



**AUTARQUIA ASSOCIADA À UNIVERSIDADE
DE SÃO PAULO**

**ESTUDO DE PROGRAMAS DE COMPUTAÇÃO PARA A
ANÁLISE DE ESPECTROS DE RAIOS GAMA.
APLICAÇÃO À ANÁLISE POR ATIVAÇÃO DE
AMOSTRAS GEOLÓGICAS**

LUIZ ROBERTO NOGUEIRA DA SILVA

**Dissertação apresentada como parte
dos requisitos para obtenção do Grau
de Mestre em Ciências na Área de
Tecnologia Nuclear - Aplicações.**

**Orientadora:
Dra. Ana Maria Graciano Figueiredo**

**São Paulo
1998**

INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES
Autarquia associada à Universidade de São Paulo

**ESTUDO DE PROGRAMAS DE COMPUTAÇÃO PARA A
ANÁLISE DE ESPECTROS DE RAIOS GAMA. APLICAÇÃO À
ANÁLISE POR ATIVAÇÃO DE AMOSTRAS GEOLÓGICAS**

LUIZ ROBERTO NOGUEIRA DA SILVA

Dissertação apresentada como parte dos
requisitos para obtenção do grau de
Mestre em Ciências na Área de
Tecnologia Nuclear.

Orientador: Dra. Ana Maria Graciano Figueiredo

SÃO PAULO

1998



À Regina Helena,
pelo apoio e companheirismo

Dedico

ESTUDO DE PROGRAMAS DE COMPUTAÇÃO PARA A ANÁLISE
DE ESPECTROS DE RAIOS GAMA. APLICAÇÃO À ANÁLISE POR
ATIVAÇÃO DE AMOSTRAS GEOLÓGICAS.

Luiz Roberto Nogueira da Silva

AGRADECIMENTOS

Diversas pessoas, de forma direta ou indireta, contribuíram para a realização deste trabalho e a todas elas quero expressar meu reconhecimento e minha gratidão. Agradeço em especial,

À Dra. Ana Maria Graciano Figueiredo pela orientação, amizade e paciência demonstradas no decorrer destes anos de trabalho,

Aos meus familiares, Wilson, Maria José, Ricardo e Dulce,

Aos pesquisadores da Supervisão de Radioquímica Dra. Mitiko Saiki, Dra. Maria José A. Armelin, Dra. Vera A. Maihara, Mst. Rosemeire P. Paiva, Dra. Deborah I. T. Fávoro, Dr. Casemiro Munita, e Dra. Ieda I. L. Cunha, pela amizade no convívio diário,

Aos meus meus amigos Rubens C. L. Figueira, Cristina Gonçalves, Sandra Mateus e Fabio Pellegatti, pela amizade e apoio de sempre,

Aos amigos Mario Olimpio de Menezes e Renato Semmler, integrantes da Supervisão de Física Nuclear,

A Dra. Marina B. A. Vasconcellos, Chefe da Supervisão de Radioquímica, pela oportunidade concedida para a realização do trabalho,

Ao pessoal da Cibié do Brasil Ltda: Engs. Jean Paul Drouet, Paulo Kawassaki e Rene Ruocco pela compreensão e dispensa e ao Mst. Carlos K. Takata pelo apoio,

Ao Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, IPEN/CNEN, pelas condições e apoio para a realização e conclusão deste trabalho,

Ao CNPq pelo auxílio financeiro na concessão de uma bolsa de mestrado.

ESTUDO DE PROGRAMAS DE COMPUTAÇÃO PARA A ANÁLISE DE ESPECTROS DE RAIOS GAMA. APLICAÇÃO À ANÁLISE POR ATIVAÇÃO DE AMOSTRAS GEOLÓGICAS.

Luiz Roberto Nogueira da Silva

RESUMO

Neste trabalho, apresenta-se uma avaliação do programa de análise de espectros de raios gama VISPECT, em relação a dois programas comerciais, o OMNIGAM da EG&G Ortec, e o SAMPO 90, da Canberra. Com esse objetivo, foram criados espectros artificiais de raios gama, que apresentam picos de diferentes tamanhos, em quatro regiões diferentes do espectro, além de dupletos com várias distâncias entre as centróides e dupletos formados por picos de diferentes intensidades. Pelos resultados obtidos, pode-se dizer que o programa VISPECT apresentou bom desempenho na detecção e análise de picos e multipletos de intensidades variadas no espectro gama. Para uma comparação dos programas na análise por ativação com nêutrons de amostras reais, foram analisados o material geológico de referência GS-N (IWG-GIT) e o granito G-94, utilizado em um teste de proficiência para laboratórios de geoquímica analítica. Os resultados obtidos utilizando-se o programa VISPECT foram tão bons ou melhores que os obtidos pelos outros programas.

STUDY OF GAMMA RAY ANALYSIS SOFTWARES. APPLICATION TO ACTIVATION ANALYSIS OF GEOLOGICAL SAMPLES.

Luiz Roberto Nogueira da Silva

ABSTRACT

A comparative evaluation of the gamma-ray analysis software VISPECT, in relation to two commercial gamma-ray analysis software packages, OMNIGAM (EG&G Ortec) and SAMPO 90 (Canberra) was performed. For this evaluation, artificial gamma-ray spectra were created, presenting peaks of different intensities and located at four different regions of the spectrum. Multiplet peaks with equal and different intensities, but with different channel separations, were also created. The results obtained showed a good performance of VISPECT in detecting and analysing single and multiplet peaks of different intensities in the gamma-ray spectrum. Neutron activation analysis of the geological reference material GS-N (IWG-GIT) and of the granite G-94, used in a Proficiency Testing Trial of Analytical Geochemistry Laboratories, was also performed, in order to evaluate the VISEPCT software in the analysis of real samples. The results obtained by using VISPECT were as good or better than the ones obtained using the other programs.

ÍNDICE

	Página
CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO.....	01
CAPÍTULO 2 – REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	07
CAPÍTULO 3 - OS PROGRAMAS.....	14
3.1. O VISPECT.....	16
3.2. O SAMPO 90.....	26
3.3. O OMNIGAM.....	28
CAPÍTULO 4 - PARTE EXPERIMENTAL.....	32
4.1. O espectro de fundo ou BG.....	34
4.2. A calibração.....	34
4.3. Espectros artificiais.....	36
4.4. Amostras reais.....	43
CAPÍTULO 5 - RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	47
5.1. Dupletos.....	54
5.2. Amostras geológicas.....	72
CAPÍTULO 6 - CONCLUSÕES.....	77
CAPÍTULO 7- REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	79
ANEXO.....	85

LISTA DE FIGURAS

	Página
FIGURA 1 - Tela do programa VISPECT já com o espectro calibrado.....	18
FIGURA 2 - Forma do sinal de procura.....	20
FIGURA 3 - Forma do pico de 661,6 keV do Cs-137 e a curva de correlação produzida por ele.....	25
FIGURA 4 - Curva de correlação produzida quando o sinal de procura passa sobre o pico de 661,6 keV do Cs-137.....	25
FIGURA 5 - Espectro do BG do sistema detector descrito anteriormente, obtido após 12hs.....	36
FIGURA 6 - Diagramas normalizados das concentrações obtidas pelo programa VISPECT em relação ao valor certificado para o padrão GS-N.....	73
FIGURA 7- Diagramas normalizados das concentrações obtidas pelo programa OMNIGAM em relação ao valor certificado para o padrão GS-N.....	73
FIGURA 8 - Diagramas normalizados das concentrações obtidas pelo programa SAMPO 90 em relação ao valor certificado para o padrão GS-N.....	74
FIGURA 9 - Diagramas normalizados das concentrações do G-94 obtidas pelo programa VISPECT em relação ao valor certificado.....	75
FIGURA 10 - Diagramas normalizados das concentrações do G-94 obtidas pelo programa OMNIGAM em relação ao valor certificado.....	76
FIGURA 11 - Diagramas normalizados das concentrações do G-94 obtidas pelo programa SAMPO 90 em relação ao valor certificado.....	76

LISTA DE TABELAS

	Página
TABELA I - Comparação das características dos programas.....	31
TABELA II - Radionuclídeos utilizados na obtenção do espectro de calibração e as energias utilizadas para a calibração	35
TABELA III - Largura máxima a meia altura (FWHM) obtidos para os quatro gamas de interesse na calibração em resolução	36
TABELA IV - Resultado da análise do BG feita pelo programa OMNIGAM utilizando uma biblioteca com os radioisótopos da Tabela II	38
TABELA V - Áreas e respectivos desvios das 4 regiões onde os picos foram adicionados.....	39
TABELA VI - Elementos analisados e suas principais características nucleares.....	45
TABELA VII - Limites de detecção para análise por ativação instrumental de rochas (ppm).....	46
TABELA VIII - Resultados da análise dos espectros de picos simples obtidos pelo programa VISPECT	49
TABELA IX - Resultados da análise dos espectros de picos simples obtidos pelo programa OMNIGAM	50
TABELA X - Resultados da análise dos espectros de picos simples obtidos pelo programa SAMPO 90.....	52
TABELA XI - Dupletos com crescente separação entre as centróides, analisados pelo programa VISPECT	55
TABELA XII - Dupletos com crescente separação entre as centróides, analisados pelo programa OMNIGAM	56
TABELA XIII - Dupletos com crescente separação entre as centróides, analisados pelo programa SAMPO 90	57
TABELA XIV - Dupletos com o pico menos intenso localizado do lado de menor energia, analisados pelo programa VISPECT	59
TABELA XV - Dupletos com o pico menos intenso localizado do lado de menor energia, analisados pelo programa VISPECT	60

TABELA XVI - Dupletos com o pico menos intenso localizado do lado de menor energia, analisados pelo programa OMNIGAM.....	61
TABELA XVII - Dupletos com o pico menos intenso localizado do lado de menor energia, analisado pelo programa OMNIGAM.....	62
TABELA XVIII - Dupletos com o pico menos intenso localizado do lado de menor energia, analisados pelo programa SAMPO 90.....	63
TABELA XIX - Dupletos com o pico menos intenso localizado do lado de menor energia, analisados pelo programa SAMPO 90.....	64
TABELA XX - Dupletos com o pico menos intenso localizado do lado de maior energia, analisados pelo programa VISPECT.....	66
TABELA XXI - Dupletos com o pico menos intenso localizado do lado de maior energia, analisados pelo programa VISPECT.....	67
TABELA XXII - Dupletos com o pico menos intenso localizado do lado de maior energia, analisados pelo programa OMNIGAM.....	68
TABELA XXIII - Dupletos com o pico menos intenso localizado do lado de maior energia, analisados pelo programa OMNIGAM.....	69
TABELA XXIV - Dupletos com o pico menos intenso localizado do lado de maior energia, analisados pelo programa SAMPO 90.....	70
TABELA XXV - Dupletos com o pico menos intenso localizado do lado de maior energia, analisados pelo programa SAMPO 90.....	71

CAPÍTULO 1. INTRODUÇÃO

A espectrometria de raios gama de alta resolução que utiliza detectores de Ge hiperpuro expandiu-se significativamente nos últimos trinta anos. Foi acompanhada pelo surgimento dos microcomputadores e do desenvolvimento da microeletrônica, que tornaram possíveis sistemas de detecção cada vez menores, mais práticos e baratos, com capacidade para tratar uma grande quantidade de dados. Desta forma, sua utilização, que era restrita a físicos nucleares, radioquímicos e radiobiólogos em pesquisa, tornou-se uma ferramenta radioanalítica importante não só na área nuclear, mas também nas áreas ambiental, médica e de ciências dos materiais.

A espectrometria de raios gama de alta resolução baseia-se na detecção de raios gama por cristais semicondutores de Ge(Li) ou de Ge hiperpuro, através dos modos pelos quais a radiação gama (radiação eletromagnética) interage com a matéria, gerando impulsos elétricos proporcionais à energia da radiação incidente.

Alguns dos modos de interação entre a radiação gama e a matéria, são o efeito fotoelétrico, o efeito Compton e a produção de pares.

Como o cristal detector consegue discriminar a energia da radiação gama que interage com ele com uma alta resolução, basta amplificar e coletar essas

informações para produzir-se um espectro das radiações gama que um determinado radioisótopo emite.

Conhecendo-se a energia que os radioisótopos emitem, é possível realizar uma detecção seletiva dos radionuclídeos presentes na amostra, enquanto que, com a atividade é possível calcular a concentração do elemento na mesma.

Nestas tarefas, a utilização do computador é muito vantajosa para o analista. A manipulação dos dados pelo computador ocorre em duas fases: (1) aquisição dos dados, e (2) obtenção dos resultados.

A obtenção dos resultados representa a identificação dos picos, através da determinação da energia do raio gama detectado e a avaliação da taxa de contagem (ou área do pico). Nesta tarefa, são utilizados programas de computador específicos, os quais são chamados de programas de análise de espectros de raios gama.

Esses programas são necessários nas monitorações de baixos níveis de atividade, estudos ambientais, na análise por ativação neutrônica, e em um grande número de aplicações médicas. Portanto, é de interesse geral conseguir informações precisas e específicas da situação e desempenho dos programas de análise de espectros de raios gama.

Além disso, os programas comerciais são caros e seria uma ajuda potencial para os interessados em comprar tais programas se informações confiáveis estivessem disponíveis. Nesse sentido, o estudo e a comparação de programas de análise de espectros pode revelar o atual interesse no campo de estudos das aplicações nucleares e estimular futuros desenvolvimentos (DOLNICAR, 1991).

A Supervisão de Radioquímica do Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (IPEN), tem utilizado para a análise de espectros o programa VISPECT, desenvolvido na linguagem TURBO BASIC, pelo Dr. Denis Piccot, do Laboratório

Pierre Sue, do Centro de Estudos Nucleares de Saclay, em uma visita científica realizada ao IPEN, em 1989.

O programa VISPECT foi criado para atender às necessidades específicas desse laboratório, cuja principal linha de trabalho é a análise por ativação com nêutrons (NAA), com ênfase na análise instrumental por ativação com nêutrons (INAA).

A NAA é um método analítico que consiste em submeter a amostra a um fluxo de nêutrons, normalmente térmicos, provenientes de um reator nuclear. Os elementos constituintes da amostra interagem com esses nêutrons, por meio de reações nucleares, podendo formar nuclídeos radioativos. Em NAA, a reação de maior interesse é a captura radioativa (n, gama).

Quando um nêutron interage com um núcleo alvo por meio de uma colisão inelástica, forma-se um núcleo composto em um estado altamente excitado. Na maioria das vezes, o núcleo formado é radioativo e irá decair emitindo partícula β^- e raios gama. O método de análise por ativação com nêutrons consiste na medida desses raios gama característicos para identificação dos elementos e determinação dos seus teores. Cerca de 70% dos elementos da tabela periódica possuem nuclídeos com propriedades favoráveis para análise por ativação com nêutrons.

Na NAA, uma das possibilidades para a determinação do teor dos elementos é a utilização do chamado método comparativo, que consiste na irradiação simultânea de amostra(s) e padrão(ões). Desse modo, elimina-se o problema das variações no fluxo de nêutrons, que podem ocorrer devido a oscilação na potência do reator, ao grau de queima do elemento combustível e a posição de irradiação (BODE *et al.*, 1990).

Medem-se a seguir as atividades induzidas no(s) nuclídeo(s) do elemento de interesse na amostra e no padrão. Devem-se assegurar as mesmas condições de detecção para amostra e padrões, evitando-se erros causados por geometrias diferentes.

A atividade induzida, ou o número de desintegrações registradas por um sistema de detecção, para uma energia particular, é diretamente proporcional à quantidade do nuclídeo alvo existente na amostra.

Desse modo, a concentração de um elemento pode ser obtida pelo cálculo da área do pico associado ao radionuclídeo formado na ativação da amostra e do padrão.

Na Supervisão de Radioquímica do IPEN uma das principais linhas de trabalho é na área de geoquímica de rochas. O conhecimento do teor de elementos terras raras (ETR) e outros elementos traço, também considerados imóveis em processos de alteração geoquímica, como Hf, Rb e Ta, pode fornecer informações sobre a origem e formação de rochas em estudos petrogenéticos (HANSON, 1978).

A técnica de análise por ativação instrumental permite determinar esses elementos, ao nível de traços, com boa precisão e exatidão na maior parte das rochas, porque esses elementos possuem nuclídeos com características nucleares altamente favoráveis para a ativação com nêutrons (HOFFMAN, 1992).

A Supervisão de Radioquímica vem realizando, há vários anos, a análise de ETR e outros traços em vários tipos de rochas e minerais, em colaboração com pesquisadores da área de Geociências da USP, UNICAMP, UnB, UNESP e UFRGS.

Os espectros de raios gama gerados por ativação com nêutrons em material geológico são geralmente bastante complexos, devido à grande quantidade de elementos presentes neste tipo de matriz e os resultados obtidos pelo programa VISPECT na detecção de picos e cálculos de áreas para este tipo de matriz têm-se mostrado muito satisfatórios durante estes anos.

Entretanto, o programa VISPECT nunca foi estudado em maior profundidade. Seu autor, Dr. Denis Piccot, até o momento, não fez nenhuma publicação sobre o programa, permanecendo seu conhecimento restrito a este laboratório.

Sua grande utilização por este laboratório se deve ao seu fácil emprego e aos resultados obtidos principalmente em intercomparações internacionais, testes de proficiência e nas análises frequentes de materiais de referência, fornecendo sempre bons resultados.

O crescimento do laboratório, devido ao aumento do número de sistemas detectores e, conseqüentemente, do número de amostras analisadas, provocou uma maior utilização do VISPECT, o que levou seus usuários a perceberem a necessidade de compreender e descrever melhor seu funcionamento, além de compará-lo a programas comerciais conhecidos.

Nesse sentido, SANDERSON (1988) e DECKER e SANDERSON (1992) fizeram a comparação de vários programas comerciais de análise de espectros, mostrando as diferenças entre eles. ALEKLETT *et al.* (1995) usaram da comparação entre o programa desenvolvido por eles e um programa comercial, conhecido e muito utilizado, como forma de avaliar as qualidades e limitações de seu programa.

DECKER e SANDERSON (1992), discutem também que não há um modo ideal de se gerar espectros de raios gama para avaliação de programas. A natureza estatística da localização dos picos, a forma, a área e o BG deveriam ser levados em consideração. Uma opção, então, é testar o programa na análise de espectros de fontes radioativas para mostrar as qualidades do programa numa situação real de análise, como fizeram ROUTTI e PRUSSIN (1969).

A Supervisão de Radioquímica possui o programa OMNIGAM (EG&G Ortec) há alguns anos e, no segundo semestre de 1994, através de um convênio com a UNICAMP, a Supervisão recebeu um sistema de detecção completo da Canberra e junto com este, o programa de análise de espectros SAMPO 90. Com isso, surgiu a oportunidade de se comparar os três programas.

Desse modo, é objetivo do presente trabalho, estudar os programas de análise de espectros OMNIGAM, SAMPO 90 e VISPECT comparando-os e avaliando seus desempenhos na análise de espectros artificiais criados especialmente para isso.

Na elaboração desses espectros artificiais, picos com áreas previamente escolhidas foram acrescentados a um espectro de radiação de fundo de um sistema de espectrometria gama.

Os picos foram criados com a ajuda do programa SIMSPEC, que elabora gaussianas com base na área do pico e na sua largura máxima a meia altura (FWHM). O programa também realiza a adição dos picos a um espectro selecionado, permitindo que a centróide do pico coincida com uma determinada energia no espectro (BERNASCONI, 1995).

Dessa forma, foram criados espectros de picos simples com áreas que variaram dentro de uma faixa de valores. Isso foi feito para quatro energias diferentes, de modo a abranger a faixa que vai de 50 até 2000 keV do espectro de raios gama. Os programas também foram testados na análise de dupletos, onde variou-se o número de canais que separam os picos que formam o duplete. O teste se estendeu também para dupletos formados por picos de intensidades diferentes, tanto com o pico menos intenso do lado de maior energia, como com o pico menos intenso do lado de menor energia.

A análise do material geológico de referência GS-N (IWG - GIT), que possui valores certificados para os elementos terras raras e outros elementos traço, também foi utilizado na comparação, com o objetivo de se verificar a exatidão dos resultados obtidos para a concentração dos elementos analisados, utilizando-se os três programas estudados. Do mesmo modo, foi analisada a amostra de granito G-94, utilizada em teste de proficiência, do qual a Supervisão de Radioquímica participou.

CAPÍTULO 2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Testes de verificação dos programas de computador para avaliação de área de fotopicos foram iniciados em 1977 pela Agência Internacional de Energia Atômica (IAEA), através de uma série de espectros de referência que possuíam picos com áreas conhecidas. Tanto a precisão como a exatidão de diversos programas foram estudados por HEYDORN e CHRISTENSEN (1988). Estes autores fazem uma análise de quatro programas existentes, sendo três deles comerciais, e concluem que, usados dentro de certos limites, os quatro programas são eficientes para a análise de espectros de raios gama, sendo capazes de resolver esses espectros, localizando os picos e calculando suas áreas. Nessa época, a informática que conhecemos hoje estava no início de sua popularização. Os computadores pessoais (PC) estavam ganhando espaço nos laboratórios de análise e este estudo comparativo trazia a versão para PC do programa da EG&G Ortec, na época o GELIGAM e do MicroSAMPO, que era a última versão da família de programas SAMPO, além do programa da Nuclear Data chamado PEAK SEARCH.

Atualmente a maioria dos laboratórios envolvidos em medidas de radiação usam computadores pessoais e programas comerciais para a análise de espectros gama.

Dentre os programas comerciais existentes, um que merece destaque é o SAMPO. A família SAMPO de programas de análise de espectros gama foi desenvolvida na Universidade de Tecnologia de Helsinque e teve como origem o programa de Routti no Laboratório de Radiação Lawrence na Universidade da Califórnia, em 1969 (ROUTTI e PRUSSIN, 1969; KOSKELO *et al.*, 1981).

O SAMPO original tinha algoritmos que faziam a procura e o ajuste de picos, como também a calibração da forma, energia e eficiência, e funcionava em computadores de grande porte (KOSKELO *et al.*, 1981).

Sua primeira grande modificação ocorreu em 1976 com o SAMPO 76 em colaboração com o Grupo de Proteção a Radiação da Organização Europeia para Pesquisa Nuclear, CERN. O método de análise empregado nessa versão foi simplificado e alguns aspectos foram adicionados. Entre eles, um sistema gerenciador de arquivos para tratar uma grande quantidade de dados e dois algoritmos de identificação (KOSKELO *et al.*, 1981).

O programa SAMPO 80 era uma versão para minicomputadores que trazia um novo algoritmo de procura de picos, assim como de ajuste, que deixava de utilizar o método de mínimos quadrados não-linear e passava a usar um método linear. A identificação de núclídeos, completamente nova, estava baseada em um método de linhas associadas, e se mostrou confiável (KOSKELO *et al.*, 1981).

Em 1982, começou o desenvolvimento do MicroSAMPO, uma versão revisada e adaptada para computadores pessoais. Durante toda a década de 80, versões melhoradas foram lançadas com sucesso (AARNIO *et al.*, 1992b), mas, basicamente, esses programas fazem a procura e o ajuste dos picos, a identificação de núclídeos e o cálculo de atividades. O uso de funções calibradas da forma do pico para a determinação das áreas, tornou possível a solução de multipletos complexos com grande sobreposição de picos (AARNIO *et al.*, 1988).

O SAMPO 90 surge em 1990, permitindo que todas as fases da análise fossem feitas de forma interativa ou fossem previamente programadas. Possibilita a análise de multipletos complexos com até 32 componentes, usando ajustes lineares, não-lineares e mistos. A identificação de nuclídeos é feita usando linhas associadas e permite correção na interferência para picos sobrepostos. Pode fazer também a subtração da radiação de fundo e calcular a atividade mínima detectável (AARNIO *et al.*, 1992b).

Acompanhando a evolução dos sistemas operacionais e ambientes de trabalho mais amigáveis, foi lançado o SAMPO "for Windows". Nesta versão, o SAMPO faz a análise por ativação neutrônica pelo método comparativo. Os espectros dos padrões e as amostras são analisados para obter-se as áreas dos picos que podem ter seus valores corrigidos devido ao decaimento (AARNIO *et al.*, 1995a).

Completando o programa SAMPO, o grupo de Helsinki lançou um sistema especialista para identificação de nuclídeos e interpretação de espectros gama, chamado SHAMAN. Esse programa realiza a identificação qualitativa dos nuclídeos e a determinação da atividade com um mínimo de intervenção do analista. Para isso, o sistema usa uma base de dados contendo mais de 2000 radionuclídeos com aproximadamente 48000 transições gama. Entretanto, os espectros devem ser pré-analisados por um outro programa, porque as informações sobre a energia e intensidade dos picos, assim como a radiação de fundo (BG) associada, devem estar disponíveis, bem como os respectivos erros estimados (AARNIO *et al.*, 1992a).

Quando do lançamento deste programa, ele estava disponível apenas para o ambiente UNIX implementado em estações de trabalho. Atualmente ele também funciona em PC's. Além disso, ele teve sua biblioteca de raios gama ampliada, chegando a mais de 2600 nuclídeos e 80000 linhas, com aproximadamente cinquenta critérios para identificação, incluindo: energia, intensidade relativa, meias-vidas e relações dos nuclídeos pai-filho, entre outros (AARNIO *et al.*, 1995b).

Os programas do grupo de Helsinki são comercializados há muitos anos pela empresa Canberra que, além desses programas, possui outros produtos desenvolvidos nos seus próprios laboratórios, como o CANBERRA SPECTRAN e o CANBERRA APOGEE (MERCIER e KOSKELO, 1992).

A Nuclear Data é outra empresa que desenvolve, há algum tempo, programas de análise, como o PEAK SEARCH, que se tornou o STANDARD PEAK SEARCH e o HYPERMET, que foi originalmente desenvolvido no Laboratório de Pesquisa Naval, em Washington nos Estados Unidos, por PHILLIPS e MARLOW (1976).

Em 1995, a Canberra e a Nuclear Data anunciaram um novo programa de análise, o GENIE-PC, que se mostrou tão bom ou melhor que seus programas anteriores, com respeito à identificação de dupletos (KOSKELO e MERCIER, 1995).

Outra empresa conhecida no fornecimento de detectores é a EG&G Ortec que, como a Canberra, também desenvolve e comercializa programas de análise junto com seus equipamentos de medida.

Os programas que a EG&G Ortec fabrica também foram evoluindo com o passar do tempo. O GELIGAM (EG&G Ortec, 1988) teve várias versões e posteriormente foi substituído pelo OMNIGAM (EG&G Ortec, 1990), o qual por sua vez também possui várias versões.

Paralelamente a isso, a adoção dos microcomputadores no meio acadêmico também exigiu a adaptação dos programas de análise de espectros a essa nova realidade. Alguns exemplos são o GAMANAL-PC, que foi desenvolvido a partir de uma versão condensada e modificada do programa original de Gunnink e Niday, na qual as rotinas de identificação de isótopos e as bibliotecas de radionuclídeos presentes no original foram omitidas (HEIMLICH *et al.*, 1989). O RAYGUN, que foi convertido para o ambiente PC por HENSLEY *et al.* (1988) e o TEABAGS que foi escrito por

LINDSTROM e KOROTEV (1982), num formato modular, podendo ser adaptado para microcomputadores.

Uma tendência observada nesta última década, é o fato de cada laboratório desenvolver programas ou adaptar programas já existentes às suas próprias necessidades, considerando os equipamentos de medida disponíveis e o tipo de análise realizada.

Como exemplo desta tendência, podemos citar o CINA, um programa para PC que foi desenvolvido por NELSON (1987), na Universidade do Arizona nos Estados Unidos, com finalidades de ensino e pesquisa, e que faz a procura de picos, os cálculos das áreas e a determinação da concentração dos elementos usando um método comparativo.

KIM *et al.* (1988) desenvolveram o programa PIAD que utiliza novos critérios para auxiliar a correta identificação dos radionuclídeos feita pelo método das linhas associadas, utilizado no SAMPO 80, embora o método de cálculo da atividade seja similar.

Outro exemplo é o programa NADA, desenvolvido por LANDSBERGER *et al.* (1992), que possui como principais características a identificação dos radionuclídeos e o uso de uma integração semi-automática, ou a utilização da rotina de ajuste de pico do programa SAMPO. Esse programa foi posteriormente melhorado e passou a chamar-se NADA92, contando com rotinas que levam em consideração interferências espectrais e nucleares, variações de fluxo e perdas provocadas pelo tempo morto (LANDSBERGER *et al.*, 1994).

Na linha dos programas criados para o tratamento de dados provenientes de um tipo característico de amostra ou de problema, surgiram: o ESPEC criado por BAEZA *et al.* (1992), voltado para a análise de espectros de amostras ambientais e o DECHAOS, que foi desenvolvido devido à necessidade de analisar-se espectros com

baixas taxas de contagens provenientes de experimentos de colisões entre núcleos (ALEKLETT *et. al.*, 1995).

No ASPRO-NUC, o objetivo foi criar um programa de análise de rotina completamente automático, executando desde o processamento dos espectros, até a identificação dos isótopos e a análise por ativação comparativa, além de ter uma vasta base de dados nucleares (KOLOTOV e ATRASHKEVICH, 1995).

MAJORAS *et al.* (1995) propõem uma ferramenta de análise onde o analista pode escolher, entre diversos modelos de formas de pico, o que se ajusta melhor ao seu trabalho, permitindo também uma fácil adaptação dessa ferramenta a outros métodos analíticos que necessitem de um ajuste mais complexo.

No Brasil, os programas de análise de espectros surgiram lenta e isoladamente nos laboratórios que notaram essa necessidade. Um dos motivos que ocasionou isso foi o fato de os equipamentos de detecção serem muito específicos, assim como os computadores não possuírem um padrão. Com isso, os pesquisadores tinham que fazer adaptações nos programas para estes funcionarem em seus equipamentos.

LIMA e ATALLA (1974) desenvolveram um programa na linguagem INSTRUMENT BASIC, que era a linguagem de programação BASIC usada nos minicomputadores da Hewlett-Packard. Esse programa localizava os picos, determinava a energia e a área dos picos, além dos desvios padrões das áreas.

ROCCA (1978) apresenta um programa de análise para calculadora programável. Essa solução era conveniente para laboratórios que não processavam uma quantidade excessivamente grande de amostras por dia. Era um programa de simples operação e fornecia respostas rápidas.

Na última década surgiram programas mais complexos. NASCIMENTO FILHO *et al.* (1988) elaboraram um programa em linguagem BASIC para

localização de picos, cálculo de centróide, energia, área líquida do fotopico pelo método de área total, desvio padrão e desvio padrão relativo.

VANIN (1988), desenvolveu o PANORAMIX para auxiliar os cálculos dos experimentos realizados no Laboratório do Acelerador Linear do Instituto de Física da USP.

MALAFONTE *et al.* (1991) desenvolveram o programa REGULUS, que trabalha com dados gerados pelo programa de aquisição de dados da EG&G Ortec, MAESTRO II.

Não se encontra na literatura, referências de outros programas de análise de espectros de raios gama na área de ativação neutrônica, desenvolvidos no Brasil. O VISPECT, como já citado, foi desenvolvido pelo Dr. Denis Piccot, numa visita científica realizada à Supervisão de Radioquímica em 1989 e, desde então, vem sendo utilizado em todos os trabalhos realizados nesta Supervisão, na área em questão.

CAPÍTULO 3. OS PROGRAMAS

O tratamento dos dados por meio de um programa de computador é uma etapa crucial em NAA. YULE (1981) divide esta etapa em duas partes: a identificação dos elementos que compõem a amostra e a determinação da quantidade desses elementos.

ROUTTI e PRUSSIN (1969) afirmam que os métodos para a análise de dados dependem dos parâmetros que definem os dados experimentais, mesmo que estes variem consideravelmente com o tipo de experiência. Esses autores então sugerem uma lista de requisitos que se aplicam aos programas que fazem NAA:

- a. O método deve ser programado para realizar uma análise automática dos dados.
- b. O método deve ser capaz de manipular os dados medidos sobre uma grande variedade de condições experimentais, incluindo estatística variável, ganho do sistema variável e detectores de diferentes tamanhos e qualidades.

c. O método deve ser capaz de analisar espectros de alta complexidade e nenhum conhecimento prévio dos componentes do espectro deve ser necessário. Informações devem ser incluídas para o reconhecimento e análise de linhas espectrais próximas (multipletos).

d. Os dados de calibração, se necessários, devem estar facilmente disponíveis.

e. Os resultados da análise devem incluir as energias e as intensidades dos raios gama e as meias-vidas das linhas medidas.

f. A análise deve incluir os procedimentos de calibração para a determinação da energia e eficiência.

g. A exatidão dos resultados deve ser tão boa quanto a estatística dos dados e a exatidão das informações da calibração permitirem.

h. O procedimento computacional deve ser eficiente o suficiente para tornar o método viável para as análises de rotina usando as capacidades computacionais disponíveis.

Apesar destas afirmações terem sido feitas há quase 30 anos, e pode-se notar isso (no item h, por exemplo) uma preocupação com a capacidade dos computadores, é basicamente isso que um programa de análise de espectros deve fazer e que os três programas que foram testados fazem. Apenas um detalhe, no que se refere à interpretação de multipletos (item c), os autores sugerem que a possibilidade do analista poder entrar com informações seria uma coisa desejável, o que nem todos os programas testados permitem.

Quanto à determinação dos elementos que formam a amostra, não é nosso objetivo testar os programas neste aspecto, mesmo porque o VISPECT não a realiza,

mas sabe-se que a determinação dos elementos está diretamente associada ao correto cálculo da energia do fotopico detectado, e dessa forma avaliar os programas neste aspecto.

Na sequência é descrito o modo de operação de cada programa, assim como o funcionamento das rotinas de localização e quantificação dos picos.

3.1. O VISPECT

O programa VISPECT, por ser um programa independente, pode ler arquivos de espectros criados tanto por sistemas detectores da EG&G Ortec, como dos sistemas da Canberra.

Isso é uma qualidade pois o sistema da EG&G Ortec utiliza o programa de aquisição de dados MAESTRO II. Esse programa gera arquivos de espectros em um padrão próprio, com a extensão CHN.

O sistema de detecção da Canberra utiliza o programa de aquisição de dados S100, que gera arquivos de espectros em um outro padrão, com a extensão MCA.

Esses dois tipos de arquivos de espectro contêm basicamente as mesmas informações, mas estas não estão dispostas do mesmo modo, sendo assim não são iguais e não permitem que os espectros gerados em um sistema possam ser lidos no outro.

Dessa forma, a primeira tarefa do usuário ao utilizar o programa é definir o formato do arquivo de espectro que vai ser analisado. Na sequência, o usuário deve informar também o caminho (diretório) onde está o arquivo e o nome do mesmo.

O programa lê o arquivo e exibe o espectro na tela com as seguintes informações: canal inicial, canal final, fundo de escala em contagens, o canal em que o cursor está posicionado e o número de contagens desse canal. Na parte inferior da tela

ficam as dez funções que o programa possui para a manipulação do espectro, como pode ser visto na Figura 1.

- F1 - ajuda;
- F2 - marcar um canal como limite inferior de uma região;
- F3 - marcar um canal como limite superior de uma região;
- F4 - visualizar na tela apenas a região marcada;
- F5 - voltar ao espectro original;
- F6 – calibração – essa tecla de função ativa um submenu que permite ao usuário fazer a calibração em energia e em resolução do espectro. Ele pode também salvar essa calibração na forma de um arquivo, ou chamar uma calibração realizada anteriormente;
- F7 - imprimir uma lista com os números dos canais e suas contagens;
- F8 - marcar uma região previamente selecionada;
- F9 - desmarcar uma região previamente selecionada;
- F10 - imprimir os resultados.

Antes de iniciar a localização dos picos é necessário ler os dados do arquivo de calibração referente ao sistema onde o espectro foi gerado ou realizar a calibração do sistema com o espectro que está na tela.

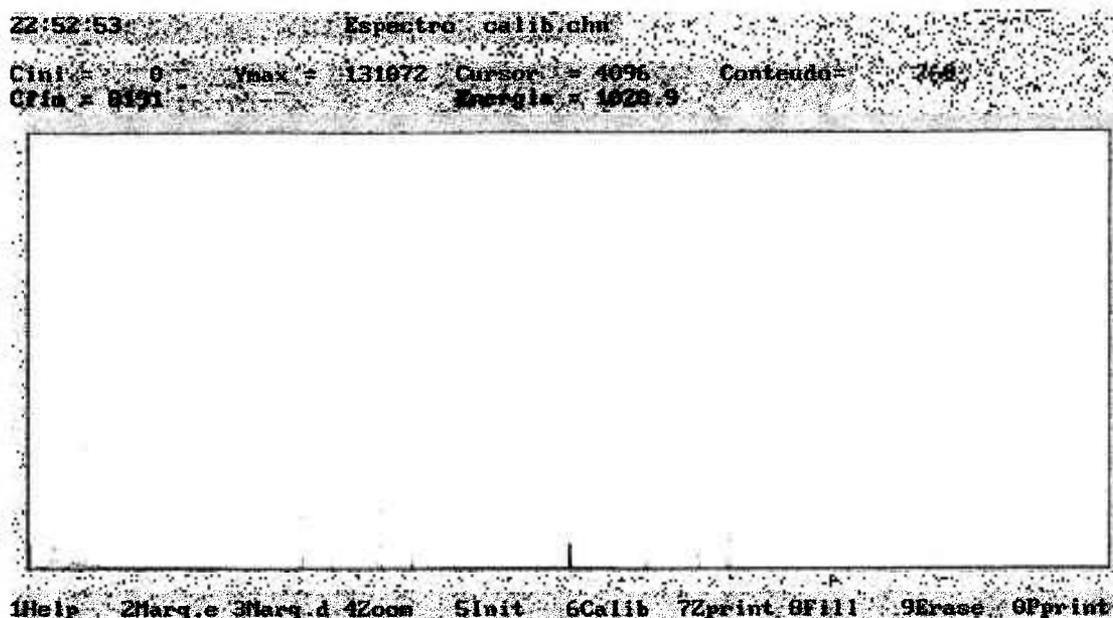


Figura 1 – Tela do programa VISPECT já com o espectro calibrado, pode-se notar o cursor no centro inferior da tela.

A calibração de um sistema se divide na calibração em energia e na calibração em resolução, ambas são feitas de maneira simples pelo programa. Para a calibração em energia basta fornecer a energia de pelo menos dois canais do espectro, enquanto que para a calibração em resolução é necessário marcar pelo menos dois picos no espectro para que o programa possa calcular a função de resolução do detector. A calibração pode ser gravada de forma que, quando se faz uma nova análise sob as mesmas condições em que foi feita a calibração, não é necessário refazer a calibração e sim recuperar as informações a partir do arquivo de calibração já existente.

Com o espectro estando calibrado é possível realizar a localização dos picos através das teclas de atalho Ctrl-P. Neste ponto é necessário informar ao programa qual o nível de sensibilidade que deve ser usado na localização dos picos, cujo valor padrão é 15.

O nível da sensibilidade padrão usado na procura de picos, significa que um pico, para ser encontrado, deve possuir pelo menos 15 contagens em um canal do espectro de correlação. Isso quer dizer, que para localizar picos com poucas contagens acima da linha do BG é necessário diminuir esse valor, e ao contrário, se o objetivo for localizar somente os picos com um grande número de contagens deve-se aumentar esse valor.

O modo de localização de picos utilizando um espectro de correlação está descrito com detalhes mais adiante.

Na sequência, o programa mostra o espectro com os picos localizados em vermelho, bastando apenas imprimir o relatório de resultados, para concluir a análise.

O relatório traz as seguintes informações gerais: nome do arquivo, data e hora em que o espectro foi gravado e tempo de detecção. As informações sobre os picos são tabeladas na seguinte ordem: energia dos pico, área líquida, área do BG, resolução em energia, canal da centróide, canal inicial, largura do pico em número de canais, atividade em contagens/segundo e desvio padrão da atividade em porcentagem.

Com a análise concluída o usuário pode deixar o programa ou analisar outro espectro, repetindo a mesma sequência descrita acima.

Como foi visto, para realizar a análise dos espectros o programa VISPECT utiliza uma série de rotinas para localizar e quantificar os picos. Para entender como o programa realiza estas tarefas é interessante saber como as principais rotinas de trabalho funcionam.

Na localização de picos o programa usa um método de correlação, onde um sinal desejado, no caso um pico, está imerso no que pode-se considerar ruído.

Segundo BLACK (1969), é possível definir a operação da função de correlação como a tendência de uma forma (não necessariamente funcional) selecionar a si mesma a partir de outra forma complexa e rejeitar o outro conteúdo da forma complexa, como ruído espúrio.

A função de correlação no caso discreto, pode ser aproximada por:

$$C_{\tau} = \sum_{n=1}^M f_n \cdot g_{L+\tau} \quad (1)$$

onde f_n é o sinal de procura, M é o número de canais que ocupa o sinal de procura, g_n são os dados do espectro, e C_{τ} é o espectro de correlação.

A função f_n deve ser uma função simétrica e semelhante à forma que se quer extrair do espectro. Nesse caso, ela tem a forma da Figura 2. Ela é conhecida pelo nome de função retangular de área zero, porque as laterais são negativas e seu valor total é exatamente igual à área positiva. A região positiva fica no centro e por isso terá o nome de região central (RC), o que está a esquerda e a direita dela, serão consideradas juntas pelo nome de região lateral (RL).

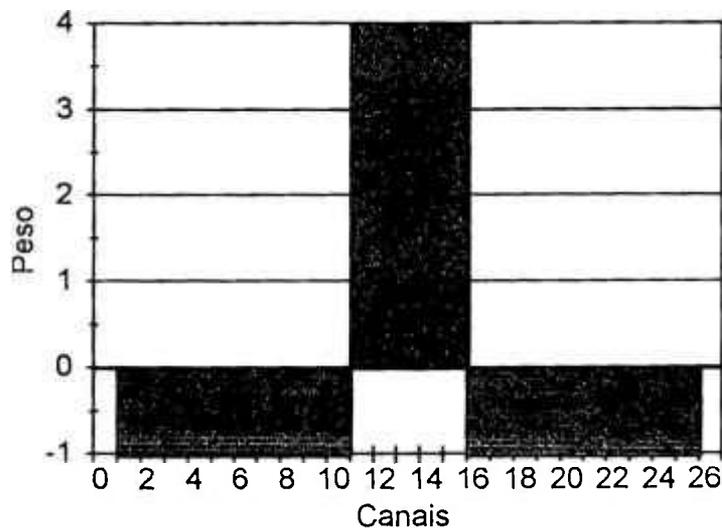


Figura 2 - Forma do sinal de procura.

Para criar esta figura, utilizamos o valor M . A região central possui $M/5$ canais, e a região lateral possui $4M/5$ canais no total, $2M/5$ de cada lado respectivamente.

ROBERTSON *et al.* (1972), discutem que para estabelecer uma rotina de localização automática de picos deve-se resolver o problema da banda de ruído na correlação, de forma a poder-se discriminar os sinais válidos.

Entretanto, desde que o fundo no espectro original varia consideravelmente, a banda de ruído na correlação, também irá variar.

Pode-se converter esse ruído a uma banda de largura constante, dividindo o conteúdo de cada canal da correlação pela raiz quadrada do fundo, associado com o mesmo canal do espectro original. Isso é insatisfatório, porque requer a detecção estimada do fundo.

INOUE (1971) resolveu esse problema usando a raiz quadrada das contagens do espectro original, dessa forma a razão sinal/ruído que passa por esse filtro digital, será aumentada em 4 vezes.

Dessa forma a equação (1), ficou:

$$C_{\tau} = \sum_{n=1}^M f_n \sqrt{g_{n+\tau}} \quad \dots(2)$$

A rotina de localização dos picos segue várias etapas, começando com a utilização de informações contidas no arquivo de calibração.

Quando é feita a calibração em energia, uma regressão linear da energia em função do número do canal é obtida e a partir desta, é feita a calibração da resolução

em energia em função da energia, sendo que são os coeficientes destas retas que ficam guardados nos arquivos de calibração. Por isso a calibração é obrigatoriamente chamada antes de se começar a localização dos picos.

A rotina de localização utiliza os coeficientes das calibrações para calcular o número de canais que a forma do sinal de procura (M) irá ter, porque este depende do valor em canais da resolução em energia na metade do espectro.

Os pontos do espectro de correlação que têm valores maiores que o da sensibilidade escolhida quando se inicia o processo da procura de picos, mostram a presença de picos nestas posições. A partir desse ponto o programa passa a uma função que irá determinar o canal inicial do pico. Ao primeiro canal da correlação que possui um valor maior que a sensibilidade deu-se o nome de posição i . A função, então realiza um "looping" decrescente, entre a posição i e a posição $i-10$. Nesse "looping" é testado se a soma das contagens dos três últimos canais (por exemplo: x_i , x_{i-1} e x_{i-2}) é menor ou igual a soma das contagens dos três canais anteriores (x_{i-1} , x_{i-2} e x_{i-3}). Se for menor, o "looping" acaba e o canal inicial do pico é considerado como sendo $i-1$. Se não for menor, o "looping" continua com o canal anterior, até o limite inferior estipulado no "looping". Se o "looping" acaba sem a condição anterior ocorrer, o canal que será usado como início do pico, é determinado como sendo o último canal do "looping" menos 1, ou seja, $i-10-1$ ou $i-11$.

Após o término do "looping", a variável i é atualizada de modo a indicar o canal inicial do pico e com isso a função termina.

Feito isso, é necessário encontrar o final do pico e isso ocorre ao inverso de quando encontra-se o canal inicial, isto é, o valor da correlação agora deve ser menor que a sensibilidade para que outra função determine o canal final.

Essa função funciona de maneira semelhante a anterior, ela faz um "looping" crescente que vai do primeiro canal no espectro de correlação, que possui um

valor menor que a sensibilidade, após a ocorrência no espectro de correlação de um canal onde o valor era maior que a sensibilidade, a esse canal deu-se o nome de f . Essa condição tem que ocorrer, porque senão, não haveria um pico. O "looping" vai do canal chamado de f até $f+10$. Nesse "looping" é testado se a soma das contagens dos três canais subseqüentes (x_f , x_{f+1} e x_{f+2}) é menor ou igual a soma das contagens dos três canais posteriores (x_{f+1} , x_{f+2} e x_{f+3}). Se isso ocorrer o "looping" acaba prematuramente e o canal final do pico é $f+1$. Se não for menor, o "looping" continua com o canal seguinte, até o limite estipulado no "looping". Se o "looping" acaba sem essa condição ocorrer, o canal que será usado como final do pico, é determinado como sendo $f+10+1$ ou $f+11$.

Após o término do "looping", a variável f é atualizada indicando o canal final do pico, concluindo assim o processo de localização de picos.

Na seqüência, é procurado dentro do pico encontrado o canal que possui a maior contagem no espectro de correlação, que é marcado como sendo a centróide.

Com os canais inicial e final conhecidos o programa agora é capaz de calcular a área do pico, através do método da Área Total do Pico (Total Peak Area - TPA), segundo BAEDECKER, (1971):

O método da Área Total do Pico utiliza o seguinte equacionamento:

$$A_L = A_T - A_{BG} \quad \dots(3)$$

sendo

$$A_T = \sum_{i=1}^f C_i \quad \dots(4)$$

$$A_{BG} = \frac{(Y_i + Y_f)}{2} \cdot LP \quad \dots(5)$$

ou seja a área líquida (A_L) é a diferença entre a área total (A_T) e a área do BG (A_{BG}). A área total é a somatória das contagens dos canais (x_i) e a área do BG é a média dos extremos do pico (Y_i e Y_f) multiplicado pelo número de canais que formam o pico (LP), mas Y_i e Y_f são calculados como é mostrado abaixo:

$$Y_i = \frac{x_{i-1} + x_i + x_{i+1}}{3} \quad \dots(6)$$

$$Y_f = \frac{x_{f-1} + x_f + x_{f+1}}{3} \quad \dots(7)$$

isso é, Y_i é a média aritmética feita com as contagens do canal inicial do pico e das contagens dos dois canais vizinhos e Y_f é a média aritmética feita com as contagens do canal final do pico e das contagens dos dois canais vizinhos.

O erro ou desvio padrão da área do pico é calculado como:

$$\sigma = \sqrt{A_L + 2A_{BG}} \quad \dots(8)$$

Um exemplo de detecção utilizando o método descrito acima foi realizado num espectro que possuía apenas o pico de 661,6 keV do Cs-137. Os resultados podem ser vistos nas Figuras 3 e 4.

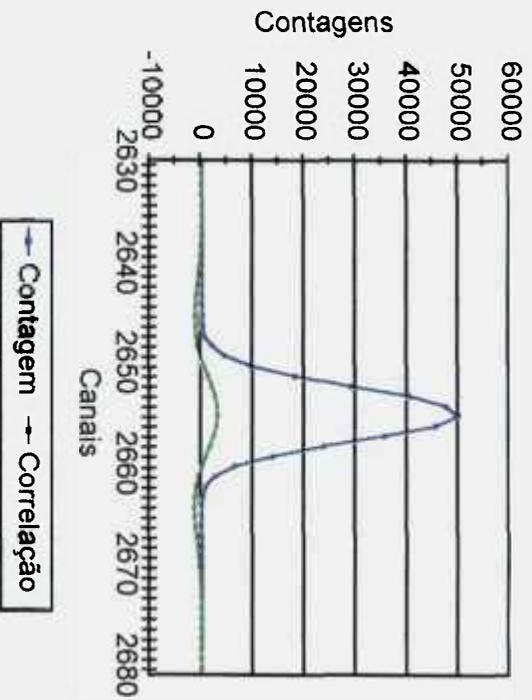


Figura 3 - Forma do pico de 661,6 keV do Cs-137 e a curva de correlação produzida por ele.

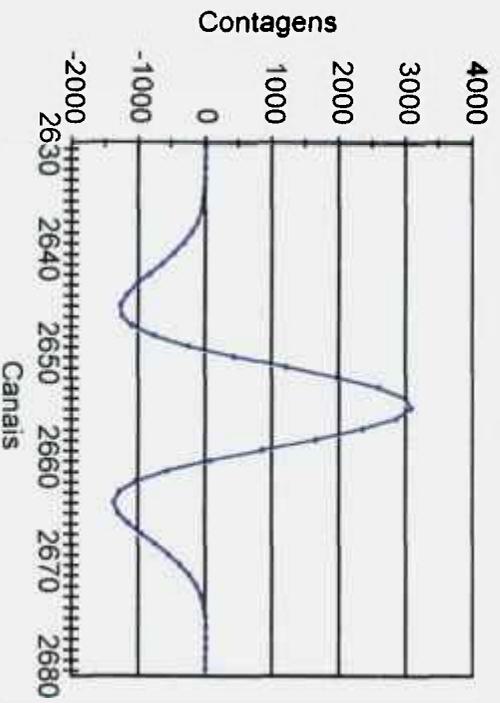


Figura 4 - Curva de correlação produzida quando o sinal de procura passa sobre o pico de 661,6 keV do Cs-137.

3.2. O SAMPO 90

O programa SAMPO 90 lê arquivos de espectros que possuem extensão MCA e há um caminho simples para a análise desses espectros depois que as calibrações em energia e resolução do sistema já existirem.

O analista fornece o caminho e o nome do arquivo e o programa então apresenta uma tela com vários campos a serem preenchidos, onde o analista pode detalhar as condições em que ocorreu a detecção e as calibrações que serão usadas na análise. Na sequência o programa mostra o espectro na tela.

A partir daí o analista deve localizar os picos, ativando o menu de localização e escolhendo os canais inicial e final nos quais ele deseja que seja feita a análise, podendo para isso selecionar o nível de significância que o programa vai usar para localizar os picos. O programa então mostra a posição do pico com uma marca vermelha.

Depois da localização é necessário que o programa calcule as áreas dos picos. Nessa operação o analista terá que informar também a partir de que canal e até que canal o programa deverá calcular a área dos picos previamente encontrados, podendo escolher entre três tipos de cálculo de linha de base: linear para todos os picos; não linear para os multipletos e não linear para todos os picos. Além disso, é possível fazer o cálculo das áreas de maneira interativa.

O SAMPO 90 utiliza uma rotina que localiza inicialmente os picos e escolhe os intervalos para ajuste.

ROUTTI e PRUSSIN (1969), explicam que se os dados podem ser obtidos como uma curva lisa e contínua, então o pico pode ser facilmente reconhecido como um nítido máximo local. Além disso, a derivada segunda ou curvatura dos dados tem valores razoavelmente baixos, exceto nas vizinhanças de um pico.

Os dados obtidos com analisadores multicanais entretanto, têm flutuações em todo o espectro por causa da natureza estatística e discreta dos dados. Sendo assim, a rotina de procura deve aplicar algum critério estatístico para testar a presença de picos reais.

A expressão da diferença segunda é:

$$dd_i = \sum_{j=-k}^{+k} n_j \cdot C_{i+j} \quad \dots(9)$$

onde n_j são coeficientes pré determinados e C_{i+j} são as contagens. Com a correta escolha, os coeficientes n_j e o desvio padrão

$$\sigma_i = \left[\sum_{j=-k}^{+k} n_j^2 \cdot C_{i+j} \right]^{1/2} \quad \dots(10)$$

podem ser usados para reconhecer picos num espectro pelo seguinte critério

$$ss_i = dd_i / \sigma_i \quad \dots(11)$$

e comparando esse resultado (ss_j) com um dado valor limite.

Um teste adicional derivado da forma do pico é também utilizado. Para um pico com formato de Gaussiana a distância em canais da centróide ao ponto onde a expressão da segunda diferença muda de sinal é $2\sqrt{\sigma}$, e o número de canais com o mesmo sinal é $4\sqrt{\sigma}$. Uma tolerância aceitável é 4 ou $\sqrt{\sigma}$, o que for maior. Se o número de canais com o mesmo sinal da expressão da segunda diferença não estiver dentro destes limites, o pico é rejeitado devido a sua má forma.

Para a determinação das áreas, os picos encontrados pelo algoritmo de procura ou adicionados pelo analista são ajustados com a função de forma do pico.

Outra parte da análise automática é a seleção dos intervalos de ajuste e o número de picos incluídos em cada ajuste. Um requisito para o ajuste de um único pico é que este pico deve estar suficientemente isolado dos seus picos vizinhos, então a interferência é desprezível.

Este requisito é satisfeito na maioria das vezes. Entretanto, para resolver picos sobrepostos ou para fazer a determinação do BG, para picos próximos, de maneira mais precisa, é necessário ajustá-los simultaneamente. Geralmente, quando os picos estão separados por uma distância inferior a seis vezes a FWHM, os picos são ajustados conjuntamente.

3.3. O OMNIGAM

A filosofia de análise deste programa está baseada em um método orientado pela biblioteca de núclídeos. Esse tipo de análise proporciona uma ótima sensibilidade quando é preciso encontrar baixos níveis de atividade. Mas se o analista for trabalhar com uma amostra desconhecida, ele pode utilizar um método de procura de picos. O programa pode utilizar os métodos simultaneamente na análise dos espectros. A biblioteca localiza os picos pela energia e depois são procurados picos adicionais no espectro através do método desenvolvido por MARISCOTTI (1967). Após a localização dos picos, as centróides são determinadas pela técnica de ajuste de Gaussiana.

No método de MARISCOTTI (1967), é assumido que o espectro é contínuo e o BG é independente do número do canal na vizinhança de um pico. Isso implica que a derivada segunda é zero nas regiões de BG e diferente de zero nas regiões de pico. Para reduzir os efeitos causados por flutuações estatísticas, a diferença segunda é suavizada, como na equação 9, alterando-se apenas o valor dos coeficientes n_j 's.

Todas as energias presentes na biblioteca de nuclídeos são consideradas picos simples, e o programa tenta calcular o BG, a área líquida e a centróide nessas energias.

Para que seja feita uma identificação correta dos elementos presentes na amostra é importante que a calibração tenha sido bem feita e que as condições do sistema detector não oscilem muito, para que a calibração não tenha que ser refeita com muita frequência. Isso porque é necessário que os picos encontrados no espectro tenham como centróide uma energia o mais próxima possível da energia dos gamas dos radioisótopos que fazem parte da biblioteca. Quando a centróide do pico é a energia presente na biblioteca ou quando o pico é encontrado pela rotina de detecção, entra em ação o método de cálculo da área do BG. Para encontrar o canal inicial na lateral de baixa energia do pico, uma média móvel das contagens de 5 canais é calculada para a região entre o canal da centróide até o canal que se situa numa posição três vezes o FWHM abaixo da centróide.

A média das contagens de 5 canais em um dado canal é a soma das contagens a partir de dois canais abaixo deste canal em questão, até dois canais acima deste, dividido por 5. O BG é selecionado como a menor média e será associado ao canal central dos 5 que deram origem a média. Se o valor da menor média estiver dentro de um desvio padrão do valor original do canal, essa média passa a ser a contagem do BG no lado de menor energia para este pico.

Se o valor da menor média não estiver dentro deste conjunto de valores, formado pela contagem do canal que deu origem a média mais ou menos um desvio padrão, então uma média móvel de 3 pontos será usada no lugar da média móvel de 5 pontos, para calcular um novo valor mínimo. A menor média de 3 pontos é comparada novamente com a contagem do canal que deu origem a média, segundo o mesmo critério anterior, isto é, a menor média móvel é aceita se o seu valor estiver dentro de um desvio padrão da contagem do canal que originou a própria média. Se a média móvel de 3 pontos também falhar, a contagem do canal que deu origem a menor média é escolhido

para ser usada como o valor do BG no lado de menor energia em relação a centróide do pico.

O mesmo processo é repetido para o lado de alta energia do pico. O BG sob o pico será uma linha reta entre esses dois valores.

A área total e a área líquida são calculados como no VISPECT, sendo que o canal inicial e final são encontrados como explicado acima.

A área do BG é calculado como a seguir:

$$A_{BG} = \frac{C_i + C_f}{2} \cdot LP \quad \dots(12)$$

onde C_i é a menor média na lateral de baixa energia do pico, C_f é a menor média do lado de alta energia do pico e LP é a largura do pico.

O desvio padrão do BG é o erro das contagens do BG multiplicado pela razão do número de canais do pico pelo número de canais usados para calcular o BG. Para picos largos e com poucas contagens por canal, isso pode resultar em erros grandes no cálculo do BG.

O desvio padrão da área do BG é dado pela equação abaixo:

$$\sigma_{BG} = \left(\frac{A_{BG} \cdot LP}{NCB - NCA} \right)^{1/2} \quad \dots(13)$$

onde A_{BG} é a área do BG, LP é a largura do pico, NCB é o número de canais utilizado no cálculo do BG na lateral de baixa energia e NCA número de canais utilizado no cálculo do BG na lateral de alta energia, esses valores podem ser 5, 3 ou 1, dependendo de como foi encontrado os valores extremos do BG.

O desvio padrão da área líquida é, então:

$$\sigma = \sqrt{A_T + (\sigma_{BG})^2} \dots (14)$$

Um resumo das principais características dos três programas podem ser vistas na Tabela I, a seguir.

Tabela I - Comparação das características dos programas.

Características	VISPECT	SAMPO 90	OMNIGAM
Calibração em energia	Sim	Sim	Sim
Calibração em resolução	Sim	Sim	Sim
Deteção de picos	Sim	Sim	Sim
Resolução de multipletos	Sim	Sim	Sim
Atenuação do Compton	Sim	Sim	Sim
Visualização do espectro	Sim	Sim	Não
Identificação dos nuclídeos	Não	Não	Sim
Cálculo da atividade	Não	Não	Sim
Relatório de análises	Sim	Sim	Sim

CAPÍTULO 4. PARTE EXPERIMENTAL

Os espectros de raios gama gerados por amostras de rochas irradiadas com nêutrons são bastante complexos. No mesmo espectro podem ocorrer uma série de situações diferentes. O analista pode encontrar picos bem definidos, mas também picos pouco intensos, mal definidos, próximos entre si e sobre uma linha base que varia bastante, pois depende dos elementos presentes na amostra, da atividade da amostra, do tempo de contagem e da eficiência de detecção do sistema de contagem, entre outras coisas.

Um espectro gama para ser usado em trabalhos de comparação entre programas deve ser conveniente para testar a habilidade dos programas em encontrar picos, quantificar áreas de picos e resolver picos sobrepostos, além de determinar corretamente as incertezas.

Desse modo, os espectros devem satisfazer a uma série de critérios. Eles não devem ter situações difíceis com multipletos numa quantidade irreal, o espectro não deve ter características que, mesmo possíveis de ocorrer, sejam raras, e as propriedades físicas do detector que são observáveis no espectro, como a forma do pico em função da energia, não devem ser adulteradas.

Em contrapartida, há características que os espectros devem possuir, como picos com alta intensidade que garantam uma boa estatística de contagem, até picos abaixo do limite de detecção. Os picos devem estar presentes no espectro em diferentes níveis e tipos de linhas base. Um grande número de dupletos e multipletos devem estar presentes e ter diferentes separações em termos de FWHM entre os picos, assim como diferentes razões entre as áreas dos picos que formam os dupletos (BLAAUW *et al.*, 1997).

Esses mesmos autores argumentam que os espectros devem conter apenas dados reais, sem qualquer manipulação, mas concluem que uma desvantagem do uso de espectros reais é a impossibilidade de determinar a posição e a área dos picos por um método independente com suficiente precisão e exatidão.

Como o conhecimento da área e a posição do pico com precisão e exatidão foi considerado o critério mais importante, adotou-se a seguinte solução para esta situação: foram criados espectros, nos quais os picos tem a forma de gaussianas e suas áreas são previamente conhecidas. Estes picos são adicionados a um espectro de radiação de fundo (BG) de um sistema de espectrometria gama e estes são analisados pelos programas. A esses espectros montados deu-se o nome de espectros artificiais.

Como é impossível criar todas as situações possíveis de ocorrer nos espectros reais, foram escolhidas as situações mais frequentes e importantes para simular com espectros artificiais. Essas situações são:

- picos simples isolados com várias intensidades;
- dupletos de mesma intensidade cujas distâncias entre as centróides variam;
- dupletos que têm uma distância fixa entre as centróides, mas possuem intensidades diferentes. Nessa situação o pico menos intenso é colocado tanto do lado de

maior energia em relação ao pico mais intenso, como também, do lado de menor energia em relação ao mesmo.

4.1. O espectro de fundo ou BG

Os espectros artificiais que foram criados especialmente para a comparação entre os programas, tiveram sua origem em um espectro da radiação de fundo ou "background" (BG) de um dos sistemas detectores utilizados rotineiramente na Supervisão de Radioquímica do IPEN, descrito a seguir.

O espectrômetro de raios gama utilizado consiste em um detector de Ge hiperpuro, modelo GX2019, coaxial com janela de berílio, acoplado a um processador integrador de sinal modelo 1510, que está ligado a um microcomputador PC 486, onde o programa de aquisição de dados S100 trabalha (todo o sistema é da marca americana Canberra).

Esse espectro do BG corresponde a 12 horas de detecção nas mesmas condições de trabalho em que se executa a contagem de uma amostra.

Sendo assim, o espectro do BG mostra as radiações que estão presentes no ambiente do sistema detector e às quais ele é sensível e que, desse modo, também estarão presentes quando da contagem de uma amostra e farão parte do espectro da mesma, sem ter origem nela.

O objetivo de utilizar-se o BG do equipamento para servir de suporte para a criação dos espectros artificiais, foi o de simular o mais próximo possível um espectro real de baixa atividade que, por isso mesmo, deve ser contado por um longo período de tempo.

4.2. A calibração

Para a execução da calibração, a escolha das fontes radioativas e suas respectivas energias, basearam-se em alguns critérios.

GUNNINK (1990) desenvolveu um método para calibração em eficiência de detectores coaxiais de germânio na faixa de 50 a 4000 keV, onde ele dividiu o espectro em três regiões. A primeira região vai de 50 a 90 keV, a segunda fica entre 90 e 200 keV e a terceira acima de 200 keV.

Conciliando a disponibilidade de fontes radioativas certificadas que emitissem radiações gama nessas três faixas de energia, escolheram-se as fontes a serem utilizadas. Além disso, elas deveriam ter energias que cobrissem uma ampla faixa do espectro, onde se encontram a maior parte dos elementos de interesse, quando se faz análise de amostras geológicas.

Sendo assim, foi obtido um espectro através da medida dos radioisótopos da Tabela II. Esse espectro foi utilizado como espectro de calibração do sistema para os programas, com o intuito de conseguir que os três programas tivessem uma relação canal-energia muito próxima entre si.

TABELA II - Radionuclídeos utilizados na obtenção do espectro de calibração e as energias utilizadas para a calibração.

Radionuclídeo	Energia (keV)
Am-241	59,6
Co-57	121,9
Cs-137	661,6
Co-60	1332,4

A calibração em resolução do sistema também foi feita usando-se o mesmo espectro de calibração. No caso do programa VISPECT, chegou-se aos resultados mostrados na Tabela III.

Tabela III - Largura máxima a meia altura (FWHM) obtidos para os quatro gamas de interesse na calibração em resolução.

Energia (keV)	FWHM (keV)
59,6	0,93
121,9	1,00
661,6	1,45
1332,4	1,75

4.3. Espectros artificiais

Os mesmos critérios usados na escolha das energias para a calibração podem ser usados aqui. Além disso, a forma que o BG contado por 12 horas possui (Fig. 5), mostra que se os picos artificiais fossem adicionados nas mesmas energias usadas na calibração, situações diferentes seriam criadas, o que tornaria possível estudar o comportamento dos programas nas tarefas de localização e quantificação dos picos.



Figura 5 - Espectro do BG do sistema detector descrito anteriormente, obtido após 12 hs.

O BG foi então analisado pelos três programas, com a finalidade de se detectar a possível ocorrência indesejada de picos, devido às radiações de fundo ou a flutuações do BG, nas vizinhanças dos canais onde seriam acrescentados os picos artificiais (Tab. II).

O BG foi analisado usando-se o nível de sensibilidade padrão dos programas. No programa VISPECT a sensibilidade padrão possui o valor 15. Este valor significa que um pico, para ser encontrado, deve possuir pelo menos 15 contagens em um canal do espectro de correlação.

No OMNIGAM, o limiar de sensibilidade é 50%, que significa que 50% é a máxima incerteza de contagem que um pico pode ter para ser aceito. Quanto menor for este número, maior deve ser o pico para ser aceito. A sensibilidade de 0,0% rejeita todos os picos e a sensibilidade de 1000% interpreta quase todas as variações como sendo picos. Picos que estão na biblioteca são listados no relatório, independentemente da sensibilidade escolhida. Os picos que não estão na biblioteca só são incluídos no relatório se o erro for menor que o valor da sensibilidade.

Já no SAMPO 90, o nível de significância padrão é 4, o que representa que a razão entre o valor da derivada segunda em um canal e o desvio padrão das contagens nesse mesmo canal tem que ser maior que 4 para se ter um pico.

As incertezas foram obtidas com o valor de um desvio padrão, isto é, com um nível de confiança de 68% nos três programas.

O VISPECT detectou um pequeno pico em 1333,79 keV. O programa OMNIGAM, sem o uso da biblioteca, não detectou nenhum pico, enquanto que com uma biblioteca montada com os radioisótopos da Tabela II e com as energias de 59,536 keV, 122,061 keV, 661,66 keV e 1332,501 keV, respectivamente, chegou aos resultados mostrados na Tabela IV. O SAMPO 90 não encontrou nenhum pico nas regiões de interesse, utilizando a sua sensibilidade padrão.

Tabela IV - Resultado da análise do BG feita pelo programa OMNIGAM utilizando uma biblioteca com os radioisótopos da Tabela II.

Energia da Centróide (keV)	Área Líquida (Contagens)
57,44	9
121,90	21
662,85	96
1333,42	92

As energias usadas na Tabela II e na biblioteca do programa OMNIGAM são um pouco diferentes, por terem origem em referências diferentes. Essa diferença foi mantida, exatamente para haver mais realismo com situações de rotina, onde os picos normalmente podem se encontrar deslocados em relação à calibração.

Após esse resultado, resolveu-se alterar o BG na região do pico de 1332,4 keV, de forma a eliminar o pico que o programa VISPECT detectou. Para isso, foi criado um método baseado na rotina que esse programa tem para encontrar o pico, fazendo com que a variação de contagem entre os canais nessa região diminuísse. Uma análise desse BG alterado mostrou que o pico não era mais encontrado.

Esse BG alterado foi novamente analisado pelo OMNIGAM com a mesma biblioteca e o resultado para esse pico foi: Energia - 1333,24 keV; Área líquida - 47 contagens; Incerteza - 44,24%. Esses resultados mostram que o pico foi atenuado de forma a não ser mais encontrado pelo método empregado pelo VISPECT e teve sua área diminuída pela metade quando analisado pelo OMNIGAM.

Não se procurou eliminar os picos que o OMNIGAM encontra com a utilização de biblioteca, pois os erros são grandes, tanto que sem a biblioteca esses picos não são detectáveis.

Para realizar o teste de detecção de picos simples, foram calculados valores para as áreas dos picos que seriam adicionados ao BG. Os canais que

correspondem às energias da Tabela II e mais 6 canais de cada lado destes formaram as 4 regiões de interesse, cada uma com um total de 13 canais.

A área da região formada por esses 13 canais é a soma de suas contagens, e a raiz quadrada deste valor corresponde aproximadamente ao desvio padrão dessa área. Como esta área faz parte de um espectro de BG, foi chamada de desvio padrão do BG (Tab. V).

Tabela V - Áreas e respectivos desvios das 4 regiões onde os picos foram adicionados.

Energia (keV)	Canal		Área (contagens)	Desvio padrão - σ (contagens)
	Inicial	Final		
59,6	230	242	1369	37
121,9	480	492	2265	50
661,6	2642	2654	251	16
1332,4	5322	5334	87	10

Com base nesses resultados escolheram-se as áreas que seriam adicionadas ao BG para o teste de detecção. Para a energia de 59,6 keV, manteve-se o valor de 37 contagens, para a energia de 121,9 keV, aumentou-se o valor para 50 contagens porque este pico está numa região onde o BG é mais alto, isto quer dizer que, se levarmos em consideração um canal a mais ou a menos no cálculo da área, o desvio seria sensivelmente diferente. Nas demais energias os resultados foram apenas arredondados para o maior inteiro, ficando 16 e 10 contagens, respectivamente.

Esses valores foram utilizados como valores base para o cálculo das áreas dos picos que foram adicionados ao espectro do BG. Essas áreas variaram de um mínimo de 1 a um máximo de 200 vezes o desvio padrão do BG.

Neste caso, para avaliar o desempenho dos programas, foi utilizado o mesmo método de DECKER e SANDERSON (1992). O critério adotado para a quantificar a qualidade na determinação da área dos picos é a razão entre o valor

encontrado e o valor de referência. Quanto mais próximo esse valor estiver de 1, melhor foi a detecção.

Se o valor calculado para a razão for maior que 1, houve uma sobre-estimativa da área do pico enquanto valores inferiores a 1 indicam uma sub-estimativa. Razões que variam entre 0,9 e 1,1 são consideradas boas e mostram que o programa quantificou bem o pico em questão.

Para quantificar a qualidade na estimação das incertezas, multiplicou-se a razão calculada pela incerteza encontrada pelos programas na detecção dos picos e chamou-se esse resultado de erro. Quanto mais próximo de zero estiver o erro, mais precisa foi a detecção. Uma boa estimação da incerteza, no cálculo da área, é atingida quando seu valor é inferior a 0,10.

O teste de detecção de dupletos de intensidades iguais, foi realizado tomando-se como base os valores de resolução da Tabela III. As distâncias entre as centróides variaram de 50 a 300% desses valores para cada uma das quatro regiões e a área de cada um dos picos que formam o duplete correspondeu a 100 vezes o desvio padrão do BG.

Para avaliar o desempenho dos programas testados foi adotado, neste caso, um método baseado no trabalho de BLAAUW *et al.* (1997), que usaram os resíduos estandardizados ou “z-scores”, isto é, a diferença entre os valores encontrados e os valores de referência divididos por suas próprias incertezas.

Dois “z-scores” podem ser calculados. Um “z-score” relacionado a qualidade na determinação da área, baseado na incerteza da referência:

$$z_{ref} = \frac{A_{me} - A_{ref}}{\sqrt{2}\sigma_{ref}} \dots (15)$$

e um “z-score” relacionado a qualidade da estimação das incertezas dos programas de análise e que é baseado na incerteza de referência e na incerteza encontrada pelo programa:

$$z_{\text{enc}} = \frac{A_{\text{enc}} - A_{\text{ref}}}{\sqrt{\sigma_{\text{enc}}^2 + \sigma_{\text{ref}}^2}} \dots (16)$$

onde A_{ref} e A_{enc} são as áreas de referência e encontrada, e σ_{ref} e σ_{enc} são suas incertezas respectivamente. Como os picos adicionados tinham áreas conhecidas, o σ_{ref} foi considerado como a incerteza ideal a ser encontrada pelos programas. Os “z-scores” são normalmente distribuídos com média zero e 1 como desvio padrão, isto é, os “z-scores” maiores que 2 ou menores que -2 indicam que alguma coisa está errada num nível de significância $\alpha=0,05$.

Para o último teste com pico artificiais, foram criados dupletos formados por picos com intensidades diferentes. Uma separação fixa de 2 keV, ou 8 canais, foi utilizada e o pico menos intenso foi colocado do lado de menor energia do pico predominante e depois do lado de maior energia. A razão das áreas entre os picos cobriram a faixa desde 10:10 até 0,5:10 e inversamente entre 10:10 e 10:0,5.

Dessa forma, a área que inicialmente era a mesma, para os dois picos que formam o duplete, e tinha o valor de 200 vezes o desvio padrão na sua região, passa a ter as seguintes razões entre as áreas: 8:10; 6:10; 4:10; 2:10; 1:10; 0,5:10 e na sequência o inverso é feito, colocando-se o pico menos intenso do lado direito do pico predominante. Lembrando-se sempre que os dupletos estão nas quatro regiões de interesse previamente escolhidas e que correspondem as energias de 59,6, 121,9, 661,6 e 1332,4 keV.

No programa OMNIGAM para poder-se utilizar a procura de picos com o uso da biblioteca de radioisótopos, foi criada uma biblioteca com as energias dos

dupletos e no programa SAMPO 90 a análise dos dupletos foi feita de maneira interativa de forma que o operador pudesse mostrar onde se situam as centróides dos dupletos.

Neste teste foi calculado o desvio padrão relativo entre os valores de referência e os valores encontrados pelos programas como forma de analisar a qualidade dos resultados.

A adição dos picos ao espectro do BG foi feita com a ajuda de um programa de simulação de espectros, chamado SIMSPEC (BERNASCONI, 1995). Esse programa realiza uma série de tarefas que facilitam a alteração de um espectro, principalmente com a criação de picos com formatos de gaussianas e áreas escolhidas que podem ser acrescentadas a um espectro.

Para adicionar um pico que será criado pelo programa a um espectro em uma determinada energia é necessário fornecer os dados da calibração em energia deste espectro. É possível fornecer dois ou três coeficientes dependendo se a calibração é uma função linear entre o canal de contagem e a energia ou se ela é uma função de segundo grau. Além disso, o programa permite trabalhar com espectros de 1024 a 16384 canais e a energia pode estar na faixa de eV, keV ou MeV.

Para criar um pico, são necessárias informações sobre a área que ele deve ter, a energia da sua centróide e a FWHM, também em energia. Em seguida, o programa mostra um gráfico com os pontos e a gaussiana ajustada e permite que o operador confirme ou rejeite o resultado.

O programa também pode subtrair picos existentes de um determinado espectro, criar uma linha base linear entre dois canais previamente escolhidos, como se essa fosse um BG, e ler e salvar arquivos de espectros com extensão MCA.

Dessa maneira, a localização, a forma e a área dos picos são bem conhecidas, mas devido ao fato de se somar gaussianas com áreas conhecidas a um BG

real, podem surgir léves flutuações nas áreas encontradas pelos programas durante a análise.

4.4. Amostras reais

Na última parte deste estudo, o material geológico de referência GS-N (IWG - GIT) foi usado como amostra, assim como, o granito G-94. Nos dois casos foram analisados 17 elementos traço, utilizando-se a análise por ativação comparativa, que é o procedimento normalmente empregado na Supervisão de Radioquímica para a análise de material geológico.

Nesse método, padrões contendo conhecidas quantidades de elementos de interesse são submetidos ao fluxo de nêutrons juntos com a amostra e as atividades induzidas são medidas nas mesmas condições.

Como cada radioisótopo tem suas próprias características de meia-vida e energia (ou energias) de raios gama, é possível, em geral, identificar os isótopos dos elementos. A quantidade desse elemento na amostra é considerada como diretamente proporcional a taxa de contagens de raios gama.

Sendo, amostra e padrões irradiados juntos sob as mesmas condições de tempo de irradiação e fluxo de nêutrons, a concentração de um elemento particular de interesse é obtida comparando-se as taxas de contagens dos espectros de amostra e padrão. Essa concentração é calculada pela equação:

$$C_i^r = \frac{A_a^i m_p^i}{A_p^i M_a} e^{(m-p)0.693/T_{1/2}} \dots (17)$$

onde A_a^i e A_p^i são taxas de contagens (áreas dos picos) do elemento i na amostra e no padrão, respectivamente; m_p^i é a massa do elemento i no padrão; M_a é a massa total da

amostra; $T_{1/2}$ é a meia-vida do radioisótopo, t_a e t_p são os tempos de decaimento de amostra e padrão, respectivamente (VASCONCELLOS *et al.*, 1990).

Os espectros de raios gama obtidos foram analisados pelos três programas e o cálculo da concentração dos elementos analisados foi feito pelo método de Análise por Ativação comparativo, como descrito acima, usando-se o programa ESPECTRO.

O procedimento de preparação das amostras e padrões para irradiação são feitos da seguinte forma:

Cerca de 100 mg de amostra são pesadas em envelopes de polietileno de cerca de 1 cm², previamente limpos com solução de ácido nítrico diluído. Depois de pesadas as amostras, os envelopes são selados a quente (com um ferro de solda). Da mesma maneira são pesados os materiais geológicos de referência GS-N e BE-N (GIT-IWG).

Na irradiação amostras e padrões são inseridos em recipientes de alumínio (“coelhos”), especialmente desenvolvidos para uso no reator IEA-R1 do IPEN-CNEN/SP e irradiados por 8 horas em um fluxo de nêutrons térmicos de 10^{12} n cm⁻² s⁻¹.

A detecção foi feita após cerca de 5 dias, as amostras e padrões são retirados dos coelhos de alumínio, transferidos para recipientes de aço inox e levados ao sistema de espectrometria gama já descrito. Os tempos de contagem são de 90 minutos.

Foi feita nova série de medidas cerca de 15 dias após a irradiação. Os tempos de contagem são de 2,5 horas.

Os elementos analisados, os radioisótopos utilizados e suas principais características nucleares e as condições de contagem estão na Tabela VI:

Tabela VI - Elementos analisados e suas principais características nucleares.

Elemento	Radioisótopo	Energia (keV)	Meia-vida	Intervalo de decaimento (dias)
La	¹⁴⁰ La	328,6 ; 486,8 ; 1595,4	40,27h	5
Ce	¹⁴¹ Ce	145,4	32,5d	15
Nd	¹⁴⁷ Nd	91,4; 531,0	11,06d	5, 15
Sm	¹⁵³ Sm	103,0	47,1h	5
Eu	¹⁵² Eu	1407,5	12,2a	15
Tb	¹⁶⁰ Tb	879,4	73,0d	15
Yb	¹⁷⁵ Yb ¹⁶⁹ Yb	396,1 177,0 ; 197,8	101h 30,6d	5 15
Lu	¹⁷⁷ Lu	208,4	6,75d	5, 15
Th	²³³ Pa	311,5	27,0d	15
U	²³⁹ Np	277,5	2,35d	5
Sc	⁴⁶ Sc	889,4	83,9d	15
Co	⁶⁰ Co	1332,4	5,24a	15
Rb	⁸⁶ Rb	1076,6	18,66d	15
Cs	¹³⁴ Cs	795,8	2,07a	15
Ba	¹³¹ Ba	496,3	11,5d	15
Hf	¹⁸¹ Hf	482,2	44,6d	15
Ta	¹⁸² Ta	1188,8 ; 1221,6	115,1d	15

Nas condições de análise, obtêm-se desvios padrão da ordem de 10% e erros relativos (em relação aos materiais de referência) inferiores a 5% para a maioria dos elementos.

Os limites de detecção comumente esperados para rochas encontram-se na Tabela VII (HOFFMAN, 1992).

Tabela VII - Limites de detecção para análise por ativação instrumental de rochas (ppm).

ELEMENTO	LIMITES DE DETECÇÃO (ppm)
La	0,1
Ce	3
Nd	2
Sm	0,1
Eu	0,05
Tb	0,2
Yb	0,2
Lu	0,02
U	0,5
Th	0,5
Ba	100
Rb	30
Ta	1
Hf	1
Cs	2
Sc	0,1
Co	5

CAPÍTULO 5. RESULTADOS E DISCUSSÃO

O valor da sensibilidade utilizada no programa VISPECT foi 15, exceto em alguns casos, quando esta sensibilidade não foi suficiente para detectar o pico. Nesses casos, onde as áreas eram menores que 3σ , foi usada a menor sensibilidade na qual o pico é detectado. Os resultados obtidos para o teste de detecção de picos simples estão nas Tabelas VIII, IX e X.

Os resultados do programa VISPECT (Tab. VIII) mostram que, quando a sensibilidade 15 é suficiente para detectar um pico, em todos os casos as áreas dos picos são iguais ou maiores que 3σ , e os erros não são maiores que 0,5, com exceção do pico de 661,6 keV, com área de 2σ , que foi detectado com a sensibilidade 15 mas com um erro de 0,7. Entretanto, o pico seguinte, de área 3σ , possui um erro também menor que 0,5.

Um dado anômalo do programa VISPECT foi o pico de 121,9 keV, de área 5σ , que apresentou um valor abaixo do resultado anterior, enquanto que em outro pico de mesma energia mas de área 6σ , foi preciso uma sensibilidade 32 para que o programa mostrasse o resultado. Isso ocorreu porque havia contagens baixas em alguns canais das laterais do pico, dessa forma o programa apenas imprime as contagens líquidas de cada canal do pico duvidoso, deixando a critério do operador a decisão de

levá-lo em consideração ou não. Quando se aumentou a sensibilidade, esses canais que estavam provocando o problema não fizeram mais parte do pico e o programa teve certeza na determinação.

Esse programa apresentou bons resultados a partir de 20σ , com exceção do pico de 1332,4 keV que teve uma razão de 1,22, o que é excessivo.

Os resultados com o uso do programa OMNIGAM (Tab. IX) mostram que, enquanto não se utiliza a biblioteca, os menores picos que ele consegue detectar são os que possuem área entre 4 e 5σ , com o erro sendo sempre menor que 0,6, porém, na região do pico de 1332,4 keV, o programa só identifica, sem a biblioteca, os picos de área 100 e 200σ .

Não procurou-se alterar o nível da sensibilidade padrão do OMNIGAM na procura dos picos, porque foi considerado que não se aceitaria picos com mais de 50% de incerteza nas áreas.

Entretanto, quando se utiliza a biblioteca, o programa tenta calcular a área líquida e a centróide do pico naquele canal que possui energia similar à encontrada na biblioteca, por isso ele encontra sempre um pico, mesmo no BG. Os picos pequenos assim encontrados possuem erros grandes e resultados muito próximos aos obtidos no BG, exceto o pico de 59,6 keV.

Seguindo a evolução das áreas, é possível notar que o programa passa a detectar, sem a utilização da biblioteca, primeiro o pico de 121,9 keV. Esse resultado é coerente já que este pico é o que cresce mais rapidamente devido a sua área inicial. Essa coerência na detecção prevalece posteriormente, sendo que o pico de 1332,4 keV é justamente o último a ser detectado sem o auxílio da biblioteca, exatamente por ser o que aumenta de área mais lentamente em valores absolutos.

Esse programa apresentou bons resultados a partir de 100σ .

Tabela VIII - Resultados da análise dos espectros de picos simples obtidos pelo programa VISPECT.

Energia (keV)	Área de Referência	Múltiplos de σ^a	Área Encontrada	Razão	Erro
59,6	37	1	39	1,05	1,12
121,9	50		-	-	-
661,6	16		29	1,81	1,37
1332,4	10		13	1,30	1,06
59,6	74	2	63	0,85	0,60
121,9	100		53	0,53	0,51
661,6	32		41	1,28	0,70
1332,4	20		23	1,15	0,68
59,6	111	3	193	1,28	0,49
121,9	150		151	1,01	0,38
661,6	48		57	1,18	0,48
1332,4	30		31	1,03	0,47
59,6	148	4	228	1,54	0,37
121,9	200		196	0,98	0,29
661,6	64		73	1,14	0,36
1332,4	40		45	1,12	0,38
59,6	185	5	265	1,43	0,30
121,9	250		178	0,71	0,27
661,6	80		87	1,09	0,30
1332,4	50		55	1,10	0,31
59,6	370	10	447	1,21	0,15
121,9	500		516	1,03	0,14
661,6	160		193	1,21	0,17
1332,4	100		99	0,99	0,17
59,6	740	20	817	1,10	0,08
121,9	1000		1019	1,02	0,08
661,6	320		350	1,09	0,10
1332,4	200		243	1,22	0,10
59,6	3700	100	3807	1,03	0,02
121,9	5000		4975	1,00	0,02
661,6	1600		1593	1,00	0,03
1332,4	1000		1032	1,03	0,04
59,6	7400	200	7507	1,01	0,01
121,9	10000		9952	1,00	0,01
661,6	3200		3177	0,99	0,02
1332,4	2000		2019	1,01	0,02

a - múltiplos da raiz quadrada do BG na região do pico (Tabela V)

Tabela IX - Resultados da análise dos espectros de picos simples obtidos pelo programa OMNIGAM.

Energia (keV)	Área de Referência	Múltiplos de σ^a	Área Encontrada	Razão	Erro
59,6	37	1	113 #	3,05	2,83
121,9	50		27 #	0,54	0,91
661,6	16		102 #	6,38	2,61
1332,4	10		58 #	5,80	2,49
59,6	74	2	150 #	2,03	1,42
121,9	100		178 #	1,78	1,25
661,6	32		118 #	3,69	1,31
1332,4	20		55 #	2,75	1,45
59,6	111	3	187 #	1,68	0,95
121,9	150		228 #	1,52	0,83
661,6	48		127 #	2,65	0,89
1332,4	30		78 #	2,60	0,84
59,6	148	4	224 #	1,51	0,71
121,9	200		259	1,30	0,56
661,6	64		141 #	2,20	0,67
1332,4	40		88 #	2,20	0,64
59,6	185	5	261	1,41	0,57
121,9	250		309	1,24	0,45
661,6	80		157	1,96	0,54
1332,4	50		85 #	1,70	0,59
59,6	370	10	446	1,21	0,29
121,9	500		556	1,11	0,23
661,6	160		226	1,41	0,28
1332,4	100		135 #	1,35	0,30
59,6	740	20	816	1,10	0,15
121,9	1000		1053	1,05	0,12
661,6	320		411	1,28	0,18
1332,4	200		241 #	1,20	0,19
59,6	3700	100	3776	1,02	0,03
121,9	5000		5010	1,00	0,03
661,6	1600		1676	1,05	0,04
1332,4	1000		1029	1,03	0,05
59,6	7400	200	7473	1,01	0,02
121,9	10000		9878	0,99	0,02
661,6	3200		3276	1,02	0,02
1332,4	2000		2029	1,01	0,03

a - múltiplos da raiz quadrada do BG na região do pico (Tabela V)

- picos não encontrados quando a procura foi feita sem o uso de biblioteca

A sensibilidade padrão do programa SAMPO 90 é 4 pontos. Essa sensibilidade pode ser aumentada ou diminuída de quantidades muito pequenas, mas nos casos em que o pico não é encontrado, escolheu-se diminuir a sensibilidade de 0,5 ponto de cada vez, até o pico ser encontrado. Em nenhum dos casos a sensibilidade utilizada foi inferior a 1 ponto. Os resultados do programa SAMPO 90 estão na Tabela X.

Desse modo, todos os picos menores que 10σ só foram detectados com uma sensibilidade menor que 4 pontos. Com exceção do pico de 5σ de 661,6 keV, que foi detectado com a sensibilidade padrão.

Esse programa apresentou bons resultados a partir de 20σ , com exceção do pico de 1332,4 keV que teve uma razão de 1,16. Esse resultado é muito próximo ao apresentado pelo programa VISPECT no mesmo caso.

Os valores dos erros pelo programa OMNIGAM apresentaram-se sempre maiores que os dos demais programas, devido ao modo do cálculo da incerteza, então mesmo quando os resultados foram mais próximos do esperado, o erro foi maior.

Na análise do pico de 59,5 keV, o SAMPO 90 foi o programa que teve os melhores resultados para um maior número de situações, enquanto que os outros dois programas deram resultados muito parecidos nas áreas acima de 3σ , mas ambos diferindo consideravelmente do resultado esperado.

Já na detecção dos picos de 121,9 keV, os programas SAMPO 90 e VISPECT tiveram um comportamento muito parecido, enquanto o OMNIGAM apresentou valores sistematicamente maiores que o esperado em mais de 50 contagens, nos picos com área entre 2σ e 20σ .

Tabela X - Resultados da análise dos espectros de picos simples obtidos pelo programa SAMPO 90.

Energia (keV)	Área de Referência	Múltiplos de σ^a	Área Encontrada	Razão	Erro
59,6	37	1	50,19	1,36	0,25
121,9	50		26,2	0,52	0,91
661,6	16		33,09	2,07	1,03
1332,4	10		44	4,40	0,45
59,6	74	2	82,93	1,12	0,14
121,9	100		89,58	0,90	0,24
661,6	32		52,91	1,65	0,56
1332,4	20		52,6	2,63	0,61
59,6	111	3	137,1	1,24	0,33
121,9	150		124,4	0,83	0,27
661,6	48		67,18	1,40	0,38
1332,4	30		54,53	1,82	0,46
59,6	148	4	175,4	1,19	0,25
121,9	200		182,9	0,91	0,24
661,6	64		85,18	1,33	0,30
1332,4	40		61,03	1,53	0,35
59,6	185	5	213,7	1,16	0,21
121,9	250		237	0,95	0,20
661,6	80		103,7	1,30	0,25
1332,4	50		70,55	1,41	0,29
59,6	370	10	385,1	1,04	0,05
121,9	500		491,9	0,98	0,11
661,6	160		181,4	1,13	0,13
1332,4	100		125,5	1,26	0,17
59,6	740	20	768	1,04	0,03
121,9	1000		967,3	0,97	0,06
661,6	320		327,6	1,02	0,09
1332,4	200		232,3	1,16	0,10
59,6	3700	100	3773	1,02	0,01
121,9	5000		4952	0,99	0,02
661,6	1600		1596	1,00	0,03
1332,4	1000		1048	1,05	0,04
59,6	7400	200	7509	1,01	0,01
121,9	10000		9943	0,99	0,01
661,6	3200		3210	1,00	0,02
1332,4	2000		2049	1,02	0,02

a - múltiplos da raiz quadrada do BG na região do pico (Tabela V)

Quando se analisa os resultados para os picos de 661,6 keV é possível notar que o VISPECT se destaca na detecção dos picos com áreas inferiores a 10σ , enquanto o SAMPO 90 calculou melhor as áreas, inclusive quando esta está acima de 10σ .

Em relação aos picos de 1331,4 keV, o programa VISPECT se comportou bem melhor que os demais programas.

Os resultados mostram que nenhum dos programas detecta bem picos com áreas somente duas vezes maiores que a linha de base. Os programas VISPECT e SAMPO 90 se comportam de maneira parecida na detecção dos picos com áreas entre 3 e 20σ acima do BG.

Os valores obtidos pelo OMNIGAM foram muito acima do esperado para picos pequenos, quando a detecção ocorre com a ajuda da biblioteca. O uso da biblioteca aumenta a sensibilidade mas não garante exatidão.

O programa VISPECT se comportou melhor com energias maiores que 100 keV, isso porque os resultados encontrados para as áreas dos picos de 59,6 keV foram acima das esperadas, se comparados com os resultados obtidos na detecção dos demais picos, apesar desses resultados terem sido muito próximos aos alcançados pelo programa OMNIGAM, que dessa forma apresenta a mesma dificuldade. Essa dificuldade deve estar relacionada com o perfil do BG nessa região, que é crescente.

Outro fato que nos mostra que o VISPECT atua melhor em energias acima de 100 keV, é o resultado deste se comparado com o SAMPO 90. O SAMPO 90 se destacou na baixa energia onde os demais mostraram dificuldades para a análise. Quando o pico analisado foi o de 121,9 keV, o VISPECT passa a dar resultados tão bons quanto o do SAMPO 90. Para a energia seguinte, de 661,6 keV o VISPECT já se comporta melhor na análise dos picos pequenos e no pico de maior energia o VISPECT é o programa que fornece os resultados mais próximos da área esperada.

Os três programas detectaram sem problemas os picos com mais de 100σ .

É importante ressaltar que um dos critérios utilizados na determinação do limite de detecção em medidas de radioatividade é considerar a menor concentração do elemento a ser determinado como o valor correspondente a 3 vezes o desvio padrão da área medida para a radiação de fundo (BG) na região de interesse no espectro de raios gama.

5.1. Dupletos

Na elaboração dos espectros de dupletos de intensidades iguais, a área utilizada em cada pico foi fixa e igual a 100σ , o que significa áreas de 3700, 5000, 1600 e 1000 contagens, respectivamente para ambos os picos que formam o duplete. Essa escolha ocorreu devido ao desempenho dos programas na detecção dos picos simples e porque o que se pretende testar é a detecção de picos bem definidos, que formam os dupletos em função do número de canais que separam as centróides desses picos.

Dessa forma, foi utilizado uma separação que variou entre 50 e 300% dos valores de FWHM para cada região. Os resultados obtidos estão nas Tabelas XI, XII e XIII.

Os três programas passam a encontrar os dupletos quando a separação entre as centróides é de 150% o valor da FWHM. Nesta situação, o OMNIGAM encontrou apenas os dois picos de maior energia, enquanto o VISPECT e o SAMPO90 encontraram todos os picos.

Tabela XI - Dupletos com crescente separação entre as centróides, analisados pelo programa VISPECT com a razão 1:1 e contagens múltiplas de 100σ .

Separação (FWHM)	Energia (keV)	Área de Referência	Área Encontrada	z-scores de referência	z-scores Encontrado
	59,135	3700	ND	-	-
	59,600	3700			
	121,400	5000	ND	-	-
50%	121,900	5000			
	660,875	1600	ND	-	-
	661,600	1600			
	1331,525	1000	ND	-	-
	1332,400	1000			
	58,670	3700	ND	-	-
	59,600	3700			
	120,900	5000	ND	-	-
100%	121,900	5000			
	660,150	1600	ND	-	-
	661,600	1600			
	1330,650	1000	ND	-	-
	1332,400	1000			
	58,205	3700	4004	3,53	3,12
	59,600	3700	3624	-0,88	-0,81
	120,400	5000	5064	0,64	0,49
150%	121,900	5000	4916	-0,84	-0,64
	659,425	1600	1652	0,92	0,83
	661,600	1600	1595	-0,09	-0,08
	1329,775	1000	1032	0,72	0,68
	1332,400	1000	1001	0,02	0,02
	57,740	3700	3921	2,57	2,23
	59,600	3700	3749	0,57	0,51
	119,900	5000	5083	0,83	0,63
200%	121,900	5000	4976	-0,24	-0,18
	658,700	1600	1651	0,90	0,84
	661,600	1600	1621	0,37	0,34
	1328,900	1000	982	-0,40	-0,38
	1332,400	1000	1013	0,29	0,28
	56,810	3700	3706	0,07	0,06
	59,600	3700	3761	0,71	0,59
	118,900	5000	4972	-0,28	-0,21
300%	121,900	5000	5040	0,40	0,31
	657,250	1600	1622	0,39	0,36
	661,600	1600	1634	0,60	0,55
	1327,150	1000	1042	0,94	0,89
	1332,400	1000	1063	1,41	1,34

ND: detectou o duplete como um único pico ou não detectou nada.

Tabela XII - Dupletos com crescente separação entre as centróides, analisados pelo programa OMNIGAM com a razão 1:1 e contagens múltiplas de 100σ .

Separação (FWHM)	Energia (keV)	Área de Referência	Área Encontrada	z-scores de referência	z-scores encontrado
	59,135	3700	ND	-	-
	59,600	3700			
	121,400	5000	ND	-	-
50%	121,900	5000			
	660,875	1600	ND	-	-
	661,600	1600			
	1331,525	1000	ND	-	-
	1332,400	1000			
	58,670	3700	ND	-	-
	59,600	3700			
	120,900	5000	ND	-	-
100%	121,900	5000			
	660,150	1600	ND	-	-
	661,600	1600			
	1330,650	1000	ND	-	-
	1332,400	1000			
	58,205	3700	ND	-	-
	59,600	3700			
	120,400	5000	ND	-	-
150%	121,900	5000			
	659,425	1600	418	-20,90	-13,08
	661,600	1600	518	-19,13	-8,13
	1329,775	1000	448	-12,34	-7,83
	1332,400	1000	436	-12,61	-7,61
	57,740	3700	1409	-26,63	-16,17
	59,600	3700	2975	-8,43	-5,28
	119,900	5000	2024	-29,76	-19,87
200%	121,900	5000	4154	-8,46	-5,65
	658,700	1600	1104	-8,77	-5,78
	661,600	1600	1230	-6,54	-4,26
	1328,900	1000	708	-6,53	-4,54
	1332,400	1000	781	-4,90	-3,55
	56,810	3700	3366	-3,88	-2,56
	59,600	3700	3650	0,58	0,41
	118,900	5000	4715	-2,85	-1,90
300%	121,900	5000	4887	-1,13	-0,75
	657,250	1600	1622	0,38	0,31
	661,600	1600	1659	1,04	0,73
	1327,150	1000	981	-0,42	-0,28
	1332,400	1000	1058	1,30	1,07

ND: detectou o duplete como um único pico ou não detectou nada.

Tabela XIII - Dupletos com crescente separação entre as centróides, analisados pelo programa SAMPO 90 com a razão 1:1 e contagens múltiplas de 100σ .

Separação (FWHM)	Energia (keV)	Área de Referência	Área Encontrada	z-scores de referência	z-scores encontrado
	59,135	3700	ND	-	-
	59,600	3700			
	121,400	5000	ND	-	-
50%	121,900	5000			
	660,875	1600	ND	-	-
	661,600	1600			
	1331,525	1000	ND	-	-
	1332,400	1000			
	58,670	3700	ND	-	-
	59,600	3700			
	120,900	5000	ND	-	-
100%	121,900	5000			
	660,150	1600	ND	-	-
	661,600	1600			
	1330,650	1000	ND	-	-
	1332,400	1000			
	58,205	3700	3740	0,46	0,47
	59,600	3700	3740	0,46	0,47
	120,400	5000	4990	-0,10	-0,11
150%	121,900	5000	4910	-0,90	-0,91
	659,425	1600	1580	-0,35	-0,40
	661,600	1600	1580	-0,35	-0,41
	1329,775	1000	1020	0,45	0,51
	1332,400	1000	1030	0,67	0,77
	57,740	3700	3750	0,58	0,60
	59,600	3700	3770	0,81	0,84
	119,900	5000	4950	-0,50	-0,52
200%	121,900	5000	4900	-1,00	-1,04
	658,700	1600	1630	0,53	0,61
	661,600	1600	1630	0,53	0,61
	1328,900	1000	1020	0,45	0,51
	1332,400	1000	1040	0,89	1,02
	56,810	3700	3800	1,16	1,31
	59,600	3700	3790	1,05	1,15
	118,900	5000	4970	-0,30	-0,32
300%	121,900	5000	4930	-0,70	-0,75
	657,250	1600	1600	0,00	0,00
	661,600	1600	1620	0,35	0,40
	1327,150	1000	1040	0,89	1,07
	1332,400	1000	1050	1,12	1,24

ND: detectou o dupletos como um único pico ou não detectou nada.

Através da análise dos “z-scores” é possível afirmar que o VISPECT apresenta problemas na detecção do primeiro pico do duplete de mais baixa energia, tanto para a separação de 150% como para a de 200%. Os próximos ele detectou normalmente.

O OMNIGAM só detecta razoavelmente os picos na situação onde eles estão mais afastados uns dos outros (300%) e mesmo assim apresenta valores muito ruins. Para todos os dupletos com separação de 150 e 200% o programa subestimou as áreas dos picos.

O SAMPO 90 ao contrário, apresenta boa detecção para todos os picos dos dupletos a partir de 150%.

O teste, agora, se faz nos espectros criados artificialmente que possuem dupletos formados por picos com intensidades diferentes, com uma separação fixa de 2 keV, ou 8 canais, com o pico menos intenso, situado uma vez do lado de menor energia do pico predominante e outra do lado de maior energia. A razão das áreas entre os picos cobrem a faixa desde 10:10 até 0,5:10 e inversamente de 10:10 até 10:0,5.

Nas Tabelas XIV, XV, XVI, XVII, XVIII e XIX encontram-se os resultados dos dupletos onde os picos de intensidade variável se encontram do lado de menor energia em relação ao pico predominante.

O VISPECT detectou todos os dupletos até uma razão de 6:10 com erros relativos inferiores a 10%. Conforme a razão entre os picos que formam o duplete aumentou, os dupletos de maior energia foram deixando de ser encontrados.

Dessa forma, com uma razão de 4:10 o duplete de maior energia não foi mais detectado. Na razão 2:10 os dois dupletos de maior energia não são detectados, sendo que o primeiro pico do duplete de menor energia apresenta um erro maior que

10%. Na razão 1:10 a situação permanece a mesma e com a razão de 0,5:10 nenhum duplete é detectado.

Tabela XIV - Dupletos com o pico menos intenso localizado do lado de menor energia, analisados pelos programas VISPECT.

Separação (FWHM)	Energia (keV)	Razão	Área Esperada	Área Encontrada	Erro Rel. (%)
215%	57,6	10:10	7400	7666	3,59
	59,6		7400	7383	0,23
200%	119,9		10000	10102	1,02
	121,9		10000	9940	0,60
138%	659,6		3200	3255	1,72
	661,6		3200	3182	0,56
114%	1330,4		2000	2100	5,00
	1132,4		2000	1920	4,00
215%	57,6	8:10	5920	6165	4,14
	59,6		7400	7390	0,14
200%	119,9		8000	8114	1,43
	121,9		10000	9932	0,68
138%	659,6		2560	2622	2,42
	661,6		3200	3178	0,69
114%	1330,4		1600	1684	5,25
	1132,4		2000	1936	3,20
215%	57,6	6:10	4440	4680	5,41
	59,6		7400	7392	0,11
200%	119,9		6000	6086	1,43
	121,9		10000	9947	0,53
138%	659,6		2160	2235	3,47
	661,6		3200	3162	1,19
114%	1330,4		1200	1241	3,42
	1132,4		2000	1981	0,95

Tabela XV - Dupletos com o pico menos intenso localizado do lado de menor energia, analisados pelos programas VISPECT.

Separação (FWHM)	Energia (keV)	Razão	Área Esperada	Área Encontrada	Erro Rel. (%)
215%	57,6	4:10	2960	3191	7,80
	59,6		7400	7397	0,04
200%	119,9		4000	4071	1,78
	121,9		10000	9960	0,40
138%	659,6		1280	1342	4,84
	661,6		3200	3176	0,75
114%	1330,4		800	ND	-
	1132,4		2000		
215%	57,6	2:10	1480	1719	16,15
	59,6		7400	7392	0,11
200%	119,9		2000	2064	3,20
	121,9		10000	9964	0,36
138%	659,6		640	ND	-
	661,6		3200		
114%	1330,4		400	ND	-
	1132,4		2000		
215%	57,6	1:10	740	980	32,43
	59,6		7400	7383	0,23
200%	119,9		1000	1070	7,00
	121,9		10000	9961	0,39
138%	659,6		320	ND	-
	661,6		3200		
114%	1330,4		200	ND	-
	1132,4		2000		
215%	57,6	0,5:10	370	ND	-
	59,6		7400		
200%	119,9		500	ND	-
	121,9		10000		
138%	659,6		160	ND	-
	661,6		3200		
114%	1330,4		100	ND	-
	1132,4		2000		

ND: detectou o dupletos como um único pico ou não detectou nada.

Tabela XVI - Dupletos com o pico menos intenso localizado do lado de menor energia, analisado pelo programa OMNIGAM.

Separação (FWHM)	Energia	Razão	Área de Referência	sem biblioteca		com biblioteca	
				Área Encontrada	Erro Rel. (%)	Área Encontrada	Erro Rel. (%)
215%	57,6	10:10	7400	3085	58,31	7313	1,18
	59,6		7400	6210	16,08	7358	0,57
200%	119,9		10000	3904	60,96	9990	0,10
	121,9		10000	7573	24,27	9875	1,25
138%	659,6		3200	ND	-	3188	0,38
	661,6		3200			3273	2,28
114%	1330,4		2000	ND	-	2041	2,05
	1132,4		2000			2033	1,65
215%	57,6	8:10	5920	2553	56,88	5864	0,95
	59,6		7400	6233	15,77	7355	0,61
200%	119,9		8000	2450	69,38	7997	0,04
	121,9		10000	7780	22,20	9879	1,21
138%	659,6		2560	ND	-	2556	0,16
	661,6		3200			3259	1,84
114%	1330,4		1600	ND	-	1624	1,50
	1132,4		2000			2037	1,85
215%	57,6	6:10	4440	1717	61,33	4385	1,24
	59,6		7400	6588	10,97	7351	0,66
200%	119,9		6000	1223	79,62	6038	0,63
	121,9		10000	7951	20,49	9883	1,17
138%	659,6		2160	ND	-	2154	0,28
	661,6		3200			3259	1,84
114%	1330,4		1200	ND	-	1217	1,42
	1132,4		2000			2045	2,25

ND: detectou o dupletos como um único pico ou não detectou nada.

Tabela XVII - Dupletos com o pico menos intenso localizado do lado de menor energia, analisado pelo programa OMNIGAM.

Separação (FWHM)	Energia	Razão	Área de Referência	sem biblioteca		com biblioteca	
				Área Encontrada	Erro Rel. (%)	Área Encontrada	Erro Rel. (%)
215%	57,6	4:10	2960	876	70,41	2928	1,08
	59,6		7400	6757	8,69	7348	0,70
200%	119,9		4000	872	78,20	4032	0,80
	121,9		10000	8316	16,84	9885	1,15
138%	659,6		1280	ND	-	1287	0,55
	661,6		3200			3240	1,25
114%	1330,4		800	ND	-	820	2,50
	1132,4		2000			2044	2,20
215%	57,6	2:10	1480	ND	-	1444	2,43
	59,6		7400			7343	0,77
200%	119,9		2000	ND	-	2039	1,95
	121,9		10000			9889	1,11
138%	659,6		640	ND	-	667	4,22
	661,6		3200			3227	0,84
114%	1330,4		400	ND	-	404	1,00
	1132,4		2000			2056	2,80
215%	57,6	1:10	740	ND	-	726	1,89
	59,6		7400			7340	0,81
200%	119,9		1000	ND	-	1049	4,90
	121,9		10000			9894	1,06
138%	659,6		320	ND	-	355	10,94
	661,6		3200			3232	1,00
114%	1330,4		200	ND	-	190	5,00
	1132,4		2000			2066	3,30
215%	57,6	0,5:10	370	ND	-	350	5,41
	59,6		7400			7339	0,82
200%	119,9		500	ND	-	570	14,00
	121,9		10000			9901	0,99
138%	659,6		160	ND	-	195	21,88
	661,6		3200			3230	0,94
114%	1330,4		100	ND	-	89	11,00
	1132,4		2000			2069	3,45

ND: detectou o dupletos como um único pico ou não detectou nada.

Tabela XVIII - Dupletos com o pico menos intenso localizado do lado de menor energia, analisados pelos programas SAMPO 90.

Separação (FWHM)	Energia	Razão	Área de Referência	Área Encontrada	Erro Rel. (%)
215%	57,6	10:10	7400	7468	0,92
	59,6		7400	7504	1,41
200%	119,9		10000	9920	0,80
	121,9		10000	9871	1,29
138%	659,6		3200	3195	0,16
	661,6		3200	3195	0,16
114%	1330,4		2000	2035*	1,75
	1132,4		2000	2017*	0,85
215%	57,6	8:10	5920	5975	0,93
	59,6		7400	7505	1,42
200%	119,9		8000	7920	1,00
	121,9		10000	9869	1,31
138%	659,6		2560	2551	0,35
	661,6		3200	3190	0,31
114%	1330,4		1600	1621*	1,31
	1132,4		2000	2032*	1,60
215%	57,6	6:10	4440	4480	0,90
	59,6		7400	7504	1,41
200%	119,9		6000	5941	0,98
	121,9		10000	9884	1,16
138%	659,6		2160	2142	0,83
	661,6		3200	3189	0,34
114%	1330,4		1200	1213*	1,08
	1132,4		2000	2044*	2,20

* - Dupletos adicionados manualmente.

Tabela XIX - Dupletos com o pico menos intenso localizado do lado de menor energia, analisados pelos programas SAMPO 90.

Separação (FWHM)	Energia	Razão	Área de Referência	Área Encontrada	Erro Rel. (%)
215%	57,6	4:10	2960	2988	0,95
	59,6		7400	7509	1,47
200%	119,9		4000	3942	1,45
	121,9		10000	9895	1,05
138%	659,6		1280	1266	1,09
	661,6		3200	3194	0,19
114%	1330,4		800	819,4*	2,42
	1132,4		2000	2023*	1,15
215%	57,6	2:10	1480	1485	0,34
	59,6		7400	7502	1,38
200%	119,9		2000	1964	1,80
	121,9		10000	9908	0,92
138%	659,6		640	643,5*	0,55
	661,6		3200	3187*	0,41
114%	1330,4		400	407*	1,75
	1132,4		2000	2027*	1,35
215%	57,6	1:10	740	747,2	0,97
	59,6		7400	7507	1,45
200%	119,9		1000	975,8	2,42
	121,9		10000	9913	0,87
138%	659,6		320	315,3*	1,47
	661,6		3200	3193*	0,22
114%	1330,4		200	212,4*	6,20
	1132,4		2000	2063*	3,15
215%	57,6	0,5:10	370	372,9	0,78
	59,6		7400	7504	1,41
200%	119,9		500	506,8	1,36
	121,9		10000	9936	0,64
138%	659,6		160	173*	8,13
	661,6		3200	3218*	0,56
114%	1330,4		100	111,5*	11,50
	1132,4		2000	2054*	2,70

* - Dupleto adicionado manualmente.

O programa OMNIGAM, utilizando a biblioteca criada com as 8 energias, conseguiu encontrar todos os dupletos, independentemente das intensidades. Sendo que, para a razão de 0,5:10 ele passa a apresentar erros maiores que 10% para o pico menos intenso nos três dupletos de maior energia.

O SAMPO 90, contando com uma análise interativa, conseguiu identificar todos os dupletos com erros relativos menores que 10%, tendo só uma exceção na razão de 0,5:10, o pico menos intenso do duplete de maior energia, onde obteve um erro de 11,5%.

As Tabelas XX, XXI, XXII, XXIII, XXIV e XXV apresentam os resultados dos dupletos onde os picos de intensidade variável se encontram do lado de maior energia em relação ao pico predominante.

O VISPECT apresentou um erro alto na razão 10:6 para o pico menos intenso do duplete de maior energia. Na razão 10:4 o erro também passou os 10%, mas agora para os dois picos do duplete de maior energia. A partir da razão 10:2 o VISPECT não detectou os dois dupletos de maior energia e na razão 10:0,5 ele não detectou nenhum duplete.

O OMNIGAM teve problemas na detecção do duplete da região de 660 keV, estranhamente na razão 10:8. Em seguida, para as razões 10:2, 10:1 e 10:0,5 ele apresentou erros maiores que 10% para o pico menos intenso da região de 660 keV.

Na razão 10:0,5 ele também apresentou um erro relativo maior que 10% para o pico de menor intensidade do duplete de maior energia.

O SAMPO 90 só apresentou erros maiores que 10% na razão 10:0,5 e só nos picos menos intensos das duas energias mais baixas.

Tabela XX - Dupletos com o pico menos intenso localizado do lado de maior energia, analisados pelos programas VISPECT.

Separação (FWHM)	Energia (keV)	Razão	Área Esperada	Área Encontrada	Erro Rel. (%)
215%	57,6	10:8	7400	7661	3,53
	59,6		5920	5935	0,25
200%	119,9		10000	10096	0,96
	121,9		8000	7949	0,64
138%	659,6		3200	3241	1,28
	661,6		2560	2563	0,12
114%	1330,4		2000	2106	5,30
	1332,4		1600	1517	5,19
215%	57,6	10:6	7400	7654	3,43
	59,6		4440	4476	0,81
200%	119,9		10000	10100	1,00
	121,9		6000	5954	0,77
138%	659,6		3200	3249	1,53
	661,6		2160	2153	0,32
114%	1330,4		2000	2091	4,55
	1332,4		1200	2227	85,58
215%	57,6	10:4	7400	7638	3,22
	59,6		2960	3024	2,16
200%	119,9		10000	10093	0,93
	121,9		4000	3976	0,60
138%	659,6		3200	3224	0,75
	661,6		1280	1302	1,72
114%	1330,4		2000	1128	43,60
	1332,4		800	1682	110,25

Tabela XXI - Dupletos com o pico menos intenso localizado do lado de maior energia, analisados pelos programas VISPECT.

Separação (FWHM)	Energia (keV)	Razão	Área Esperada	Área Encontrada	Erro Rel. (%)
215%	57,6	10:2	7400	7635	3,18
	59,6		1480	1557	5,20
200%	119,9		10000	10096	0,96
	121,9		2000	2010	0,50
138%	659,6		3200	ND	-
	661,6		640		
114%	1330,4		2000	ND	-
	1332,4		400		
215%	57,6	10:1	7400	7624	3,03
	59,6		740	829	12,03
200%	119,9		10000	10091	0,91
	121,9		1000	1016	1,60
138%	659,6		3200	ND	-
	661,6		320		
114%	1330,4		2000	ND	-
	1332,4		200		
215%	57,6	10:0,5	7400	ND	-
	59,6		370		
200%	119,9		10000	ND	-
	121,9		500		
138%	659,6		3200	ND	-
	661,6		160		
114%	1330,4		2000	ND	-
	1332,4		100		

ND: detectou o duplete como um único pico.

Tabela XXII - Dupletos com o pico menos intenso localizado do lado de maior energia, analisados pelo programa OMNIGAM.

Separação (FWHM)	Energia	Razão	Área de Referência	sem biblioteca		com biblioteca	
				Área Encontrada	Erro Rel. (%)	Área Encontrada	Erro Rel. (%)
215%	57,6	10:8	7400	4179	43,53	7317	1,12
	59,6		5920	4936	16,62	5911	0,15
200%	119,9		10000	4552	54,48	9981	0,19
	121,9		8000	5841	26,99	7881	1,49
138%	659,6		3200	ND	-	2639	17,53
	661,6		2560			1621	36,68
114%	1330,4		2000	ND	-	2054	2,70
	1332,4		1600			1614	0,88
215%	57,6	10:6	7400	4615	37,64	7323	1,04
	59,6		4440	3641	18,00	4431	0,20
200%	119,9		10000	5217	47,83	9975	0,25
	121,9		6000	4111	31,48	5921	1,32
138%	659,6		3200	ND	-	3191	0,28
	661,6		2160			2214	2,50
114%	1330,4		2000	ND	-	2055	2,75
	1332,4		1200			1209	0,75
215%	57,6	10:4	7400	5103	31,04	7325	1,01
	59,6		2960	2342	20,88	2973	0,44
200%	119,9		10000	6400	36,00	10004	0,04
	121,9		4000	2720	32,00	3970	0,75
138%	659,6		3200	ND	-	3207	0,22
	661,6		1280			1366	6,72
114%	1330,4		2000	ND	-	2054	2,70
	1332,4		800			812	1,50

ND: detectou o duplete como um único pico.

Tabela XXIII - Dupletos com o pico menos intenso localizado do lado de maior energia, analisados pelo programa OMNIGAM.

Separação (FWHM)	Energia	Razão	Área de Referência	sem biblioteca		com biblioteca	
				Área Encontrada	Erro Rel. (%)	Área Encontrada	Erro Rel. (%)
215%	57,6	10:2	7400	6048	18,27	7328	0,97
	59,6		1480	1009	31,82	1489	0,61
200%	119,9		10000	7790	22,10	10007	0,07
	121,9		2000	1323	33,85	1994	0,30
138%	659,6		3200	ND	-	3205	0,16
	661,6		640			748	16,88
114%	1330,4		2000	ND	-	2059	2,95
	1332,4		400			397	0,75
215%	57,6	10:1	7400	6520	11,89	7328	0,97
	59,6		740	461	37,70	772	4,32
200%	119,9		10000	8790	12,10	10006	0,06
	121,9		1000	588	41,20	1007	0,70
138%	659,6		3200	ND	-	3202	0,06
	661,6		320			419	30,94
114%	1330,4		2000	ND	-	2061	3,05
	1332,4		200			185	7,50
215%	57,6	10:0,5	7400	6745	8,85	7329	0,96
	59,6		370	207	44,05	396	7,03
200%	119,9		10000	9251	7,49	10005	0,05
	121,9		500	243	51,40	518	3,60
138%	659,6		3200	ND	-	3206	0,19
	661,6		160			264	65,00
114%	1330,4		2000	ND	-	2058	2,90
	1332,4		100			85	15,00

ND: detectou o duplete como um único pico.

Tabela XXIV - Dupletos com o pico menos intenso localizado do lado de maior energia, analisados pelos programas SAMPO 90.

Separação (FWHM)	Energia	Razão	Área de Referência	Área Encontrada	Erro Rel. (%)
215%	57,6	10:8	7400	7475	1,01
	59,6		5920	6012	1,55
200%	119,9		10000	9922	0,78
	121,9		8000	7872	1,60
138%	659,6		3200	3193	0,22
	661,6		2560	2555	0,20
114%	1330,4		2000	2048*	2,40
	1332,4		1600	1604*	0,25
215%	57,6	10:6	7400	7477	1,04
	59,6		4440	4515	1,69
200%	119,9		10000	9935	0,65
	121,9		6000	5892	1,80
138%	659,6		3200	3204	0,13
	661,6		2160	2150	0,46
114%	1330,4		2000	2043*	2,15
	1332,4		1200	1200*	0,00
215%	57,6	10:4	7400	7474	1,00
	59,6		2960	3022	2,09
200%	119,9		10000	9937	0,63
	121,9		4000	3889	2,78
138%	659,6		3200	3203	0,09
	661,6		1280	1276	0,31
114%	1330,4		2000	2016*	0,80
	1332,4		800	812,3*	1,54

* - Dupletos adicionados manualmente.

Tabela XXV - Dupletos com o pico menos intenso localizado do lado de maior energia, analisados pelos programas SAMPO 90.

Separação (FWHM)	Energia	Razão	Área de Referência	Área Encontrada	Erro Rel. (%)
215%	57,6	10:2	7400	7476	1,03
	59,6		1480	1512	2,16
200%	119,9		10000	9945	0,55
	121,9		2000	1911	4,45
138%	659,6		3200	3185*	0,47
	661,6		640	636,1*	0,61
114%	1330,4		2000	2025*	1,25
	1332,4		400	401,2*	0,30
215%	57,6	10:1	7400	7475	1,01
	59,6		740	772,9	4,45
200%	119,9		10000	9938	0,62
	121,9		1000	917,9	8,21
138%	659,6		3200	3184*	0,50
	661,6		320	315,8*	1,31
114%	1330,4		2000	2038*	1,90
	1332,4		200	189,5*	5,25
215%	57,6	10:0,5	7400	7526*	1,70
	59,6		370	409,9*	10,78
200%	119,9		10000	9951*	0,49
	121,9		500	442*	11,60
138%	659,6		3200	3177*	0,72
	661,6		160	158,3*	1,06
114%	1330,4		2000	2020*	1,00
	1332,4		100	93,49*	6,51

* - Dupletos adicionados manualmente.

5.2. Amostras Geológicas

Foram feitas duas análises, na primeira utilizou-se o material geológico de referência GS-N (IWG - GIT) como amostra e posteriormente usou-se o granito G-94.

Foi realizada a análise de 17 elementos traço, utilizando-se a análise por ativação com nêutrons comparativa. Foram apresentados primeiramente os elementos que fazem parte do grupo das terras raras depois o Tório, e o Urânio e na sequência, os outros elementos de interesse em ordem crescente de número atômico.

Para a primeira análise, os valores de concentração obtidos por meio dos três programas estão nas Figuras 6, 7 e 8 onde a concentração dos elementos foi normalizada em relação aos valores certificados (GOVINDARAJU, 1995).

Com o uso do VISPECT na análise dos espectros foi possível determinar a concentração de 12 elementos dentro da faixa entre 0,95 e 1,05, ou seja, a mais ou menos 5% do valor certificado. Se a faixa for ampliada até 10% todos os elementos estão presentes.

A análise dos espectros com o programa OMNIGAM possibilitou determinar 12 elementos dentro da faixa de mais ou menos 5% do valor certificado, mas mesmo quando a faixa se estende a 10%, dois elementos restam de fora, são eles o Nd e o Tb. Outro destaque são os grandes erros apresentados por Yb e o U.

Ao utilizar o SAMPO 90 na análise dos espectros, apenas dois elementos não estão a apenas 5% do valor certificado, mas mesmo quando a tolerância passa a 10% o Tb continua fora.

É possível notar que nos três casos o La ficou dentro da faixa de 10% mas fora da faixa de 5% e o erro na contagem do Cs foi muito alta, também nos três casos. O Tb mostrou-se difícil de quantificar corretamente, resultando num erro grande para o

VISPECT e valores superiores a 10% do valor certificado para o OMNIGAM e para o SAMPO.

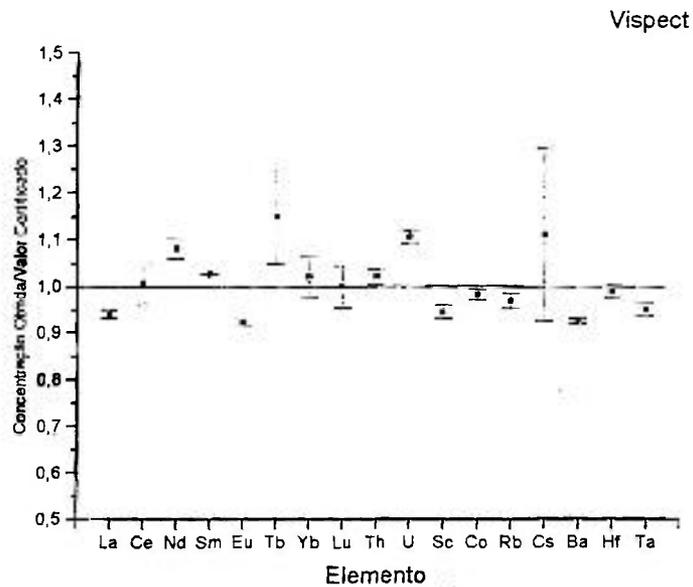


Figura 6 - Diagramas normalizados das concentrações obtidas pelo programa VISPECT em relação ao valor certificado para o padrão GS-N.

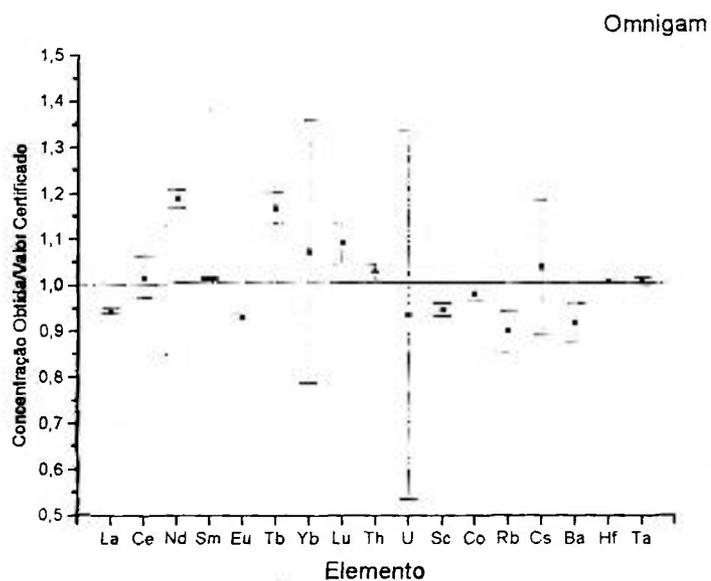


Figura 7 - Diagramas normalizados das concentrações obtidas pelo programa OMNIGAM em relação ao valor certificado para o padrão GS-N.

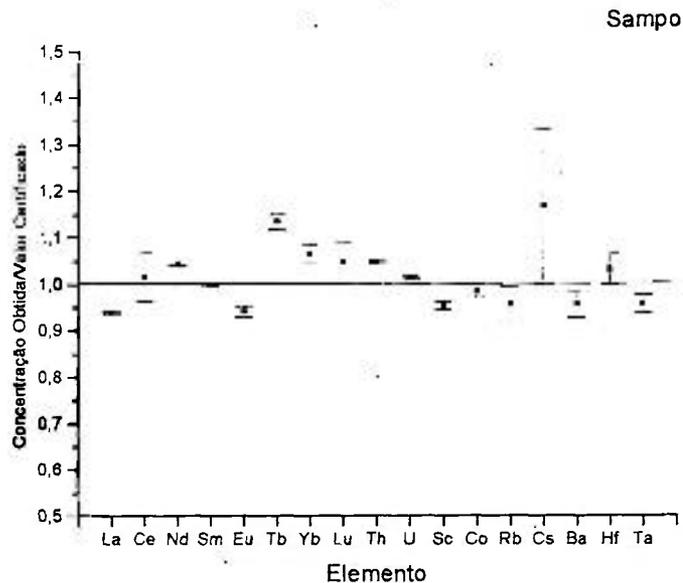


Figura 8 - Diagramas normalizados das concentrações obtidas pelo programa SAMPO 90 em relação ao valor certificado para o padrão GS-N.

Na segunda avaliação foi utilizado o granito G-94, material utilizado para teste de proficiência, como amostra. A mesma análise e os mesmos elementos foram detectados através da mesma técnica. A apresentação dos elementos foi idêntica a anterior.

Os valores de concentração obtidos por meio dos três programas estão nas Figuras 9, 10 e 11 onde a concentração dos elementos foi normalizada em relação aos valores certificados (THOMPSON *et al.*, 1996).

Com o uso do VISPECT na análise dos espectros foi possível determinar a concentração de 15 elementos dentro da faixa de mais ou menos 5% do valor certificado. Se a faixa for ampliada até 10% todos os elementos estão presentes. O Cs foi novamente destaque pelo erro apresentado.

A análise dos espectros com o programa OMNIGAM possibilitou determinar 13 elementos dentro da faixa de mais ou menos 5% do valor certificado, mas mesmo quando a faixa se estende a 10%, um elemento resta de fora, o Yb. O U continuou a apresentar um grande erro.

Ao utilizar o SAMPO 90 na análise dos espectros, apenas dois elementos não estão a apenas 5% do valor certificado, e quando a tolerância passa a 10% todos estão presentes. Só o Cs apresentou um erro um pouco maior.

No geral os programas apresentaram resultados muito próximos principalmente para os cinco primeiros elementos (La, Ce, Nd, Sm e Eu), e para o Sc, Co e Rb.

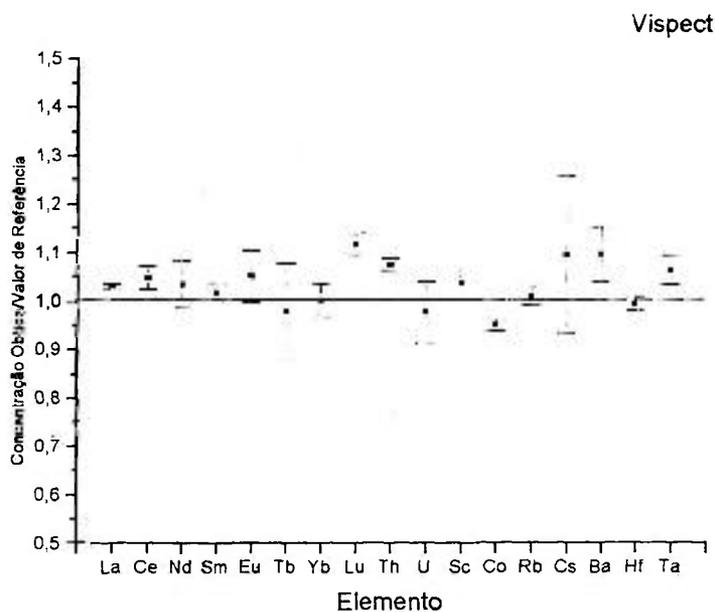


Figura 9 - Diagramas normalizados das concentrações do G-94 obtidas pelo programa VISPECT em relação ao valor certificado.

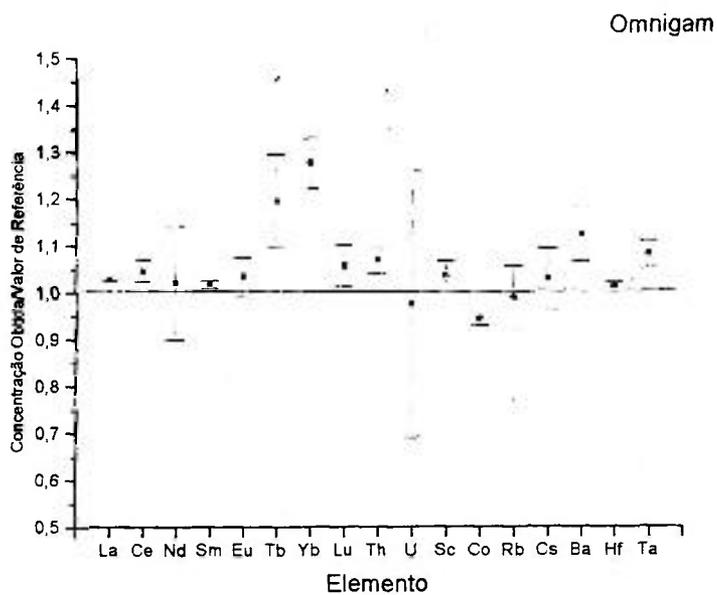


Figura 10 - Diagramas normalizados das concentrações do G-94 obtidas pelo programa OMNIGAM em relação ao valor certificado.

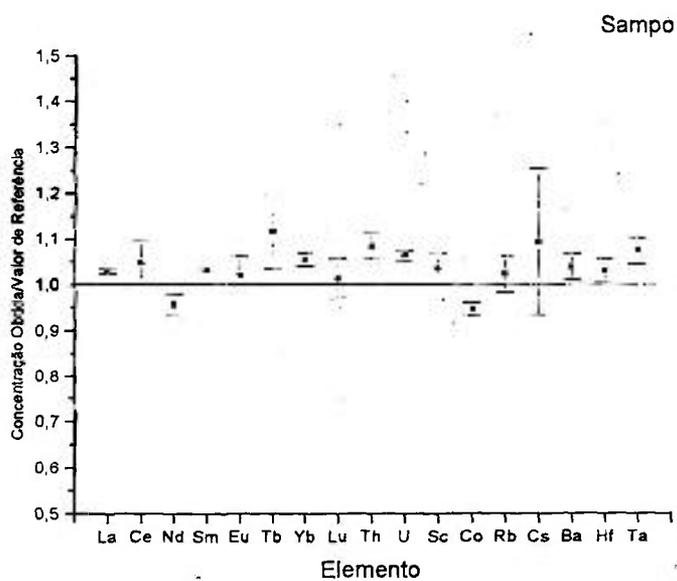


Figura 11 - Diagramas normalizados das concentrações do G-94 obtidas pelo programa SAMPO 90 em relação ao valor certificado.

CAPÍTULO 6. CONCLUSÃO

Na análise dos picos simples com intensidades que variam entre 1 e 200σ , ficou demonstrado que nenhum dos programas detecta bem picos com áreas somente duas vezes maiores que a linha de base. O programa VISPECT se comporta de maneira equivalente ou melhor do que o OMNIGAM em todas as faixas de energia estudadas. Comparando-o ao SAMPO 90, na detecção dos picos com áreas entre 3 e 20σ , o VISPECT mostra dificuldade na região abaixo de 100 keV, mas seu desempenho melhora com o aumento da energia e ele apresenta os melhores resultados na análise do pico de maior energia. Os três programas detectaram sem problemas os picos com mais de 100σ .

Na análise dos dupletos com intensidades iguais e crescente separação entre as centróides dos picos que formam o duplete, os programas VISPECT e SAMPO 90 obtiveram resultados muito próximos com uma vantagem para o SAMPO 90, pois o VISPECT apresentou dificuldades na quantificação do primeiro pico do duplete de menor energia. O VISPECT já havia mostrado dificuldades na detecção de picos de baixa energia no teste anterior.

O OMNIGAM se mostrou pouco confiável na detecção de dupletos se não é utilizada a biblioteca de radioisótopos.

No teste dos espectros de dupletos formados por picos com intensidades diferentes, o VISPECT se comportou de maneira homogênea, nas duas situações, tanto como pico menos intenso do lado de menor energia como no de maior energia em relação ao pico predominante. Ficou claro que conforme o pico menos intenso diminuiu o VISPECT foi deixando de detectar os dupletos de maior energia para posteriormente não detectar nenhum dos dupletos nos casos mais extremos.

O programa OMNIGAM mostrou como com a utilização da biblioteca ele pode ser útil na detecção, mesmo de baixas intensidades, já que ele apresentou raramente erros relativos maiores que 10% para todas as razões maiores que 10:0,5 ou 0,5:10, mas isso também pode ser considerado uma limitação do programa, no caso de se analisar amostras desconhecidas.

O SAMPO 90 contando com uma detecção interativa apresentou erros maiores que 10% apenas nas situações mais difíceis onde a razão era de 10:0,5 e 0,5:10. Mesmo nos casos em que as centróides foram adicionadas manualmente, independentemente da energia em que se trabalhou, os erros foram sempre inferiores a 10%.

Na avaliação de espectros reais, tanto na detecção do material de referência GS-N (IWG - GIT), como na do granito G-94, o programa VISPECT obteve resultados tão bons ou melhores que seus concorrentes.

CAPÍTULO 7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AARNIO, P. A.; ROUTTI, J. T.; SANDBERG, J. V. MicroSAMPO - Personal computer based gamma spectrum analysis system. **J. Radioanal. Nucl. Chem., Articles**, v.124, n.2, p.457-466, 1988.
- AARNIO, P. A.; HAKULINEN, T. T.; ROUTTI, J. T. Expert system for nuclide identification and interpretation of gamma-spectrum analysis. **J. Radioanal. Nucl. Chem., Articles**, v.160, n.1, p.245-252, 1992a.
- AARNIO, P. A.; NIKKINEN, J. T.; ROUTTI, J. T. SAMPO 90 high resolution interactive gamma-spectrum analysis including automation with macros. **J. Radioanal. Nucl. Chem., Articles**, v.160, n.1, p.289-296, 1992b.
- AARNIO, P. A.; NIKKINEN, J. T.; ROUTTI, J. T. Gamma spectrum analysis including NAA with SAMPO for Windows. **J. Radioanal. Nucl. Chem., Articles**, v.193, n.1, p.179-185, 1995a.
- AARNIO, P. A.; ALA-HEIKKILÄ, J. J.; HAKULINEN, T. T.; ROUTTI, J. T. Expert system for nuclide identification in gamma spectrum analysis. **J. Radioanal. Nucl. Chem., Articles**, v.193, n.2, p.219-227, 1995b.

ALEKLETT, J.; LILJENZIN, O.; LOVELAND, W. DECHAOS - A program for automatic or interactive analysis of gamma-ray spectra. **J. Radioanal. Nucl. Chem., Articles**, v.193, n.1, p.187-194, 1995.

BAEDECKER, P. A. Digital methods of photopeak integration in activation analysis. **Anal. Chem.**, v.43, n.3, p.405-410, 1971.

BAEZA, A.; CORVO, G.; DEL RIO, M.; MIRO, C.; PANIAGUA, J. M. The program ESPEC for the analysis of gamma spectra of environmental samples. **Appl. Radiat. Isot.**, v.43, n.7, p.833-839, 1992.

BERNASCONI, G. Comunicação pessoal, 1995.

BLAAUW, M.; OSORIO FERNANDEZ, V.; van ESPEN, P.; BERNASCONI, G.; CAPOTE NOY, R.; MANH DUNG, H.; MOLLA, N. I. The 1995 IAEA intercomparison of γ -ray spectrum analysis software. **Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res.**, v.A387, p.416-432, 1997.

BLACK, W. W. Application of correlation techniques to isolate structure in experimental data. **Nucl. Instr. Meth.**, v.71, p.317-327, 1969.

BODE, P.; HOFFMAN, E. L.; LINDSTROM, R. L.; PARRY, S. J.; ROSENBERG, R. J. **Practical aspects of operating neutron activation analysis laboratory**. IAEA Tec Doc 564, Viena, 250p., 1990.

DECKER, K. M.; SANDERSON, C. G. A reevaluation of commercial IBM PC software for the analysis of low-level environmental gamma-ray spectra. **Appl. Radiat. Isot.**, v.43, n.1/2, p.323-337, 1992.

DOLNICAR, J. **Workshop on gamma-ray analysis software**. Report IAEA, Costa Rica, 1991.

- EG&G Ortec, **GELIGAM Software Module**, A30-BI, version 2.10. Oak Ridge, 1988.
- EG&G Ortec, **OMNIGAM Gamma-ray spectrum Analysis**, B30-BI, version 3.4. Oak Ridge, 1990.
- GOVINDARAJU, K. Working values with confidence limits for twenty-six CRPG, ANRT and IWG – GIT geostandards. **Geostandards Newsletter**, v.19, 1995.
- GUNNINK, R. New method for calibrating a Ge detector by using only zero to four efficiency points. **Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res.**, v.A299, p.372-376, 1990.
- HANSON, G. N. The application of trace elements to the petrogenesis of igneous rocks of granitic composition. **Earth Planet. Sci. Lett.**, v.38, p.26-43, 1978.
- HEIMLICH, P.; BEELEY, P. A.; PAGE, J. A. GAMANAL-PC: A program for gamma-ray spectrum analysis using a microcomputer. **J. Radioanal. Nucl. Chem., Articles**, v.132, n.2, p.281-291, 1989.
- HENSLEY, W. K.; LEPEL, E. A.; YULY, M. E.; ABEL, K. H. Adaptation and implementation of the RAYGUN gamma-ray analysis code on the IBM PC. **J. Radioanal. Nucl. Chem., Articles**, v.124, n.2, p.481-499, 1988.
- HEYDORN, K.; CHRISTENSEN, L. H. Verification testing of commercially available computer programs for photopeak area evaluation. **J. Radioanal. Nucl. Chem.**, v.124, p.467-480, 1988.
- HOFFMAN, E. L. Instrumental neutron activation in geoanalysis. **J. Geochem. Explor.**, v.44, p.297-319, 1992.

- INOUYE, T. Square root transform for the analysis of quantum fluctuations in spectrum data. **Nucl. Instr. and Meth.**, n.91, p.581-584, 1971.
- KIM, N. B.; KIM, Y. S.; KIM, J. K.; PARK, K. S. PIAD - A computer code for peak identification and activity determination. **J. Radioanal. Nucl. Chem., Articles**, v.125, n.2, p.403-417, 1988.
- KOLOTOV, V. P.; ATRASHKEVICH, V. V. Software ASPRO-NUC: Gamma-ray spectrometry, routine NAA, isotope identification and data management. **J. Radioanal. Nucl. Chem., Articles**, v.193, n.2, p.195-206, 1995.
- KOSKELO, M. J.; AARNIO, P. A.; ROUTTI, J. T. SAMPO80: Minicomputer program for gamma spectrum analysis with nuclide identification. **Computer Physics Communications**, v.24, p.11-35, 1981.
- KOSKELO, M. J.; MERCIER, M. T. Verification of gamma spectroscopy programs: multiplet area problems and solutions. **J. Radioanal. Nucl. Chem., Articles**, v.193, n.2, p.211-217, 1995.
- LANDSBERGER, S.; CIZEK, W. D.; DOMAGALA, P. NADA: A versatile PC based program for neutron activation analysis. **J. Radioanal. Nucl. Chem., Articles**, v.160, n.1, p.277-287, 1992.
- LANDSBERGER, S.; CIZEK, W. D.; CAMPBELL, R. H. NADA92: An automated, user-friendly program for neutron activation data analysis. **J. Radioanal. Nucl. Chem., Articles**, v.180, n.1, p.55-63, 1994.
- LIMA, F. W.; ATALLA, L. T. A simple program in "Basic" language for analysis of gamma-spectra using an on-line minicomputer. **J. Radioanal. Chem.**, v.20, p.769-777, 1974.

- LINDSTROM, D. J.; KOROTEV, R. L. TEABAGS: Computer programs for instrumental neutron activation analysis. **J. Radioanal. Chem.** v.70, n.1-2, p.439-458, 1982.
- MAJORAS, R. E.; RICHARDSON, W. M.; SEYMOUR, R. S. An object-oriented approach to evaluating multiple spectral models. **J. Radioanal. Nucl. Chem., Articles**, v.193, n.2, p.207-210, 1995.
- MALAFONTE, A. A.; PASSARO, A.; RADOVICH, M. A. **Regulus**. São Paulo, IF/USP, 1991, 34p.
- MARISCOTTI, M. A. A method for automatic identification of peaks in the presence of background and its application to spectrum analysis. **Nucl. Instr. and Meth.**, v.50, p.309-320, 1967.
- MERCIER, M. T.; KOSKELO, M. J. Verification of gamma-spectroscopy programs: accuracy and detectability. **J. Radioanal. Nucl. Chem., Articles**, v.160, n.1, p.233-243, 1992.
- NASCIMENTO FILHO, V. F.; MARQUES, D. A.; DE NADAI, E. A.; PESSENDA, L. C. R.; FERRAZ, E. S. B. Programa em Basic para microcomputador da linha Apple para interpretação de espectros de pulsos de raios gama em sistema detector de alta resolução. In: 2º Congresso Geral de Energia Nuclear, Abril 23-26, 1988, Rio de Janeiro.
- NELSON, G. W. CINA - A program for complete instrumental neutron activation analysis with a PC-type minicomputer. **J. Radioanal. Nucl. Chem., Articles**, v.114, n.2, p.231-236, 1987.
- PHILLIPS, G. W.; MARLOW, K. W. Automatic analysis of gamma-ray spectra from germanium detectors. **Nucl. Instr. and Meth.**, v.137, p.525-536, 1976.

- ROBERTSON, A., PRESTWICH, W. V., KENNETT, T. J. An automatic peak-extraction technique. **Nucl. Instr. and Meth.**, v.100, p.317-324, 1972.
- ROCCA, H. C. **Análise de espectros gama com calculadora programável.** São Paulo: 1978. (IEA-Pub-514).
- ROUTTI, J. T.; PRUSSIN, S. G. Photopeak method for the computer analysis of gamma-ray spectra from semiconductor detectors. **Nucl. Instr. and Meth.**, v.72, p.125-142, 1969.
- SANDERSON, C. G. An evaluation of commercial IBM PC software for the analysis of low-level environmental gamma-ray spectra. **Environment International**, v.14, p.379-384, 1988.
- THOMPSON, M.; POTTS, P. J.; WEBB, P. C. International Proficiency Test for Analytical Geochemistry Laboratories. Report on Round 1, p.1-13, 1996.
- VANIN, V. R. **Manual do programa Panoramix.** IF/USP; São Paulo, 1988.
- VASCONCELLOS, M. B. A.; FIGUEIREDO, A. M. G.; MARQUES, L. S.; SAIKI, M.; ARMELIN, M. J. A. Neutron activation analysis applied to the study of the composition of Brazilian geological samples. **Geochim. Brasil.**, v.4, p.125-137, 1990.
- YULE, H. P. Manual and Computerized Data Processing in Activation Analysis. In: Saadia Amiel. Non destructive Activation Analysis. Amsterdam. Elsevier Scientific Publishing, 1981. p.113-137.

ANEXO

VISPECT

Programa de visualisacao de arquivos de espectros obtidos com os diferentes programas de aquisiçao (TRACOR , NUMELEC , CANBERRA)

```
-----
$EVENT off
DIM B&(8500) , Isomet(20) , Desc$(6)
CALL AffMenu
IndexLec = Index
COLOR 14,1 : CLS
Idir$= "" : Icol% = 0 : Calin = 0 : Calon = 0 : Fltitre = 0 : Barre = 15
'
' Entre com o nome do espectro de trabalho
'
Debut:
LOCATE 12,20 : PRINT "
LOCATE 12,20 : INPUT "Nome do arquivo = ", C$
SELECT CASE IndexLec
  Case = 1
    CALL LecSpeTraCom
  Case = 2
    CALL LecSpeTraPic
  Case = 3
    CALL LecSpeCanb
  Case = 4
    CALL LecSpeNumCom
  Case = 5
    CALL LecSpeNumPic
  Case = 6
    CALL LecSpePca
  Case = 7
    CALL LecSpeCosCom
END SELECT
DATA "Help", "Marq.e", "Marq.d", "Zoom", "Init", "Calib", "Zprint", "Fill", "Erase", "Pprint"
Idroi = 0 : Igau = 0 : Kdeb = Ideb : Kfin = Ifin : Lideb = Ideb : Lifin = Ifin
GOSUB ImageDeb
$EVENT on
TIMER on : KEY on
ON TIMER (1) GOSUB Clock
FOR II = 1 TO 14 : KEY (II) on : NEXT II
ON KEY (1) GOSUB Help
ON KEY (2) GOSUB MarqZgauche
ON KEY (3) GOSUB MarqZdroite
ON KEY (4) GOSUB Zoom
ON KEY (5) GOSUB ImageDeb
ON KEY (6) GOSUB CalEner
ON KEY (7) GOSUB ImpZImage
ON KEY (8) GOSUB FillZmarq
ON KEY (9) GOSUB EraseZmarq
ON KEY (10) GOSUB ImpZonesPic
ON KEY (11) GOSUB ItFlecheH
ON KEY (12) GOSUB ItFlecheG
ON KEY (13) GOSUB ItFlecheD
ON KEY (14) GOSUB ItFlecheB
'
' Boucle d'attente des interruptions
```

```

WHILE -1
  K$ = ""
  WHILE K$ = ""
    K$ = INKEY$
  WEND
  IF K$ = CHR$(27) THEN GOSUB Sortie
  IF K$ = CHR$(16) THEN GOSUB RechPicsAuto
  IF K$ = CHR$(19) THEN GOSUB MarkSom
  IF K$ = CHR$(5) THEN GOSUB EffSom
  IF K$ = CHR$(1) THEN GOSUB TranAss
WEND
$EVENT off

```

S/P Interruption Fin

Efface le spectre en traitement et demande si l'on veut traiter un nouveau spectre ou sortir du programme

```

Sortie:
TIMER off
FOR II = 1 to 14 : KEY(II) off : NEXT II
SCREEN 0 : COLOR 14,1 : CLS
LOCATE 12,20
INPUT "Deseja analisar outro espectro ? (S/N)",O$
IF O$ = "S" OR O$ = "s" GOTO Debut
END

```

S/P Rappel des commandes

```

Help:
SCREEN 0 : COLOR 14,1 : CLS
OPEN "i",#1,"c:\prog\vispenb.hlp"
WHILE NOT EOF(1)
  INPUT #1,Ligne$
  PRINT Ligne$
WEND
CLOSE #1
LOCATE 24,20
PRINT "Tecla algo para continuar!"
WHILE NOT INSTAT
WEND
CALL ChgtEcran(Ideb,Ifin)
RETURN

```

S/P It Marquage Index gauche

```

MarqZgauche:
Igau = 1 : Imaq = 2 : Cur = Kdeb
CALL MarqEffCurs
Kdeb = Icurs
Call RafAffInt
RETURN

```

S/P It Marquage Index droit

```

MarqZdroite:
Idroi = 1 : Imaq = 2 : Cur = Kfin
CALL MarqEffCurs

```

```
Kfin = Icurs
CALL RafAffInt
RETURN
```

```

S/P It Zoom
```

```
Zoom:
If Kdeb > Kfin THEN SWAP Kdeb , Kfin
Ideb = Kdeb : Ifin = Kfin
CALL ChgtEcran (Ideb,Ifin)
RETURN
```

```

S/P It Retour au spectre initial
```

```
ImageDeb:
CLS
Ideb = Lideb : Ifin = Lfin
Call SpectreInitial
RETURN
```

```

S/P It Calibration en Energie ou en Resolution
```

```
CalEner:
KEY (11) OFF : KEY (14) OFF
CALL AffMenuCalib
KEY (11) ON : KEY (14) ON
SELECT CASE Index
  CASE 1
    CALL ChgtEcran(Ideb,Ifin) : CALL CalibEnerg
  CASE 2
    CALL CalibResol
  CASE 3 TO 4
    CLS : LOCATE 12,20 : INPUT "Nome do arquivo para calibraçao = ", Cal$
    IF Index = 3 THEN
      IF Calon = 0 THEN
        M$ = "Calibraçao Inexistente !!!"
        CALL Message(M$)
      ELSE
        CALL SaveCal
      END IF
    ELSE
      CALL LecCal
    END IF
  END SELECT
GOSUB ImageDeb
RETURN
```

```

S/P It Impression des contenus
de l'image visualisee sur l'ecran
```

```
ImpZImage:
LPRINT
LPRINT "Espectro = ",C$
LPRINT
IF Calon >= 1 THEN LPRINT "Slope = "; : LPRINT USING "###.###";Slope; : LPRINT " Offset = "; :
LPRINT USING "###.##"; Offset; : LPRINT " R2 = "; : LPRINT USING "###.###";R2 : LPRINT
FOR II = Ideb TO Ifin STEP 10
LPRINT USING "#####";II;
LPRINT " .";
```

```

FOR K = 0 to 8
IF (II+k) > Ifin THEN LPRINT : RETURN
LPRINT USING "#####"; FNcanal&((II+K),2,0);
NEXT K
LPRINT USING "#####"; FNcanal&((II+9),2,0)
NEXT II
LPRINT
RETURN

```

S/P It Mise en rouge de la zone marquee

```

FillZmarq:
FOR II = Kdeb TO Kfin
B&(II) = FNcanal&(II,3,0)
NEXT II
CALL ChgtEcran (Ideb,Ifin)
RETURN

```

S/P It Effacement de la couleur rouge
entre les marqueurs

```

EraseZmarq:
FOR II = Kdeb TO Kfin
B&(II) = FNcanal&(II,4,0)
NEXT II
CALL ChgtEcran (Ideb,Ifin)
RETURN

```

S/P It Impression de l'integration
des zones marqueees

```

ImpZonesPic:
SCREEN 0 : COLOR 14,1 : : CLS
LOCATE 12,17 : INPUT "Desvio padrao, % de incerteza (1,2 ou 3) = ";Sig%
CLS
LOCATE 12,25 : PRINT "Impressao de resultados"
IF Lt = 0 THEN Lt = 1000
LPRINT spc(15);C$;" desde o canal ";Ideb;" ate o canal ";Ifin
LPRINT
IF Fltitre = 1 THEN
LPRINT
LPRINT " Contagem - inicio... ";Dat$;" ";MID$(Heure$,1,2);" ":";MID$(Heure$,3,2)
LPRINT
END IF
IF Fltitre = 2 THEN
LPRINT " Descricao: ";Desc$(1)
LPRINT " ";Desc$(2)
LPRINT " ";Desc$(3)
LPRINT
LPRINT " Contagem - inicio... ";Desc$(4)
LPRINT " aquisicao: ";Desc$(5)
LPRINT
END IF
LPRINT " Tempo total ="; : LPRINT USING "#####.#";Rt;
LPRINT " segundos"
LPRINT " Tempo vivo ="; : LPRINT USING "#####.#";LT;
LPRINT " segundos"
IF Fltitre = 2 THEN
LPRINT

```

```

        LPRINT "   Responsavel: ";Desc$(0)
    END IF
    LPRINT
    LPRINT " Pk It Energia   Area   BG Resol Canal Cini LP Cps ";
    LPRINT USING "#";Sig%;
    LPRINT "S% Fit"
    LPRINT
    'tron
    Flag = 0 : Sum = 0 : Cmax = 0 : NbSommets = 0 : NoPic = 0
    FOR Il = Ideb TO Ifin
    SELECT CASE (INT(FNcanal&(Il,1,0)) AND &B1 )
        CASE = 0
            IF Flag = 0 THEN EXIT SELECT
            ' Determination de la pente du bruit de fond
            Fi = Il-1
            Y1 = (FNcanal&((Id-1),2,0) + FNcanal&(Id,2,0) + FNcanal&((Id+1),2,0))/3
            Y2 = (FNcanal&((Fi-1),2,0) + FNcanal&(Fi,2,0) + FNcanal&((Fi+1),2,0))/3
            A1 = (Y1-Y2)/(Id-Fi)
            B1 = Y1 - A1*Id
            OldFi = Fi
            IF NbSommets <= 1 THEN
                GOSUB TraiPicSimple
            ELSE
                Npic = 1
                FOR K = 1 TO (NbSommets-1)
                    ContVallee = 2^24
                    FOR J = Isommet(K) TO Isommet(K+1)
                        IF FNcanal&(J,2,0) < ContVallee THEN
                            ContVallee = FNcanal&(J,2,0)
                            Ivallee = J
                        END IF
                    NEXT J
                    Ecart = ContVallee-(Ivallee*A1+B1)
                    IF Ecart < SQR(FNcanal&(Isommet(K),2,0)) AND Ecart <
SQR(FNcanal&(Isommet(K+1),2,0)) THEN
                        Y1 = Id*A1+B1 : Y2 = ContVallee
                        IF ContVallee-(Ivallee*A1+B1) < 0 THEN
                            A1 = (ContVallee-(OldFi*A1+B1))/(Ivallee-OldFi)
                            B1 = ContVallee-A1*Ivallee
                        END IF
                        Fi = Ivallee
                        IF Npic > 1 THEN
                            CALL Multiplet (Id,Fi)
                        ELSE
                            GOSUB TraiPicSimple
                        END IF
                        Npic = 1 : Id = Fi
                    ELSE
                        INCR Npic
                    END IF
                NEXT K
                Fi = OldFi : Y1 = Id*A1+B1 : Y2 = Fi*A1+B1
                IF Npic > 1 THEN
                    CALL Multiplet (Id,Fi)
                ELSE
                    GOSUB TraiPicSimple
                END IF
            END IF
            Flag = 0 : Sum = 0 : Cmax = 0 : NbSommets = 0

```

```

CASE = 1
  IF Flag = 0 THEN Id = Il
  INCR Flag
  Sum = Sum + FNcanal&(Il,2,0)
  IF (INT(FNcanal&(Il,1,1)) AND &B10) = &B10 THEN
    INCR NbSommets
    Isommet(NbSommets) = Il
  END IF
  IF (FNcanal&(Il,2,0)) > Cmax THEN Cmax = FNcanal&(Il,2,0)
END SELECT
NEXT Il
'troff
CALL ChgtEcran(Ideb,Ifin)
RETURN
'
'                               S/P Traitement des pics simples
'
TraiPicSimple:
'tron
CALL IntZone (Id,Fi,1)
Erreur = SQR(Bgnd*2+Aire)*100*Sig%/Aire
CALL ResAbsiPic (Id,Fi,1)
It = 0
CALL ImpRes(NoPic,It,Absi,Aire,Bgnd,Resol,Id,Fi,Erreur,Lt)
LPRINT
'troff
RETURN
'
'                               Procedure "Impression des resultats"
'
SUB ImpRes(NoPic,It,Absi,Aire,Bgnd,Resol,Id,Fi,Erreur,Lt)
SHARED Slope,Offset
INCR NoPic
LPRINT USING "###"; NoPic;It;
LPRINT USING "#####.##";Absi*Slope+Offset;
LPRINT USING "#####";Aire;Bgnd;
LPRINT USING "###.##";Resol;
LPRINT USING "#####.##";Absi;
LPRINT USING "#####";Id;
LPRINT USING "#####";Fi-Id+1;
LPRINT USING "###.###";Aire/Lt;
LPRINT USING "###.##";Erreur;
END SUB
'
'                               S/P It Fleche haute
'
ItFlecheH:
IF Imax = 2097152 THEN Imax = 4
Imax = FIX(Imax*2)
CALL ChgtEcran (Ideb,Ifin)
RETURN
'
'                               S/P It fleche gauche
'                               Deplacement du curseur gauche
'
ItFlecheG:
IF Icurs - Clic <= Ideb - 1 THEN
  EXIT IF
ELSEIF Idir$ = "g" OR Idir$ = "" THEN

```



```

FOR II = Id TO Fi
  IF (INT(FNcanal&(II,1,1)) AND &B10) = &B10 THEN
    Ksomet = II+1
    EXIT FOR
  END IF
NEXT II
Ener = Ksomet*Slope + Offset
Lmh = (Ro*(1 + Kres*SQR(Ener)))/Slope
IF Id < OldFi THEN Id = OldFi + 1
IF (Ksomet - Id + 1) > CINT(3*Lmh) THEN Id = Ksomet - CINT(2*Lmh)

```

Controle de la fin de zone pic

```

FOR II = Fi TO Id STEP -1
  IF (INT(FNcanal&(II,1,1)) AND &B10) = &B10 THEN
    Ksomet = II+1
    EXIT FOR
  END IF
NEXT II
Ener = Ksomet*Slope + Offset
Lmh = (Ro*(1 + Kres*SQR(ener)))/Slope
IF (Fi - Ksomet + 1) > CINT(3*Lmh) THEN Fi = Ksomet + CINT(2*Lmh)
IF (Fi - Id) > NcCorrel/2 THEN
  SomCan = 0 : Som = 0 : Ipic = Ipic + 1
  ' Mise en surbrillance des zones pic
  FOR II = Id TO Fi
    B&(II) = FNcanal&(II,3,0)
    SomCan = SomCan + SQR(FNcanal&(II,2,0))
    Som = Som + FNcanal&(II,2,0)
  NEXT II
  OldFi = Fi
  SomCan = SomCan - ((SQR(MoyAmont+MoyAval)/2)*(Fi-Id+1))
  ' Test pour eliminer les fronts Compton
  Rapport = SomCan/SomCorrel
  ' Si test positif, on efface la surbrillance de la zone
  IF Rapport > 2 THEN
    SomNette = Som - ((MoyAmont+MoyAval)/2)*(Fi-Id+1)
    Trapeze = Som - SomNette
    Sy = (200*SQR(SomNette + 2*Trapeze))/SomNette
    IF Sy < 0 OR Sy > 100 OR Rapport > 5 OR Ipic = 1 THEN
      FOR II = Id TO Fi
        B&(II) = FNcanal&(II,4,0)
        B&(II) = FNcanal&(II,4,1)
      NEXT II
    END IF
  END IF
ELSE
  FOR II = Id TO Fi
    B&(II) = FNcanal&(II,4,1)
  NEXT II
END IF
FIZdeb = 0 : FIZfin = 0 : SomCorrel = 0
END IF
OldCanalCorrel = CanalCorrel
NEXT J
FIZdeb = 0 : FIZfin = 0
' Boucle de controle pour determiner les petits pics masques par les grands pics
FOR J = Ideb + NcCorrel*2 TO Ifin - NcCorrel*2
  IF (INT(FNcanal&(J,1,0)) AND &B1) = &B1 AND FIZdeb = 0 THEN FIZdeb = 1 : Id = J

```

```

NEXT I
RESTORE
IF Imax = 8 THEN WINDOW (Ideb,0)-(Ifin,5*LOG(Imax)) ELSE WINDOW (Ideb,0)-(Ifin,Imax)
VIEW (10,70)-(629,320),11,1
IF Icurs <= Ideb OR Icurs >= Ifin THEN Icurs = CINT(Ideb+((Ifin-Ideb)/2))
FOR I = Ideb TO Ifin
Flag = 0
IF (INT(FNcanal&(I,1,0)) AND &B1) = &B1 THEN Flag = 1
    SELECT CASE FNcanal&(I,2,0)
    CASE = 0
        EXIT SELECT
    CASE ELSE
        IF Imax = 8 THEN
            IF Flag = 1 THEN LINE (I,LOG(FNcanal&(I,14,0)))-(I,0),4 ELSE
PSET (I,LOG(FNcanal&(I,2,0))),15
            IF (INT(FNcanal&(I,1,1)) AND &B10) = &B10 THEN
                CIRCLE (I,LOG(FNcanal&(I,5,0))),(Ifin-Ideb)/500
            END IF
        ELSE
            IF Flag = 1 THEN LINE (I,FNcanal&(I,2,0))-(I,0),4 ELSE PSET
(I,FNcanal&(I,2,0)),9
            IF (INT(FNcanal&(I,1,1)) AND &B10) = &B10 THEN
                CIRCLE (I,FNcanal&(I,5,0))),(Ifin-Ideb)/500
            END IF
        END IF
    END SELECT
NEXT I
IF Calin = 1 THEN CALL RaffAffCalEner : EXIT SUB
LOCATE 1,1 : FOR I= 1 TO 320 : PRINT " " : NEXT I
LOCATE 1,25 : PRINT "Espectro " ; C$
IF Fltitre = 1 THEN LOCATE 1,60 : PRINT Titre$
LOCATE 3,1 : PRINT "Cini =" ; : PRINT USING "#####";Ideb;
LOCATE 3,12 : PRINT " Ymax=" ;
LOCATE 3,24
IF Imax = 8 THEN PRINT " Log " ; ELSE PRINT USING "#####";Imax;
LOCATE 3,33 : PRINT "Cursor =" ; : PRINT USING "#####";Icurs
LOCATE 3,52 : PRINT "Conteudo="
LOCATE 4,1 : PRINT "Cfin=" ; : PRINT USING "#####";Ifin;
LOCATE 4,33 : PRINT "Energia =" ;
LOCATE 4,42
IF Calon = 0 THEN PRINT " NC" ; ELSE PRINT USING "#####";(Icurs*Slope+Offset);
IF Imax = 8 THEN Yinc = LOG(Imax)/40 ELSE YINC = Imax/200
Acurs = Icurs
CALL RafCurs
IF Idroi = 0 OR Igau = 0 THEN EXIT SUB
CALL RafAffInt
END SUB
'
'
' Procedure d'effacement ou de
' marquage d'un index
'
SUB MarqEffCurs
SHARED Imaq, Cur, Yinc, Imax, B&()
IF Imax = 8 AND FNcanal&(Cur,2,0) <> 0 THEN
    Ydeb = LOG(FNcanal&(Cur,2,0)) + Yinc
ELSE
    Ydeb = FNcanal&(Cur,2,0) + Yinc
END IF
Yfin = Ydeb + Yinc*10

```

Procédure d'étalonnage en énergie

```
SUB CalibEnerg
SHARED Calin,Icurs,Slope,Offset,R2,Calon,Ideb,Ifin
S = 0 : Sx = 0 : Sy = 0 : Sx2 = 0 : Sxy = 0 : Sy2 = 0
Calin = 1 : Calon = 0
CALL RaffAffCalEnerg
KEY (11) OFF : KEY (12) OFF : KEY (13) OFF : KEY (14) OFF
DO
  Ener$="" : Z$ = ""
  WHILE Z$ <> CHR$(13)
    Z$ = ""
    WHILE Z$ = ""
      $EVENT on
      Z$ = INKEY$
      $EVENT off
    WEND
    W = 0
    IF LEN(Z$) = 2 THEN
      W = 1000 + ASC(RIGHT$(Z$,1))
      IF W = 1072 THEN GOSUB ItFlecheB
      IF W = 1080 THEN GOSUB ItFlecheH
      IF W = 1075 THEN GOSUB ItFlecheG
      IF W = 1077 THEN GOSUB ItFlecheD
    ELSE
      SELECT CASE ASC(Z$)
      CASE = 8
        Ener$ = MID$(Ener$,1,LEN(Ener$)-1)
        LOCATE 3,26 : PRINT " "
        LOCATE 3,26 : PRINT Ener$
      CASE ELSE
        Ener$ = Ener$ + Z$
        LOCATE 3,26 : PRINT Ener$
      END SELECT
    END IF
  WEND
  IF Ener$ = CHR$(13) THEN EXIT LOOP
  Ene = VAL(Ener$)
  S = S + 1
  Sx = Sx + Icurs
  Sy = Sy + Ene
  Sx2 = Sx2 + (Icurs*Icurs)
  Sxy = Sxy + (Icurs*Ene)
  Sy2 = Sy2 + (Ene*Ene)
  LOCATE 3,26 : PRINT " "
LOOP UNTIL Ener$ = chr$(13)
KEY (11) ON : KEY (12) ON : KEY (13) ON : KEY (14) ON
Slope = (Sxy - (Sx*Sy/S))/(Sx2 - (Sx*Sx/S))
Offset = Sy/S - Slope*Sx/S
R2 = ((Sxy - (Sx*Sy/S))^2)/((Sx2 - (Sx*Sx/S))*(Sy2 - (Sy*Sy/S)))
Calin = 0 : Calon = 1
END SUB
```

Procédure de lecture d'un spectre
CANBERRA

```
SUB LecSpeCanb
DIM DYNAMIC A$(8)
```

```

SHARED c$,Ideb,Ifin,Fltitre,Rt,Lt,B&()
Ifin = 0
OPEN "r",#1,c$,32
FIELD #1, 32 AS DUMMY1$
GET #1 , 1
FIELD #1,16 AS Dummy2$,4 AS Lt$,4 AS Rt$,8 AS DUMMY3$
GET #1, 2
Rt = CVL(Rt$)/100
Lt = CVL(Lt$)/100
FIELD #1, 32 AS DUMMY4$
GET #1 , 3
FIELD #1, 32 AS DUMMY5$
GET #1 , 4
FOR Lop% = 0 TO 7
    FIELD #1 , (Lop%*4) AS Offset$,4 AS A$(Lop%)
NEXT Lop%
Ican% = 0
I% = 4
WHILE NOT EOF(1)
    GET #1 , I% + 1
    FOR J% = 0 TO 7
        B&(Ican%) = CVL(A$(J%))
        INCR Ican%
    NEXT J%
    INCR I%
WEND
CLOSE #1
WHILE -1
    IF Ican% >= 8191 THEN Ican% = 8191 : EXIT LOOP
    IF Ican% >= 4095 THEN Ican% = 4095 : EXIT LOOP
    IF Ican% >= 2047 THEN Ican% = 2047 : EXIT LOOP
    IF Ican% >= 1023 THEN Ican% = 1023 : EXIT LOOP
WEND
Ideb = 0 : Ifin = Ican% : Fltitre = 0
ERASE A$
END SUB

```

Procédure de lecture d'un spectre
 IPEN en format I*4

```

SUB LecSpeTraPic
DIM DYNAMIC A$(8)
SHARED C$,Ideb,Ifin,Fltitre,Rt,Lt,Dat$,Heure$,B&()
OPEN "r",#1,C$,32
FIELD #1,8 AS Dummy1$,4 AS Rt$,4 AS Lt$,8 AS Da$,4 AS Ti$,4 AS Dummy2$
GET #1 , 1
Rt = CVL(Rt$)/50
Lt = CVL(Lt$)/50
Dat$ = Da$
Heure$ = Ti$
FOR Lop% = 0 TO 7
    FIELD #1 , (Lop%*4) AS Offset$,4 AS A$(Lop%)
NEXT Lop%
Ican% = 0
I% = 1
WHILE NOT EOF(1)
    GET #1 , I% + 1
    FOR J% = 0 TO 7
        B&(Ican%) = CVL(A$(J%))

```



```

NEXT J%
NEXT I%
CLOSE #1
OPEN "r",#1,C$,1      ' Lecture calibration en energie
S = 0 : Sx = 0 : Sy = 0 : Sx2 = 0 : Sxy = 0 : Sy2 = 0
FIELD #1, 1 as Pca$
Decal = 48
FOR I = 0 to 14
  FOR J = 0 TO 1
    GET #1 , Decal
    Lo = VAL(HEX$(ASC(Pca$)))
    GET #1 , Decal+1
    Mid1 = VAL(HEX$(ASC(Pca$)))
    GET #1 , Decal+2
    Mid2 = VAL(HEX$(ASC(Pca$)))
    GET #1 , Decal+3
    Mid3 = VAL(HEX$(ASC(Pca$)))
    GET #1 , Decal+4
    Hi = VAL(HEX$(ASC(Pca$)))
    GET #1 , Decal+5
    Exposant = VAL(HEX$(ASC(Pca$)))
    Decal = Decal+6
    Valeur(J) =
(Hi/10+Mid3/1000+Mid2/100000+Mid1/10000000+Lo/1000000000)*10^Exposant
  NEXT J
  IF Valeur(1) <> 0 THEN
    S = S + 1
    Sx = Sx + Valeur(0)
    Sy = Sy + Valeur(1)
    Sx2 = Sx2 + (Valeur(0)^2)
    Sxy = Sxy + (Valeur(1)*Valeur(0))
    Sy2 = Sy2 + (Valeur(1)^2)
  ELSE
    EXIT FOR
  END IF
NEXT I
IF S > 1 THEN
  Slope = (Sxy - (Sx*Sy/s))/(Sx2 - (Sx*Sx/S))
  Offset = Sy/S - Slope*Sx/S
  R2 = ((Sxy - (Sx*Sy/S))^2)/((Sx2 - (Sx*Sx/S))*(Sy2 - (Sy*Sy/S)))
  Calon = 1
ELSE
  Calon = 0
END IF
CLOSE #1
Ideb = 0 : Ifin = Ncan%-1
END SUB
'
'          Procedure de lecture D'un spectre COSYNUS
'
SUB LecSpeCosCom
SHARED C$,Ideb,Ifin,Fltitre,B&()
OPEN "i",#1 ,C$
S% = 0
WHILE NOT EOF(1)
  INPUT #1 , N$
  FOR J = 1 TO LEN(N$)
    IF MID$(N$,J,1) = "." THEN EXIT FOR
  NEXT J

```

```

Ican% = VAL(MID$(N$,1,J-1))
L% = INT(LEN(N$)/9)
  FOR I = 0 TO L%-1
    B&(Ican%) = VAL(MID$(N$,J+1+I*9,8))
    INCR Ican% : INCR S%
  NEXT I
WEND
CLOSE #1
Ideb = Ican%-S% : Ifin = Ican% - 1 : Flitrite = 0
END SUB
'
'
'      Fonction a quadruple action selon le n de Nfonction%
'      1 - Permet d'obtenir l'octet de poids fort
'            d'un canal ( octet d'etat )
'      2 - Permet de masquer l'octet de poids fort
'            d'un canal et donc d'obtenir son contenu
'      3 - Permet d'activer un bit d'etat de l'octet
'            de poids fort selon la variable Nbit% (0 ... 7)
'      4 - Permet de deactiver un bit d'etat de l'octet
'            de poids fort selon la variable Nbit% (0 ... 7)
'
'      I = n du canal de travail
'
DEF FNcanal& (I,Nfonction%,Nbit%)
LOCAL Decal&,Octetfort%
Decal& = 16777216      ' 2^24
Octetfort% = INT(B&(I)/Decal&) ' Decalage de 24 bits ... droite
SELECT CASE Nfonction%
  Case 1
    FNcanal& = CLNG(Octetfort%)          ' Octet p.fort
  Case 2
    FNcanal& = B&(I) - CLNG(Octetfort%)*Decal&  ' Contenu
  Case 3
    Octetfort% = Octetfort% OR INT(2^Nbit%)      ' Activation bit
    FNcanal& = FNcanal&(I,2,0) + CLNG(Octetfort%)*Decal&
  Case 4
    Octetfort% = Octetfort% AND NOT(INT(2^Nbit%)) ' Deactivation bit
    FNcanal& = FNcanal&(I,2,0) + CLNG(Octetfort%)*Decal&
END SELECT
END DEF
'
'
'      Procedure d'affichage du menu
'      "Fichiers visualiser"
'
SUB AffMenu
SHARED Index
COLOR 15,1
N = 7 : Oldindex = 1 : Index = 1
DIM DYNAMIC Choi$(N)
Choi$(1) = "TFR      formato [R*6]"
Choi$(2) = "ORTEC   formato [I*4]"
Choi$(3) = "CANBERRA formato [ASYSTANT]"
Choi$(4) = "NUMELEC  formato [COM]"
Choi$(5) = "NUMELEC  formato [LPS]"
Choi$(6) = "INSTN   formato [PCA]"
Choi$(7) = "COSYNUS  formato [COM]"
CLS
PRINT : PRINT "          Origem do espectro a analisar"
CALL ChoixMenu(Choi$(N),N,Oldindex,Index)
ERASE Choi$

```

END SUB

Procédure de choix dans le menu

```
SUB ChoixMenu(Choi$(1),N,Oldindex,Index)
COLOR 14,1
FOR I = 1 to N
    LOCATE 5+2*I,28 : PRINT Choi$(I)
NEXT I
COLOR 15,4 : LOCATE 5+2*Oldindex,28 : PRINT Choi$(Oldindex)
K$ = ""
WHILE K$ <> CHR$(13)
    K$ = ""
    WHILE K$ = ""
        K$ = INKEY$
    WEND
    IF LEN(K$) = 2 THEN W = 1000+ASC(RIGHT$(K$,1))
    IF W = 1080 THEN INDEX = Index + 1
    IF W = 1072 THEN INDEX = Index - 1
    IF Index < 1 THEN Index = N
    IF Index > N THEN Index = 1
    COLOR 14,1 : LOCATE 5+2*Oldindex,28 : PRINT Choi$(Oldindex)
    COLOR 15,4 : LOCATE 5+2*Index,28 : PRINT Choi$(Index)
    Oldindex = Index : W = 0
WEND
```

END SUB

Procédure d'ajustement d'un pic sur une gaussienne

```
SUB Gauss (Ind,Inf)
SHARED Slope,S,Absi,Chi2,Resol,FIgauss,B&()
DIM DYNAMIC A(1:3,1:3),D(1:3),Y(Ind:Inf)
FOR I = 1 TO 3 ' Initialisations
    A(1,I) = 0
    A(2,I) = 0
    A(3,I) = 0
    D(I) = 0
NEXT I
' Determination de la pente du bruit de fond
Y1 = (FNcanal&((Ind-1),2,0) + FNcanal&(Ind,2,0) + FNcanal&((Ind+1),2,0))/3
Y2 = (FNcanal&((Inf-1),2,0) + FNcanal&(Inf,2,0) + FNcanal&((Inf+1),2,0))/3
A1 = (Y1-Y2)/(Ind-Inf)
B1 = Y1 - A1*Ind
' Calcul des contenus des canaux soustraits du bruit de fond
Rmax = 0
FOR I = Ind TO Inf
    Y(I) = FNcanal&(I,2,0) - (A1*I+B1)
    IF Y(I) > Rmax THEN Rmax = Y(I) : Kmax = I
NEXT I
' Recherche de Ki et de Ks
I = Ind : Rmax = Rmax/10
WHILE Y(I) <= Rmax
    Ki = I : INCR I
WEND
WHILE Y(I) >= Rmax
    INCR I : Ks = I
    IF I = Inf THEN EXIT LOOP
WEND
' Chargement des tableaux
```

```

I = 0
FOR J = Ki to Ks
  INCR I
  A(1,1) = A(1,1) + I^2
  A(2,1) = A(2,1) + I^3
  A(3,1) = A(3,1) + I^4
  A(1,2) = A(1,2) + I
  IF (Y(J) <= 0 ) THEN Y(J) = 10^-30
  D(1) = D(1) + LOG(Y(J))
  D(2) = D(2) + LOG(Y(J))*I
  D(3) = D(3) + LOG(Y(J))*I^2
NEXT J
A(2,2) = A(1,1)
A(3,2) = A(2,1)
A(2,3) = A(1,2)
A(3,3) = A(2,2)
N = Ks-Ki+1
A(1,3) = N
' Calcul des determinants
Da = D(1)*A(2,2)*A(3,3)+A(1,2)*A(2,3)*D(3)+A(1,3)*D(2)*A(3,2)-A(1,3)*A(2,2)*D(3)-
A(1,2)*D(2)*A(3,3)-D(1)*A(2,3)*A(3,2)
Db = A(1,1)*D(2)*A(3,3)+D(1)*A(2,3)*A(3,1)+A(1,3)*A(2,1)*D(3)-A(1,3)*D(2)*A(3,1)-
D(1)*A(2,1)*A(3,3)-A(1,1)*A(2,3)*D(3)
Dc = A(1,1)*A(2,2)*D(3)+A(1,2)*D(2)*A(3,1)+D(1)*A(2,1)*A(3,2)-D(1)*A(2,2)*A(3,1)-
A(1,2)*A(2,1)*D(3)-A(1,1)*D(2)*A(3,2)
Dd = A(1,1)*A(2,2)*A(3,3)+A(1,2)*A(2,3)*A(3,1)+A(1,3)*A(2,1)*A(3,2)-A(1,3)*A(2,2)*A(3,1)-
A(1,2)*A(2,1)*A(3,3)-A(1,1)*A(2,3)*A(3,2)
' Valeur des variables
IF Dd = 0 THEN
  LOCATE 5,1 : Print "Nao possivel o ajustamento da gaussiana"
  FIGauss = 0 : Absi = Kmax : Resol = -1 : S = -1
ELSE
  X1 = Da/Dd : X2 = Db/Dd : X3 = Dc/Dd
  Alpha = -X1
  Xzero = -X2/(2*X1)
  A2 = EXP(X3-(X2^2)/(4*X1))
  Absi = Ki - 1 + Xzero
  IF Alpha > 0 THEN
    Resol = 2*SQR(0.693147/Alpha)
    S = 2.5066*A2*SQR(1/(2*Alpha))
  ELSE
    Resol = -1 : S = -1 : FIGauss = 0
  END IF
  Chi2 = 0 : Et = 0 : I = 0 : EcarTypeEst = 0
  FOR J = Ki TO Ks
    INCR I
    Yp = A2*EXP(-Alpha*(I-Xzero)^2)
    Et = Et + (Yp - Y(J))^2
    Chi2 = (((Yp-Y(J))^2)/Y(J)) + Chi2
    EcarTypeEst = EcarTypeEst + (Yp-Y(J))^2
  NEXT J
  IF N > 3 THEN
    Chi2 = Chi2/(N-3)
    Et = SQR(Et/(N-3))
    Et = Et*100/S
    EcarTypeEst = SQR(EcarTypeEst/(N-3))
  END IF
  Resol = Resol*Slope
  FIGauss = 1

```

```

END IF
ERASE A,D,Y
END SUB

```

Procedure de calibration en resolution

```

SUB CalibResol
SHARED Calon,Slope,Offset,Resol,Absi,Ideb,Ifin,Ro,Kres,B&()
IF Calon = 0 THEN
  M$ = "Calibration en Energie Inexistante"
  CALL Message (M$)
  EXIT SUB
ELSE
  S = 0 : Sx = 0 : Sy = 0 : Sx2 = 0 : Sxy = 0 : Sy2 = 0 : Sum = 0
  FOR I = Ideb TO Ifin
    SELECT CASE (INT(FNcanal&(I,1,0)) AND &B1)
      CASE = 0
        IF Sum = 0 THEN EXIT SELECT
        Fi = I - 1
        CALL ResAbsiPic (Id,Fi,0)
        Rene = SQR(Absi*Slope+Offset)
        S = S + 1
        Sx = Sx + Rene
        Sy = Sy + Resol
        Sx2 = Sx2 + (Rene*Rene)
        Sxy = Sxy + (Rene*Resol)
        Sy2 = Sy2 + (Resol*Resol)
        Sum = 0
      CASE = 1
        IF Sum = 0 THEN Id = I
        Sum = Sum + FNcanal&(I,2,0)
    END SELECT
  NEXT I
  IF S < 2 THEN LOCATE 5,1 : PRINT "Nao ha um numero suficiente de picos marcados !!!" : EXIT SUB
  Kres = (Sxy-(Sx*Sy/S))/(Sx2-(Sx*Sx/S))
  Ro = Sy/S - Kres*Sx/S : Kres = Kres/Ro ' pour Res.Th = Ro(1+Kres*Ener)
  R2res = ((Sxy -(Sx*Sy/S))^2)/((Sx2-(Sx*Sx/S))*(Sy2 - (Sy*Sy/S)))
  Calon = 2
END IF
END SUB

```

Procedure d'affichage du menu calibration

```

SUB AffMenuCalib
SHARED Index
N = 4 : Oldindex = 1 : Index = 1
DIM DYNAMIC Choi$(N)
Choi$(1) = "Calibraçao em Energia"
Choi$(2) = "Calibraçao em Resoluçao"
Choi$(3) = "Gravar as Calibraçoes"
Choi$(4) = "Chamar as Calibraçoes"
SCREEN 0 : COLOR 14,1 : CLS
LOCATE 2,27 : PRINT "Escolha uma opçao"
CALL ChoixMenu(Choi$(),N,Oldindex,Index)
ERASE Choi$
END SUB

```

Procedure d'ecriture de la calibration

```

SUB SaveCal
SHARED Cal$,Calon,Slope,Offset,Ro,Kres
OPEN "o" , #1,Cal$
PRINT #1 ,Calon,Slope,Offset
IF Calon = 2 THEN PRINT #1 ,Ro,Kres
CLOSE #1
END SUB

```

Procédure de lecture de la calibration

```

SUB LecCal
SHARED Cal$,Calon,Slope,Offset,Ro,Kres
OPEN "i" , #1 , Cal$
INPUT #1 , Calon,Slope,Offset
IF Calon = 2 THEN INPUT #1 , Ro , Kres
CLOSE #1
END SUB

```

Procédure de rafraîchissement du texte d'étalonnage

```

SUB RaffAffCalEner
SHARED Icurs
LOCATE 1,1 : FOR I = 1 TO 320 : PRINT " "; : NEXT I
LOCATE 1,30 : PRINT "Calibraçao"
LOCATE 3,2 : PRINT "Canal = ";
LOCATE 3,10 : PRINT USING "####";Icurs
LOCATE 3,16 : PRINT "Energia = ";
END SUB

```

Procédure pour déterminer l'abscisse exacte
et la résolution d'un pic

```

SUB ResAbsiPic (Ind,Inf,Mode)
SHARED Slope,Absi,Resol,Y1,Y2,B&()
IF Mode = 0 THEN
    ' Détermination de la pente du bruit de fond
    Y1 = (FNcanal&((Ind-1),2,0) + FNcanal&(Ind,2,0) + FNcanal&((Ind+1),2,0))/3
    Y2 = (FNcanal&((Inf-1),2,0) + FNcanal&(Inf,2,0) + FNcanal&((Inf+1),2,0))/3
END IF
A1 = (Y1-Y2)/(Ind-Inf)
B1 = Y1 - A1*Ind
CALL IntZone (Ind,Inf,Mode)
Absi = FNcanexact (0.5,Ind,A1,B1)
Resol = (FNcanexact (0.75,Ind,A1,B1) - FNcanexact (0.25,Ind,A1,B1))*Slope*1.74
END SUB

```

Fonction pour déterminer le canal sommet exact

```

DEF FNcanexact (Fm,Ind,A1,B1)
Aq = 0 : I = Ind - 1
WHILE Aq < Aire*Fm
    INCR I
    Aq = Aq + FNcanal&(I,2,0) - (A1*I+B1)
WEND
Ap = Aq - (FNcanal&(I,2,0) - (A1*I+B1))
FNcanexact = (I-1) + (Aire*Fm - Ap)/(Aq - Ap) + 0.5
END DEF

```

Procedure de choix du niveau de detection des pics

```
SUB ChoiBarre
SHARED Barre
SCREEN 0 : COLOR 14,1 : CLS
LOCATE 2,18 : PRINT "Modificaf,fo do nivel atrav,s das flechas"
LOCATE 12,30 : PRINT "Nivel = "
KEY (11) OFF : KEY (14) OFF
K$ = ""
WHILE K$ <> CHR$(13)
    LOCATE 12,38 : COLOR 15,4 : PRINT USING "###";Barre
    K$ = "" : W = 0
    WHILE K$ = ""
        K$ = INKEY$
    WEND
    IF LEN(K$) = 2 THEN W = 1000+ASC(RIGHT$(K$,1))
    IF W = 1080 THEN DECR Barre
    IF W = 1072 THEN INCR Barre
WEND
KEY (11) ON : KEY (14) ON
LOCATE 2,18 : COLOR 14,1 : PRINT STRING$(42, " ")
LOCATE 12,27 : COLOR 15,4 : PRINT "Detectando os picos"
END SUB
```

Procedure d'affichage d'un message d'avertissement

```
SUB Message (M$)
SCREEN 0 : CLS
FOR J = 1 TO 10
    COLOR 14,1
    LOCATE 12,21 : PRINT M$
    DELAY 0.3
    COLOR 0,0
    LOCATE 12,21 : PRINT STRING$(LEN(M$), " ")
    DELAY 0.3
NEXT J
END SUB
```

Procedure de deconvolution des multiplets

```
SUB Multiplet (Id,Fi)
SHARED A1,B1,Slope,Offset,Ro,Kres,NoPic,Lt,B&(),Sig%
DIM DYNAMIC Absi(10),Dlmh(10),Alp(10),Azo(10),OldAbsi(10),OldAlp(10)
' Determination du nb. de pics et du nb. de canaux de la zone
Nc = 0 : Np = 0 : Jv = 3
FOR J = Id to Fi
    INCR Nc
    IF (INT(FNcanal&(J,1,1)) AND &B10) = &B10 THEN
        INCR Np
        Absi(Np) = J
        OldAbsi(Np) = Absi(Np)
        Ener = J*Slope + Offset
        Dlmh(Np) = (Ro*(1+Kres*SQR(Ener)))/(Slope*2)
        Alp(Np) = 0.69315/Dlmh(Np)^2
        OldAlp(Np) = Alp(Np)
        Azo(Np) = FNcanal&(J,2,0) - (J*A1+B1)
    END IF
NEXT J
Nx = Jv*Np
```

```

DIM DYNAMIC
A(Nc,Nx),C(Nc),B(Nc),V(Nx),T(Nx),W(Nc),Yg(Nx,Nc),Yt(Nc),Res(Nc),Sur(10),Sigm(10),Ainv#(Nx,N
x)
It = 0 : Sortie = 0 : Jtest = 0
' Debut de la boucle de convergence
WHILE Jtest <> Np
  'Formation des matrices A,B et W
  L = 0
  FOR I = Id TO Fi
    INCR L
    C(L) = FNcanal&(I,2,0) - (I*A1+B1)
    IF C(L) <= 0 THEN C(L) = 1
    W(L) = 1/C(L)
    Yzot = 0
    FOR J = 1 TO Np
      Callnt = -Alp(J)*(I-Absi(J))^2
      IF Callnt < -81 THEN Yzo = 0 ELSE Yzo = Azo(J)*EXP(Callnt)
      Yzot = Yzot + Yzo
      B(L) = C(L) - Yzot
      K = 1 + Jv*(J-1)
      A(L,K) = Yzo/Azo(J)
      A(L,K+1) = 2*Yzo*Alp(J)*(I-Absi(J))
      IF Jv = 3 THEN A(L,K+2) = -Yzo*(I-Absi(J))^2
    NEXT J
  NEXT I
  'Formation de la matrice Ainv#
  FOR J = 1 TO Nx
    FOR K = 1 TO Nx
      Ainv#(J,K) = 0
      FOR I = 1 TO Nc
        Ainv#(J,K) = Ainv#(J,K) + A(I,J)*W(I)*A(I,K)
      NEXT I
    NEXT K
  NEXT J
  ' Inversion de la matrice
  CALL InvMd (Nx,Ainv#())
  ' Formation de la matrice V
  FOR J = 1 TO Nx
    V(J) = 0
    FOR I = 1 TO Nc
      V(J) = V(J) + A(I,J)*W(I)*B(I)
    NEXT I
  NEXT J
  ' Solution
  FOR I = 1 TO Nx
    T(I) = 0
    FOR J = 1 TO Nx
      T(I) = T(I) + Ainv#(I,J)*V(J)
    NEXT J
  NEXT I
  ' Test de convergence
  Jtest = 0
  FOR J = 1 TO Np
    Dif3 = 0
    K = 1 + Jv*(J-1)
    Azo(J) = Azo(J) + T(K)
    IF Azo(J) <= 0 THEN INCR Sortie : EXIT FOR
    Dif1 = ABS(T(K)/Azo(J))
    Absi(J) = Absi(J) + T(K+1)
  NEXT J

```

```

IF Absi(J) <= 0 THEN INCR Sortie : EXIT FOR
Dif2 = ABS(T(K+1)/Absi(J))
IF Jv = 3 THEN
    Alp(J) = Alp(J) + T(K+2)
    IF Alp(J) <= 0 THEN INCR Sortie: EXIT FOR
    Dif3 = ABS(T(K+2)/Alp(J))
END IF
IF Dif1 < 0.01 AND Dif2 < 0.01 AND Dif3 < 0.01 THEN INCR Jtest
NEXT J
INCR It
IF It = 10 THEN EXIT LOOP
' Si non convergence, on impose la resolution
IF Sortie > 0 THEN
    FOR J = 1 TO Np
        Absi(J) = OldAbsi(J)
        Alp(J) = OldAlp(J)
        Azo(J) = FNcanal&(Absi(J),2,0) - (Absi(J)*A1+B1)
    NEXT J
    Sortie = 0 : Jv = 2 : Nx = Jv*Np
END IF
WEND
IF Sortie = 0 THEN
    ' Calcul statistique et sortie correcte
    Socare = 0
    Chi2 = 0
    FOR I = 1 TO Nc
        Res(I) = 0
        Yt(I) = 0
        FOR J = 1 TO Np
            Yg(J,I) = 0
        NEXT J
    NEXT I
    I = 0
    FOR K = Id TO Fi
        INCR I
        FOR J = 1 TO Np
            Mu = -Alp(J)*(K-Absi(J))^2
            IF Mu < -81 THEN Yg(J,I) = 0 ELSE Yg(J,I) = Azo(J)*EXP(Mu)
            Yt(I) = Yt(I) + Yg(J,I)
        NEXT J
        Res(I) = FNcanal&(K,2,0) - (K*A1+B1) - Yt(I)
        Socare = Socare + Res(I)*Res(I)*W(I)
        IF FNcanal&(K,2,0) > 0 THEN Res(I) = Res(I)*Res(I)/FNcanal&(K,2,0)
        Chi2 = Chi2 + Res(I)
    NEXT K
    Xndl = Nc - Nx
    Chi2 = Chi2/Xndl
    FOR J = 1 TO Np
        Sur(J) = 1.773*Azo(J)/SQR(Alp(J))
        K = 1 + Jv*(J-1)
        Vazo = Socare*Ainv#(K,K)/Xndl
        Valp = Socare*Ainv#(K+2,K+2)/Xndl
        Sigm(J) = Azo(J)^2/Alp(J)*(Vazo/Azo(J)^2 + 0.25*Valp/Alp(J)^2)
        Sigm(J) = ABS(Sigm(J))
        Sigm(J) = SQR(Sigm(J))*200/Sur(J)
        Res1 = 200*SQR(0.69315/Alp(J))/Absi(J)
        Resk = 2*Slope*SQR(0.69315/Alp(J))
        Ener = Absi(J)*Slope + Offset
        Decal = Resk*1.5/Slope
    
```

```

        Bgnd = (((Absi(J)-Decal)*A1+B1)+((Absi(J)+Decal)*A1+B1))*Decal
        Erreur = Sig%*100*SQR(2*Bgnd+Sur(J))/Sur(J)
        CALL ImpRes(NoPic,It,Absi(J),Sur(J),Bgnd,Resk,Id,Fi,Erreur,Lt)
        IF J = 1 THEN LPRINT USING "###^^^";Chi2;
        LPRINT
    NEXT J
ELSE
    FOR I = 1 TO Nc
        LPRINT I;C(I)
    NEXT I
END IF
ERASE Absi,Dlms,Alp,Azo,A,C,B,V,T,W,Yg,Yt,Res,Sur,Sigm,Ainv#,OldAbsi,OldAlp
END SUB

```

Procedure d'inversion de matrice

```

SUB InvMd (N,A#(2))
DIM DYNAMIC AB#(N,N*2),BB#(N,N*2)
FOR I = 1 TO N
    FOR J = 1 TO N
        AB#(I,J) = A#(I,J)
    NEXT J
NEXT I
Id = N + 1 : Fi = N*2
FOR I = 1 TO N
    FOR J = Id TO Fi
        AB#(I,J) = 0
    NEXT J
NEXT I
FOR I = 1 TO N
    J = I + N
    AB#(I,J) = 1
NEXT I
FOR K = 1 TO N
    FOR J = 1 TO Fi
        BB#(K,J) = AB#(K,J)/AB#(K,K)
    NEXT J
    FOR I = 1 TO N
        IF I <> K THEN
            FOR J = 1 TO Fi
                BB#(I,J) = AB#(I,J) - AB#(I,K)*BB#(K,J)
            NEXT J
        END IF
    NEXT I
    FOR I = 1 TO N
        FOR J = 1 TO Fi
            AB#(I,J) = BB#(I,J)
        NEXT J
    NEXT I
NEXT K
FOR I = 1 TO N
    FOR J = 1 TO N
        K = J + N
        A#(I,J) = AB#(I,K)
    NEXT J
NEXT I
ERASE AB#,BB#
END SUB

```