelo χ^2	16
3.4.1. Determinação da Forma dos Picos	18
3.4.2. Ajuste de Espectros	20
4. ANÁLISE DE ESPECTROS DE MULTICONTADOR	20
APÊNDICE	23
A. Mínimos Quadrados Não-Linear	23
REFERÊNCIAS	26

1. INTRODUÇÃO

O QUASAR¹ é um programa para análise de espectros de radiações nucleares que foi desenvolvido a partir do programa PULSAR⁽¹⁾. Podemos vê-lo como uma extensão deste, pois conserva toda a sua funcionalidade, exceto a de aquisição de dados, e lhe acrescenta a capacidade de fazer análises muito mais acuradas e manipulações muito mais extensas dos dados espectrais, como descrevemos abaixo. Ao contrário do PULSAR, que é principalmente um programa de aquisição de dados e necessita de uma placa analisadora multicanal Modelo 11S001 instalada no computador, o QUASAR é do tipo "stand-alone". É possível realizar a aquisição de dados com o PULSAR e, simultaneamente, a análise de um espectro com o QUASAR, otimizando assim a utilização do computador.

Com o QUASAR, introduzimos diversas operações típicas em análise de espectros de altura de pulsos, que não estão disponíveis no PULSAR, entre as quais podemos mencionar as seguintes:

- transferência de espectros para outra região de memória do computador;

- comparação de dois ou mais espectros, mostrando-os simultaneamente na tela do computador;

- operações aritméticas de soma e subtração de contagens ou de espectros;

- análise de singletos e multipletos pelo método do mínimo chi-quadrado (χ^2);

- filtragem de ruído por amaciamento ("smoothing") de espectros;

- normalização de espectros pelo tempo de contagem, pela área da região de interesse, ou pela contagem de um canal;

Para manter a máxima compatibilidade entre os dois programas, os procedimentos para gravação e leitura de dados,

¹ "A program for QUAntitative Spectrum Analysis and Report".

manipulação de regiões de interesse, localização de picos, e formato e gerenciamento da tela gráfica foram mantidos essencialmente idênticos. Também decidimos manter a mesma aparência na apresentação do programa, de forma que o usuário do PULSAR não tenha nenhuma dificuldade na utilização do QUASAR.

O programa foi escrito em Turbo Pascal, versão 6.0, para computadores pessoais do tipo IBM-PC ou compatíveis, com uma configuração mínima de 256 kBytes de memória RAM, uma unidade de disco flexível e uma controladora de vídeo CGA. Por causa do uso intensivo de algoritmos matemáticos, é recomendável que o computador possua também um coprocessador aritmético a fim de proporcionar uma velocidade do processamento satisfatória.

No capítulo 2 detalhamos a operação do programa, descrevendo os seus diversos menus e no capítulo 3 apresentamos os algoritmos matemáticos utilizados para analisar espectros de altura de pulsos. O capítulo 4 descreve as análises possíveis com espectros de multicontador.

2. INSTRUÇÕES DE OPERAÇÃO

A figura 2.1 é a tela principal do QUASAR para um espectro de altura de pulsos. Na Fig. 2.2 estão identificadas diversas janelas funcionais por letras maiúsculas, cujas finalidades são apresentadas na tabela 2.1.

Nas seções seguintes, apresentamos os menus do QUASAR. Na apresentação de cada um deles, são também mostrados exemplos das mensagens que podem aparecer no decorrer do uso.

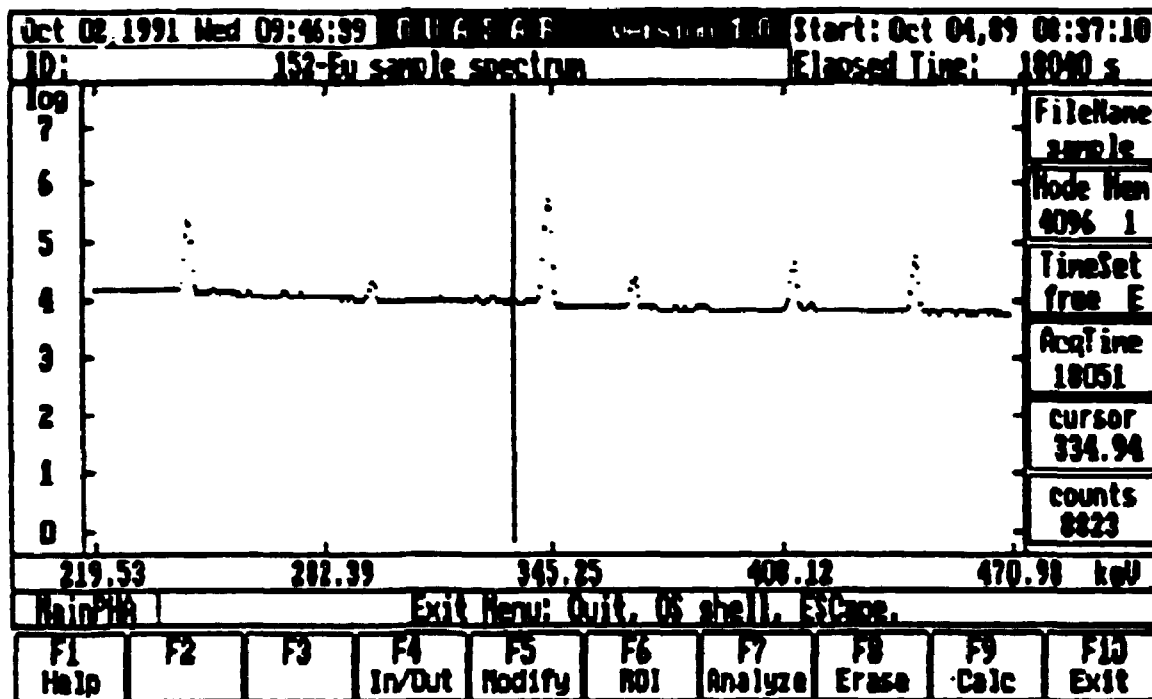


Fig. 2.1. Tela Típica do QUASAR

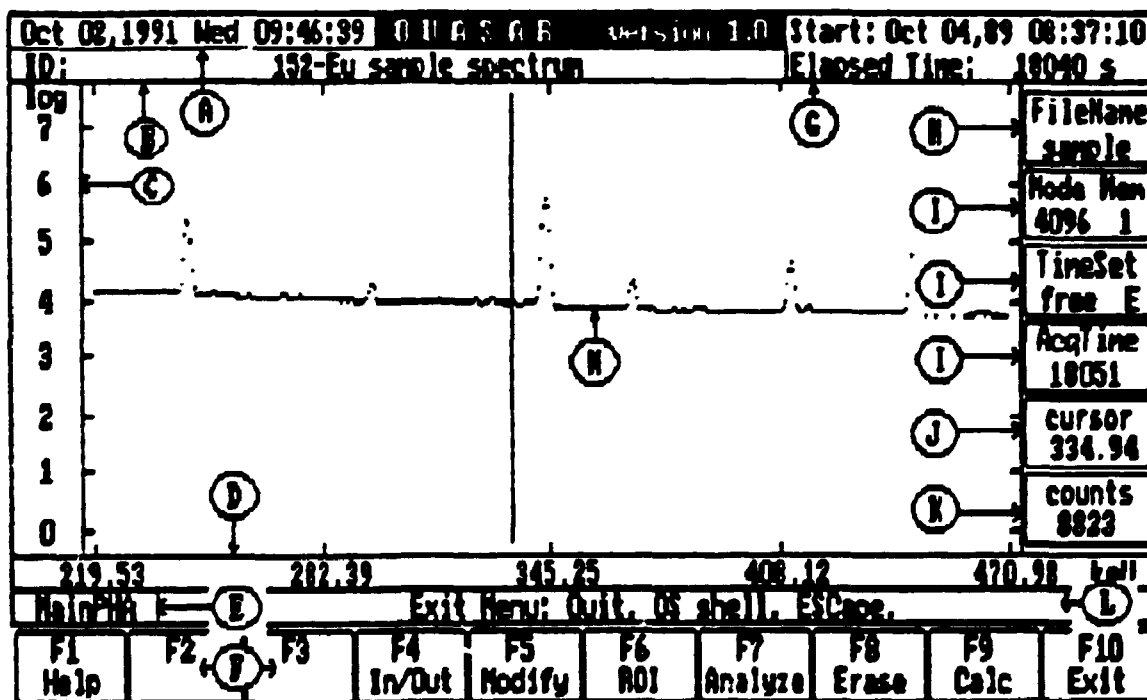


Fig. 2.2. Identificação das Janelas

Tabela 2.1. Janelas da Tela do QUASAR

JANELA	DESCRIÇÃO
A	Data e hora atuais do computador
B	Título do espectro
C	Escala vertical (contagens)
D	Escala horizontal
E	Menu ativo
F	Teclas de funções ativáveis
G	Dados relativos ao espectro
H	Nome do arquivo do espectro
I	Parâmetros de aquisição do espectro
J	Canal atual do cursor
K	Contagem do canal do cursor
L	Menus secundários e mensagens
M	Gráfico do espectro

2.1. Menu Principal

MainPHA	Operation in PULSE HEIGHT ANALYZER mode.								
F1 Help	F2	F3	F4 In/Out	F5 Modify	F6 ROI	F7 Analyze	F8 Erase	F9 Calc	F10 Exit

O programa, que inicia sempre no modo PHA (MainPHA), muda automaticamente para o modo MCS (MainMCS), ao ler um espectro obtido pelo PULSAR neste modo. As opções do menu principal são as seguintes (a opção Modify não está disponível no modo MCS):

- F1 - Help: mostra as teclas de movimentação e mudança da tela gráfica.
- F4 - In/Out: ativa o menu para leitura e gravação de arquivos.
- F5 - Modify: ativa o menu para fazer operações que modificam os dados originais do espectro.
- F6 - ROI: ativa o menu para manipulação de regiões de interesse (ROIs)² do espectro.
- F7 - Analyze: ativa o menu para realizar diferentes tipos de análises do espectro.
- F8 - Erase: menu para apagar as contagens, desmarcar as ROIs, ou ambos. Uma mensagem é mostrada ao

² ROI, que significa "Region of Interest", é uma sigla comumente usada.

usuário com as opções possíveis.

- F9 - Calc:** ativa uma calculadora científica, cujas instruções são apresentadas na própria tela.
- F10 - Exit:** termina o programa ou suspende sua execução temporariamente, para executar outro programa.

As teclas F1 e F9, quando presentes em qualquer menu, executam sempre as funções acima, e portanto não serão mais mencionadas. A tecla de função F10, quando presente em qualquer outro menu, retorna ao menu principal, e assim, também será omitida das descrições seguintes.

2.2. Menu In/Out

In/Out	Print channel counts? (Yes or No).								
F1	F2	F3 DskRead	F4 DskWrit	F5 Dir	F6 ChPath	F7 Print	F8 Transfr	F9 Calc	F10 Main

Este menu é ativado pela tecla F4 do menu principal (MainPHA ou MainMCS), para realizar leituras e gravações de espectros em disco. A primeira ação do usuário para usar o QUASAR será ativar este menu, com o qual poderá ler um espectro para a memória. Os espectros são guardados com a extensão .SPC, por "default", e não é necessário digitá-la.

- F3 - DskRead:** função para ler espectros. Uma mensagem solicita o nome do arquivo, que deve estar no "path" atual.
- F4 - DskWrit:** use esta tecla para gravar espectros em disco. A função solicita um nome para o arquivo e avisa, se este já existir. O arquivo é gravado no "path" atual.
- F5 - Dir:** mostra todos os arquivos com extensão .SPC existentes no "path" atual, assim como suas datas de gravação.
- F6 - ChPath:** mostra e permite mudar o "path" atual.
- F7 - Print:** imprime uma listagem dos dados atualmente mostrados na tela, por número de canal, incluindo um cabeçalho identificador do espectro.
- F8 - Transfr:** transfere os dados do grupo de memória presentemente ativo para aquele escolhido pelo usuário. Esta é uma operação preliminar, necessária para o caso de desejarmos

somar, subtrair, normalizar, ou comparar espectros.

2.3. Menu Modify

Modify	Add menu: Constant count, Spectrum								
F1 Help	F2 ID	F3 Add	F4 Sub	F5 Smooth	F6 Normliz	F7	F8 Compare	F9 Calc	F10 Main

Este menu, ativado pela tecla F5 do menu principal (somente no modo PHA), torna possível realizar diversas operações em espectros com modificação dos valores dos dados originais. Os dados modificados podem ser salvos em novos arquivos, se assim o desejarmos, com a função F4 do menu In/Out.

- F2 - ID:** muda a identificação do espectro, caso o usuário deseje salvá-lo com as modificações efetuadas.
- F3 - Add:** permite somar, seja um espectro a outro, seja uma constante a todos os canais do espectro. No caso de somarmos espectros, aquele transferido com a função F8 do menu In/Out será somado, canal a canal, ao espectro ativo.
- F4 - Sub:** permite subtrair espectros ou constantes, do espectro presentemente ativo.
- F5 - Smooth:** ativa uma função para amaciar ("smooth") um espectro, usando um número determinado de pontos que o usuário escolhe a partir de um menu mostrado na tela, mediante o algoritmo detalhado no capítulo 3.
- F6 - Normaliz:** normaliza os dados de um espectro pelo de outro que tenha sido transferido com a função F8 do menu In/Out. As opções são de normalizar pelo tempo de aquisição, pela contagem do cursor ou pela integral de contagem da ROI onde esteja o cursor. O espectro transferido serve como normalizador.
- F8 - Compare:** permite mostrar na mesma tela gráfica do espectro presentemente ativo, um outro que tenha sido transferido ou armazenado em um grupo de memória diferente.

2.4. Menu ROI

ROI	Reset ROI: Move cursor to second ROI boundary and press F4 again.								
F1 Help	F2	F3 Set	F4 Reset	F5 NextROI	F6 Wipe	F7 View	F8 Hide	F9 Calc	F10 Main

Este menu, ativado pela tecla F6 do menu principal, atua sobre as regiões de interesse de um espectro (ROIs), e suas opções são as seguintes:

F2 - Set: marca canais contíguos do espectro, como ROIs, apresentando instruções para tal na tela.

F4 - Reset: desmarca as ROIs, apresentando as instruções na tela.

F5 - NextROI: posiciona o cursor no início da próxima ROI.

F6 - Wipe: desmarca, a partir da posição do cursor, seja a ROI onde ele se encontrar, seja a próxima ROI do espectro. Realiza a mesma função que Reset, porém de forma rápida.

F7 - View: torna visíveis todas as ROIs presentemente marcadas que estiverem escondidas.

F8 - Hide: esconde as ROIs presentemente marcadas para tornar a tela mais "limpa" ou menos congestionada. Esta função não desmarca as ROIs.

2.5. Menu Analyze

Este menu, ativado pela tecla F7 do menu principal, contém os procedimentos que realizam a análise dos espectros. Os algoritmos utilizados são detalhados nos capítulos 3 e 4, enquanto nesta seção são apenas apresentadas as funções disponíveis e seus usos.

2.5.1. Menu ANALPHA

ANALPHA	Must do peak shape first. Press any key.								
F1 Help	F2 Calibr	F3 PkSrch	F4 PkShape	F5 NextROI	F6 Stats	F7 SpecFit	F8 PkParms	F9 Calc	F10 Main

F2 - Calibr: calibra o eixo horizontal em unidades de energia (keV) ou retorna a número de canal. A calibração é realizada por apenas dois pontos que devem ser fornecidos pelo usuário

seguinto as instruções mostradas na tela.

- F3 - PkSrch: localiza e marca automaticamente as ROIs onde houver picos, utilizando o algoritmo descrito na seção 3.2. O usuário pode selecionar o nível estatístico do algoritmo e a região na qual os picos serão procurados, ou utilizar o default do programa: nível igual a 5,0 e procura na região mostrada na tela. Embora o algoritmo seja eficiente, aconselha-se verificar as ROIs, pois elas serão usadas pelas análises posteriores.
- F4 - PkShape: ativa o primeiro passo da análise do espectro pelo método de minimização do χ^2 . Nesta etapa o usuário deverá selecionar picos isolados (no mínimo 4), que servirão para ajustar a forma dos picos em função do número do canal. Esta tecla ativa um submenu de mesmo nome, e os algoritmos são detalhados no capítulo 3.
- F5 - NextROI: posiciona o cursor no início da próxima ROI.
- F6 - Stats: calcula estatísticas de ROIs selecionadas, tais como médias e desvios padrões.
- F7 - SpecFit: realiza o segundo passo da análise de picos de um espectro. Exige uma prévia calibração da forma do pico, porém permite o ajuste de multipletos com até 7 componentes. Apresenta o relatório da análise em uma de três opções, quais sejam: mostra na tela os resultados principais, imprime um relatório resumido, ou um relatório detalhado incluindo um gráfico de impressora que permite avaliar a qualidade do ajuste. Exceto quando os resultados são mostrados na tela, o ajuste é realizado sem intervenção do usuário.
- F8 - PkParas: ativa um procedimento que realiza uma análise simplificada de picos. Trata-se da mesma análise realizada pelo PULSAR, adequada apenas para singletos.

2.5.1.1. Menu PkShape

PkShape										Shape menu : Print all, Display only, ESC									
F1	F2	F3	F4	F5	F6	F7	F8	F9	F10										
Help			FitShap	NextROI	PeakFit	Analyze													

Este menu é ativado pela tecla F4 do menu AnalPHA. Conforme acima mencionado, ele deve ser ativado para a reali-

zação de uma análise completa do espectro. As teclas ativas e suas respectivas funções são descritas a seguir.

- F4 - FitShap:** esta função deve ser executada após ajustar, com a função PeakFit deste mesmo menu, no mínimo quatro picos escolhidos como padrões. Com os resultados das análises destes picos, esta opção calibra, em função do número do canal, a forma dos picos do espectro. Para maiores detalhes veja o capítulo 3.
- F5 - NextROI:** posiciona o cursor no início da próxima ROI. Utilizamos esta tecla para localizar o cursor no início da ROI do pico que quiser ajustar como padrão, antes de pressionar a tecla F6 deste menu.
- F6 - PeakFit:** ajusta o pico em que estiver localizado o cursor, pelo método de minimização do χ^2 . Contém opções que permitem que sejam impressos ou mostrados na tela os resultados principais da análise efetuada, segundo a escolha do usuário. O método é detalhado no capítulo 3.

2.5.2. Menu AnalMCS

AnalMCS * ERROR * Cannot do statistics. Position ROI and try again!									
F1 Help	F2 Calibr	F3 InitChn	F4 ExpFit	F5 NextROI	F6 Stats	F7	F8	F9 Calc	F10 Main

Este menu é ativado quando o espectro ativo for do tipo MCS. As funções de análise são idênticas às do PULSAR, a saber:

- F2 - Calibr:** calibra o eixo horizontal em unidades de tempo, de acordo com o modo pelo qual o espectro foi obtido, ou retorna a número de canal.
- F3 - InitChn:** posiciona o cursor no canal inicial da tela.
- F4 - ExpFit:** ajusta uma exponencial aos dados experimentais e calcula a meia-vida, pelo método descrito no capítulo 4.
- F5 - NextROI:** posiciona o cursor no início da próxima ROI.
- F6 - Stats:** calcula estatísticas da ROI em que se encontra o cursor.

3. ANÁLISE DE ESPECTROS DE ALTURA DE PULSOS

Como o QUASAR foi desenvolvido para analisar espectros, foram introduzidos procedimentos específicos para esta tarefa. Podemos, por exemplo, realizar operações sobre os dados arquivados, tais como somar ou subtrair espectros, filtrar ruído e normalizar dados, para, entre outras coisas, subtrair o "background".

O programa incorpora um algoritmo rigoroso para analisar espectros de radiações gama, que foi utilizado durante vários anos no Instituto de Engenharia Nuclear, com resultados plenamente satisfatórios. Este algoritmo consiste da minimização do chi-quadrado (χ^2) utilizando-se uma fórmula analítica dependente de um certo número de parâmetros, para representar os picos do espectro. Os parâmetros são iterativamente variados até que se atinja um certo critério de convergência. Podemos analisar singletos e multipletos com até 7 componentes e, ao fim de cada minimização, as diferenças entre os dados experimentais e os resultados calculados são investigados quanto à existência de picos não identificados anteriormente. Esta análise é implementada em dois passos, o primeiro dos quais realiza uma calibração da forma dos picos do espectro, em função do número do canal, enquanto o segundo ajusta todos os picos seleccionados do espectro com suas formas predeterminadas por esta calibração.

Nas seções seguintes, apresentaremos os algoritmos utilizados no programa para amaciar espectros, localizar picos e analisar espectros pelo método do chi-quadrado.

3.1. Amaciamento de Espectros

O resultado de uma experiência utilizando um analisador multicanal, consiste de uma série de contagens em canais igualmente espaçados. Sendo tais contagens sujeitas a erros estatísticos, suas diferenças em canais sucessivos são, em geral, irregulares, sendo necessário muitas vezes torná-las regulares. O procedimento matemático que faz esta

obtemos uma fórmula geral para o amaciamento, dada por⁽²⁾

$$u'_0 = a_0 = t_n u_n + t_{n-1} u_{n-1} + \dots + t_{-n} u_{-n} \quad (3.10)$$

e na qual

$$t_r = 3 \frac{3n^2 + 3n - 1 - 5r^2}{(2n-1)(2n+1)(2n+3)} \quad (3.11)$$

Com estas fórmulas construímos a tabela seguinte, que apresenta na coluna 1 o valor de n , seguido por N , que é uma constante de normalização. Para obtermos o valor amaciado de u_0 devemos multiplicar cada contagem da primeira linha pelas constantes que correspondem a n em sua coluna, somar tudo e dividir por N .

Tabela 1. Coeficientes para amaciamento

n	N	u_0	$(u_1 + u_{-1})$	$(u_2 + u_{-2})$	$(u_3 + u_{-3})$	$(u_4 + u_{-4})$	$(u_5 + u_{-5})$
2	35	17	12	-3			
3	21	7	6	3	-2		
4	231	59	54	39	14	-21	
5	425	89	84	69	44	9	-36

3.2. Localização dos Picos

Um espectro de altura de pulsos é constituído por uma tabela de contagens sujeitas à estatística de Poisson, em canais igualmente espaçados que representam, em primeira aproximação, um "background" constante, sobre o qual se superpõem picos com a forma gaussiana. Baseados neste fato, especificamos um algoritmo que identifica e localiza os picos no espectro.

Este é um problema que tem sido bastante estudado e para o qual existem várias soluções propostas. Uma das mais conhecidas é aquela preconizada por Mariscotti⁽³⁾, que calcula uma segunda derivada generalizada, num intervalo de canais que são ponderados adequadamente. Outra solução é fazer um amaciamento ("smoothing") do espectro antes de derivá-lo, com a finalidade de filtrar os componentes de alta frequência, que

representam o ruído resultante das flutuações estatísticas. Uma terceira alternativa utiliza as propriedades das transformadas de Fourier para determinar os componentes de alta frequência e eliminá-los do espectro, por meio de filtros adequados.

Por mais elaborado que seja o algoritmo usado, sua meta é localizar os picos com o máximo de eficiência computacional e com uma boa discriminação do "background". No QUASAR, adotamos um método que, além de ser rápido e de fácil implementação, já foi utilizado, com resultados plenamente satisfatórios, no programa GAMALTA⁽⁹⁾.

Localizamos os picos mediante uma pseudo-derivada primeira do espectro, ponderada pela variância das contagens. Obtemos a derivada no canal k pela equação

$$\nu'_k = \frac{(\nu_{k+1} + \nu_{k+2}) - (\nu_{k-1} + \nu_{k-2})}{\nu_{k+1} + \nu_{k+2} + \nu_{k-1} + \nu_{k-2}}, \quad (3.12)$$

na qual ν_k denota a contagem no canal k . Como as contagens obedecem à estatística de Poisson, vemos que o denominador é a variância do numerador. Prosseguimos em canais crescentes até encontrar um máximo, e guardamos o seu valor e o do seu desvio padrão. Em seguida, procuramos um mínimo e igualmente guardamos o seu valor e o do seu desvio padrão. Para cada par de valores, máximo e mínimo, aplicamos o teste estatístico de Student, que compara duas médias para determinar se pertencem a uma mesma população. Se a diferença do máximo e do mínimo, dividida pela soma de seus desvios padrões, for um número maior do que o valor fixado para o teste, o programa delimitará e marcará, automaticamente, uma região de interesse, comumente denominada de ROI ("Region Of Interest"). Tal procedimento é indicativo de que o teste para a existência de um pico foi positivo, para o canal central dessa ROI.

Fixamos o valor deste teste em 5, no programa QUASAR, como um compromisso entre obter a localização do máximo de picos verdadeiros e incluir o mínimo de picos falsos, gerados pelo ruído estatístico. Como uma regra de bom senso, devemos

verificar, posteriormente, o resultado da identificação dos picos e eliminá-los ou acrescentá-los, conforme nosso próprio julgamento e necessidade, usando as funções adequadas do programa, descritas no capítulo 2.

3.3. Cálculo dos Parâmetros dos Picos

No caso de espectros simples, isto é, que contêm apenas singletos, podemos calcular rapidamente os parâmetros do pico, mediante uma integração numérica de cada pico com a função PkParms do menu AnalPHA.

Para cada ROI selecionada, esta função calcula o centroide do pico, sua largura total a meia altura ou FWHM ("Full Width at Half Maximum"), e as áreas total e líquida da ROI: a área líquida é igual à área total subtraída de um "background" linear. Além disto, são fornecidos o erro das áreas e, se o espectro estiver calibrado, o canal e a largura do pico em unidades de energia (keV).

Os resultados são obtidos por uma análise numérica da ROI, em que usamos as seguintes fórmulas:

a) Área total:

$$T = \sum \nu_k \quad (3.13)$$

b) Área líquida:

$$A = \sum (\nu_k - B(k)) \quad (3.14)$$

c) Erro das áreas:

$$E = \sqrt{\sum \nu_k} \quad (3.15)$$

d) Centrolde:

$$C = \frac{1}{A} \sum [(\nu_k - B(k)) \times k] \quad (3.16)$$

e) Largura a meia altura:

$$FWHM = \sqrt{B \cdot \ln 2} \times \sqrt{\frac{\sum [(\nu_k - B(k)) \cdot (k-C)^2]}{A}} \quad (3.17)$$

f) "Background":

$$B(k) = a + b \times k, \quad (3.18)$$

sendo a e b obtidos das médias dos três primeiros e dos três últimos canais da ROI.

Na equações acima, k representa o número do canal, ν_k é a sua contagem, e os somatórios incluem todos os canais que constituem a ROI.

Podemos imprimir os resultados dos cálculos na forma de uma tabela ou apenas mostrá-los, um a um, na tela do computador.

3.4. Minimização pelo χ^2

Se um espectro consistisse apenas de singletos superpostos a um fundo aproximadamente linear, as fórmulas já apresentadas na seção 3.3 seriam suficientes e adequadas para analisá-lo. De fato, em geral estamos apenas interessados na intensidade do pico (contagem líquida) e na sua posição exata, e talvez na sua largura total e meia altura.

Quando porém o espectro é complexo, com multipletos, esta análise simplificada não pode ser utilizada para calcularmos os parâmetros de cada um dos picos que compõe o multipletto. Torna-se indispensável neste caso, adotar modelos que permitam efetuar ajustes aos dados experimentais, pelo método de mínimos quadrados ponderado pelo erro experimental da medida. Na literatura^(5,6), este método é denominado de minimização do chi-quadrado (χ^2), uma vez que $\sigma_k^2 = \nu_k$ para a estatística de Poisson.

Sejam, então, dados n canais, cuja contagem e variância no canal k , são respectivamente ν_k e σ_k^2 , e seja $f_k(x_1, \dots, x_l)$ uma função de l parâmetros que é escolhida de forma a reproduzir os dados experimentais o melhor possível. Trata-se então de determinar os valores de x_l que minimizam a função F seguinte, chamada de χ^2

$$F(x_1, \dots, x_l) = \sum_{k=1}^n \left\{ \frac{u_k - f_k(x_1, \dots, x_l)}{\sigma_k} \right\}^2. \quad (3.19)$$

Da mesma forma que na seção 3.1, escrevemos a condição de mínimo

$$\frac{\partial F(x_1, \dots, x_l)}{\partial x_j} = -2 \sum_{k=1}^n \left\{ \frac{u_k - f_k(x_1, \dots, x_l)}{\sigma_k^2} \right\} \frac{\partial f_k}{\partial x_j} = 0 \quad (3.20)$$

que permite formar as equações normais que resolverão o problema se a função f_k for linear nos parâmetros.

Para um espectro de radiação gama, a função f_k não é linear. De fato, em primeira aproximação, podemos afirmar que um pico terá a forma de uma gaussiana e portanto as equações normais não podem ser resolvidas pelos métodos usuais. Entretanto, podemos utilizar o processo de linearização seguinte.

Suponhamos que $x_i = \underline{x}_i + \eta_i$, isto é, que \underline{x}_i seja uma primeira aproximação de x_i , obtida de qualquer maneira que seja conveniente, sendo η_i portanto o erro desta aproximação. Podemos então escrever

$$\begin{aligned} f_k(x_1, \dots, x_l) &= f_k(\underline{x}_1 + \eta_1, \dots, \underline{x}_l + \eta_l) \\ &\cong f_k(\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_l) + \frac{\partial f_k}{\partial \underline{x}_1} \eta_1 + \dots + \frac{\partial f_k}{\partial \underline{x}_l} \eta_l \end{aligned} \quad (3.21)$$

onde os valores das derivadas são calculados para $x_i = \underline{x}_i$.

Estas equações são agora lineares nos parâmetros η que podem ser portanto calculados da forma usual. Na prática, os valores de η assim determinados, não conduzem a um mínimo da função F , porém o processo pode ser iterativamente conduzido e, dependendo dos valores iniciais, converge rapidamente para um mínimo, e fornece também os erros destas determinações. O método é descrito detalhadamente no Apêndice A.

3.4.1. Determinação da Forma dos Picos

Vimos acima que, para usarmos o método do chi-quadrado, é necessário que haja uma fórmula analítica para representar os dados experimentais. Quando, além disto, o espectro contém multipletos, é necessária também a adoção de uma forma padrão para os picos de um mesmo multipletto, de maneira a podermos efetuar a sua decomposição em singletos.

Os picos correspondentes à absorção total da radiação, são, em geral, aproximadamente gaussianos, pois a isto conduz o processo estatístico decorrente da passagem da radiação pela matéria que constitui o detector. Entretanto, a prática demonstra que esta função não é a mais adequada para reproduzir os dados experimentais e em seu lugar são adotadas funções empiricamente determinadas.

O mesmo pode ser dito a respeito da radiação de fundo, sobre a qual os picos aparecem superpostos. Esta também recebe tratamento variado segundo funções que podem ser muito simples ou bastante complexas, mas de qualquer maneira sempre com o intuito de reproduzi-la o melhor possível.

No QUASAR, o fundo radioativo é representado por uma função linear e o pico por uma gaussiana modificada, na baixa energia, para uma exponencial.

Assim, sendo k o número do canal e u_k sua contagem experimental, aproximamos u_k pela função

$$f(x_1, \dots, x_6) = f_1(x_1, x_2) + f_2(x_3, x_4, x_5, x_6) \quad (3.22)$$

na qual

$$f_1(x_1, x_2) = x_1 + x_2 k \quad (3.23)$$

representa o fundo radioativo, e

$$f_2(x_3, \dots, x_6) = x_3 \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[\frac{k - x_4}{x_5} \right]^2 \right\}, \quad (3.24)$$

para $k \geq x_4 - x_6$, e

$$f_2(x_3, \dots, x_6) = x_3 \exp \left\{ x_6 \frac{2(k - x_4) + x_6}{2x_5^2} \right\}, \quad (3.25)$$

para $k < x_4 - x_6$,

é a função adotada para a forma dos picos.

Vemos que as contagens são representadas por uma função que depende de seis parâmetros, que são:

x_1 = fundo radioativo constante;

x_2 = taxa de crescimento do fundo com o canal;

x_3 = intensidade do pico;

x_4 = centroide do pico;

x_5 = desvio padrão da gaussiana; e

x_6 = canal abaixo do qual a forma é exponencial.

Conforme podemos deduzir de uma análise desta função, os parâmetros que determinam a forma de um pico são x_5 e x_6 . O parâmetro x_5 depende fundamentalmente da energia da radiação e, a rigor, deveria ser proporcional a $1/\sqrt{E}$, onde E é a energia, enquanto x_6 é um parâmetro instrumental que depende, entre outros fatores, da coleção de cargas no detector e das constantes de tempo da cadeia de amplificação.

Empiricamente, sabemos que a forma de um pico varia com a energia, ou seja, com o número do canal, e no QUASAR adotamos uma variação quadrática. Na prática, o usuário deve escolher pelo menos quatro picos isolados e com uma estatística adequada, para efetuar a calibração de forma. Isto é realizado mediante a opção PkShape (tecla F4) do menu Analyze, que coloca o programa no menu correspondente. Neste menu, NextRoi permite avançar imediatamente até o início de cada pico escolhido, PeakFit faz o ajuste e, após o ajuste do último pico escolhido, FitShap usa estes valores para ajustar x_5 e x_6 em função do número do canal. Assim, novamente utilizamos o método dos mínimos quadrados para se determinar a , b e c , de cada um desses parâmetros, pela expressão

$$f(a, b, c) = \sum_i \left\{ \frac{x_i - (a + b \cdot k_i + c \cdot k_i^2)}{\sigma_i} \right\}^2$$

na qual i representa o pico, x_i representa $(x_B)_i$ ou $(x_G)_i$, σ_i^2 sua variância, e k_i a posição do pico, valores estes obtidos por PeakFit.

3.4.2. Ajuste de Espectros

Após a determinação da forma dos picos, todos aqueles marcados como ROIs do espectro, são ajustados pelo método do χ^2 , utilizando-se para suas formas os valores obtidos acima. Ou seja, para cada região serão determinados apenas os parâmetros correspondentes a um fundo de radiação de variação linear e para cada pico da região a sua posição ou energia e sua intensidade.

O usuário poderá escolher entre uma impressão resumida dos resultados ou uma impressão detalhada, na qual um gráfico de baixa resolução sairá na impressora, permitindo-lhe avaliar a qualidade do resultado final.

4. ANÁLISE DE ESPECTROS DE MULTICONTADOR

Os espectros de tempo ou de multicontador ("multichannel scaling") têm como principal aplicação a determinação de meias-vidas de radioisótopos. Podemos também usá-los para determinar parâmetros estatísticos de contagens, tanto matematicamente como visualmente.

Nestes espectros, determinamos os valores da média e do desvio padrão ($\bar{\nu}$ e σ), para uma dada região de interesse (ROI), pelas fórmulas usuais

$$\bar{\nu} = \frac{1}{N} \sum \nu_k \quad \text{e} \quad \sigma^2 = \frac{1}{(N-1)} \sum (\nu_k - \bar{\nu})^2,$$

onde N representa o número de canais selecionado, e ν_k são as contagens em cada canal k .

Além disto, podemos ajustar uma curva composta de uma exponencial mais uma constante, representativa do "background", às contagens da região de interesse escolhida,

ou seja, determinamos os valores das constantes a , b e λ da equação

$$v(t) = a + b e^{-\lambda t} \quad (4.1)$$

que melhor se ajustam aos dados. Na realidade, o programa apenas mostra o valor da meia-vida, obtido pela expressão

$$T_{1/2} = \ln(2) / \lambda,$$

e o valor do coeficiente de correlação $r^2 \leq 1$, que determina quão bom foi o ajuste, na medida em que mais se aproxima da unidade.

O ajuste de uma soma de exponenciais a pontos dados é bastante sujeito a dificuldades, causadas por problemas numéricos⁽⁷⁾. Tais dificuldades, que afetam até mesmo pontos determinados analiticamente, cujos únicos erros advêm do "round-off", tornam-se particularmente graves para pontos experimentais. Foi por esta razão que nos limitamos a esta curva simples, no PULSAR, e destinamos ao QUASAR um tratamento mais elaborado para este problema. No presente programa, determinamos λ a partir da expressão

$$e^{-\lambda \Delta} = \frac{\sum' [(\nu_k - \nu_{k+\Delta})(\nu_{k+\Delta} - \nu_{k+2\Delta})]}{\sum' (\nu_k - \nu_{k+\Delta})^2}, \quad (4.2)$$

onde⁸

$$\Delta = \text{ent}[(\text{número de canais da ROI}) / 3]. \quad (4.3)$$

As somas Σ' vão de $k = k_1$, o primeiro canal da ROI, até $k = k_1 + \Delta - 1$, $k_1 + \Delta$ ou $k_1 + \Delta + 1$, dependendo do truncamento de Δ . Na Eq. (4.2), λ está em unidades de canal⁻¹, mas depois multiplicaremos $T_{1/2}$ pelo fator apropriado, para convertê-lo a uma unidade de tempo adequada à escala em que estivermos trabalhando.

Escolhemos esta expressão pela seguinte razão. Para pontos que seguem uma curva perfeitamente exponencial, dada pela Eq. (4.1) com t expresso em canais, temos

⁸ A função Entier, $\text{ent}(x)$, nos dá o maior inteiro não superior a x , sendo às vezes conhecida como $\text{int}(x)$.

$$\frac{\nu_{k+\Delta} - \nu_{k+2\Delta}}{\nu_k - \nu_{k+\Delta}} = e^{-\lambda\Delta}. \quad (4.4)$$

Como resultado das flutuações estatísticas, não podemos tomar $\Delta = 1$, ou outro valor baixo, pois a diferença de contagens de canais vizinhos provocaria erros insuportáveis na expressão acima para $e^{-\lambda\Delta}$, que nem uma média conseguiria minorar. Por esta razão seleccionamos o maior valor de Δ possível, com a condição de termos o máximo número de estimativas de $e^{-\lambda\Delta}$, o que resultou no valor de Δ dado pela Eq. (4.3).

Podemos escrever a Eq. (4.4) na forma

$$y_k = e^{-\lambda\Delta} x_k, \quad (4.5)$$

onde $x_k = \nu_k - \nu_{k+\Delta}$ e $y_k = \nu_{k+\Delta} - \nu_{k+2\Delta}$. A partir dos dados experimentais x_k e y_k , podemos calcular, pelo método dos mínimos quadrados, o valor de $e^{-\lambda\Delta}$ que melhor ajusta a Eq. (4.5). É deste ajuste que obtemos a Eq. (4.2).

A Eq. (4.5) também nos permite obter o coeficiente de correlação r^2 entre os pares x_k e y_k , dado pela expressão

$$r^2 = \frac{(N S_{xy} - S_x S_y)^2}{(N S_{xx} - S_x^2)(N S_{yy} - S_y^2)},$$

onde $N = (\text{número de canais da ROI}) - 2\Delta \approx \Delta$,

$$S_x = \sum' (\nu_k - \nu_{k+\Delta}), \quad S_y = \sum' (\nu_{k+\Delta} - \nu_{k+2\Delta}),$$

$$S_{xx} = \sum' (\nu_k - \nu_{k+\Delta})^2, \quad S_{yy} = \sum' (\nu_{k+\Delta} - \nu_{k+2\Delta})^2$$

e

$$S_{xy} = \sum' [(\nu_k - \nu_{k+\Delta})(\nu_{k+\Delta} - \nu_{k+2\Delta})].$$

Em termos destas somas, a Eq. (4.2) pode ser escrita na forma $e^{-\lambda\Delta} = S_{xy}/S_{xx}$.

Foram tentados outros tipos de ajuste, mas todos eles se revelaram muito sensíveis, até mesmo à mera variação da ROI escolhida, quando não produziam resultados completamente espúrios.

APÊNDICE

A. Mínimos Quadrados Não-Linear

O problema é minimizar a expressão

$$F(x_1, \dots, x_l) = \sum_k \left[\frac{u_k - f_k(x_1, \dots, x_l)}{\sigma_k} \right]^2 \quad (\text{A.1})$$

na qual f_k é linearizada por

$$f_k(x) \cong f_k(\underline{x}) + \sum [\partial f_k(x) / \partial x_i] \eta_i \quad (\text{A.2})$$

onde x e \underline{x} representam todos os l parâmetros, a derivada é calculada para $x_i = \underline{x}_i$, e $\eta = x - \underline{x}$. Substituindo na Eq. (A.1) teremos

$$F = \sum \left\{ \frac{u_k - f_k - \sum [\partial f_k / \partial x_i] \eta_i}{\sigma_k} \right\}^2 \quad (\text{A.3})$$

onde agora os parâmetros variáveis são os η_i .

Em seguida introduzimos as seguintes matrizes:

$$\epsilon = [\epsilon_i] = [u_i - f_i] \quad (\text{A.4})$$

$$A = [a_{ij}], \quad a_{ij} = \left. \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right|_{\underline{x}_j} \quad (\text{A.5})$$

$$\eta = [\eta_i] = [x_i - \underline{x}_i] \quad (\text{A.6})$$

$$S = [\sigma_i \sigma_j \delta_{ij}] = \text{diag}[\sigma_i^2] \quad (\text{A.7})$$

onde ϵ e η são vetores coluna, A é uma matriz retangular e S é a matriz (diagonal) das covariâncias. Com esta notação, a equação (A.3) pode ser escrita como

$$F = (\epsilon - A \eta)^T S^{-1} (\epsilon - A \eta) \quad (\text{A.8})$$

que é então, na forma matricial, a função a ser minimizada. Substituindo as Eq.(A.4) a (A.7) na Eq. (A.8) e efetuando as operações indicadas, obtemos

$$F = \epsilon^T S^{-1} \epsilon - 2 \eta^T A^T S^{-1} \epsilon + \eta^T A^T S^{-1} A \eta \quad (\text{A.9})$$

Definindo agora mais duas matrizes que facilitarão os

cálculos, quais sejam

$$A^T S^{-1} A = C \quad (A.10)$$

e

$$A^T S^{-1} c = v, \quad (A.11)$$

somando e subtraindo o produto $(v^T C^{-1} v)$ e substituindo na Eq. (A.9), obtemos

$$F = c^T S^{-1} c - v^T C^{-1} v + (\eta - C^{-1} v)^T C (\eta - C^{-1} v). \quad (A.12)$$

Vamos recapitular e analisar esta expressão. Queremos determinar η de forma que F seja mínimo: este é o problema original. Ora, os dois primeiros termos de (A.12), não dependem de η e portanto F será mínimo se o terceiro termo for nulo, pois trata-se de uma forma bilinear de termos positivos e, portanto, não pode ser negativo. Daí concluímos que

$$\eta - C^{-1} v = 0 \quad (A.13)$$

de onde podemos obter o valor desejado de η . De posse deste valor, calculamos uma nova aproximação $x_i = \underline{x}_i + \eta_i$, para cada parâmetro, substituímos nas fórmulas acima, e iteramos o processo até que o valor da função F atinja um mínimo, que na prática é um critério de convergência: a diferença entre dois valores consecutivos de F ser menor que um δ previamente fixado.

O método permite também que se obtenham os erros de cada parâmetro, da seguinte forma. Sendo $\langle x \rangle$ o valor médio da variável randômica x , por definição, a matriz das covariâncias é dada por

$$(x - \langle x \rangle) \cdot (x - \langle x \rangle)^T = [\sigma_{ij}] = \eta \eta^T. \quad (A.14)$$

Das Eqs. (A.13), (A.10) e (A.11), podemos escrever então que

$$\eta \eta^T = (A^T S^{-1} A)^{-1} A^T S^{-1} c c^T (S^{-1})^T A ((A^T S^{-1} A)^{-1})^T. \quad (A.15)$$

Com c dado pela Eq. (A.4), podemos ver que $c c^T$ é a matriz das variâncias, que é a mesma que S , segundo a Eq. (A.7). Como S é diagonal, sua inversa também o será e na Eq. (A.15) podemos substituir $c c^T (S^{-1})^T = S S^{-1} = 1$, obtendo então

$$\eta\eta^T = (A^T S^{-1} A)^{-1} (A^T S^{-1} A) (A^T S^{-1} A)^{-1} \quad (\text{A.16})$$

ou, finalmente,

$$\eta\eta^T = (A^T S^{-1} A)^{-1} = C^{-1} = \sigma^2 \quad (\text{A.17})$$

que é, portanto, a matriz das covariâncias. Onde, seus elementos diagonais serão as variâncias dos parâmetros calculados e os erros são dados por

$$\sigma_{ii} = \sqrt{(c_{ii})^2} . \quad (\text{A.18})$$

REFERÊNCIAS

- (1) J.A.W. da Nóbrega e L.T. Auler, "PULSAR - um Software Interativo para Aquisição e Análise de Espectros em Computadores Pessoais", Instituto de Engenharia Nuclear, IEN-21 (1990).
- (2) E. Whittaker e G. Robinson, *The Calculus of Observations*, 4th Ed., Dover, New York (1967).
- (3) M. A. Mariscotti, "A Method for Automatic Identification of Peaks in the Presence of Background and its Application to Spectrum Analysis", *Nucl. Instr. and Meth.*, 50, 307 (1967).
- (4) J. T. Auler, "GAMALTA, um Programa para Análise Automática de Espectros Gama", Instituto de Engenharia Nuclear, Nota Técnica DEAT/DF/SFN-2/77 (1977).
- (5) W. T. Eadie, D. Drijard, F. E. James, M. Roos, and B. Sadoulet, *Statistical Methods in Experimental Physics*, North-Holland, Amsterdam & London (1971).
- (6) S. Brandt, *Statistical and Computational Methods in Data Analysis*, North-Holland, Amsterdam & London (1970).
- (7) C. D. Gardner, "EXPALS - FORTRAN Code for Exponential Approximation by Least Squares", Lawrence Livermore Laboratory, UCRL-14541 (Rev.2), August 1, 1978.