

BR 86 13383

CTA - NOTA TÉCNICA  
IEAv/ NT- 011/85

11 NOV 1985

"IMPLEMENTAÇÃO DO CÓDIGO SAMPO NO CYBER 170/750"

por

E.F. Chagas, R. Liguori Neto\*, P.R.S. Gomes\*\*



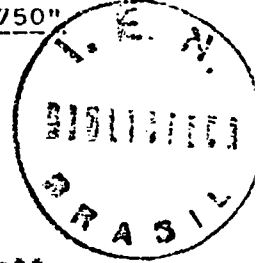
\* Departamento de Física Nuclear - IFUSP.

\*\* Endereço atual: Instituto de Física da Universidade  
Federal Fluminense, Niterói, RJ.

**Centro Técnico Aeroespacial**  
**Instituto de Estudos Avançados**  
**Rodovia dos Tambores, Km 5,5**  
**12.200-São José dos Campos - SP**  
**Brasil**

"IMPLEMENTAÇÃO DO CÓDIGO SAMPO NO CYBER 170/750"

por



E.F. Chagas, R. Liguori Neto\*, P.R.S. Gomes\*\*

RESUMO

O código SAMPO, nesta versão disponível, incorpora algoritmos que determinam calibrações de energia, eficiência e forma de picos. Além disso, o código inclui, ainda, subrotinas de processamento que fornecem pesquisas automáticas de picos levantando todas as suas características. O manuseio do código está otimizado, e a sua capacidade de análise, por região de espectro, está ampliada. Informações práticas para utilização do código são incluídas. Testes realizados garantem o bom desempenho do código SAMPO no sistema Cyber-IEAv.

ABSTRACT

The code SAMPO, in this version available, incorporates algorithms that determine energy, efficiency and peak shape. The code also includes processing subroutines that provide automatic surveys of peaks raising all their characteristics. The handling of the code has been improved and its analysing capacity in each region of the spectrum has been amplified. Practical information regarding the use of the code is enclosed. Tests made guarantee the good performance of the code SAMPO in the Cyber system-IEAv.

ÍNDICE

1. INTRODUÇÃO .....	01
2. ANÁLISE DOS ESPECTROS .....	01
2.1. CALIBRAÇÃO DE FORMA .....	03
2.2. CALIBRAÇÃO DE ENERGIA .....	06
2.3. CALIBRAÇÃO DE EFICIÊNCIA .....	08
3. MANIPULAÇÃO E FACILIDADES DO CÓDIGO .....	09
4. ASPECTOS DA VERSÃO IMPLANTADA .....	12
5. CONSIDERAÇÕES FINAIS .....	19
6. REFERÊNCIAS .....	21

## 1. INTRODUÇÃO

A análise de um espectro de radiação gama ( $\gamma$ ) se constitui essencialmente em determinar a localização exata do canal de cada fotopico de interesse, suas áreas correspondentes, as energias da radiação associadas a estes fotopicos e as incertezas estatísticas e de calibração destas quantidades. Dependendo do tipo de experiência, estes espectros podem-se tornar extremamente complexos (Figura 1) pois os fotopicos podem ser constituídos de picos simples ou agrupamentos de picos; além disso, em ambos os casos, estes fotopicos estarão ainda definidos sobre um fundo contínuo proveniente da interação Compton de radiações de energias mais altas detetadas, e de radiações de fundo.

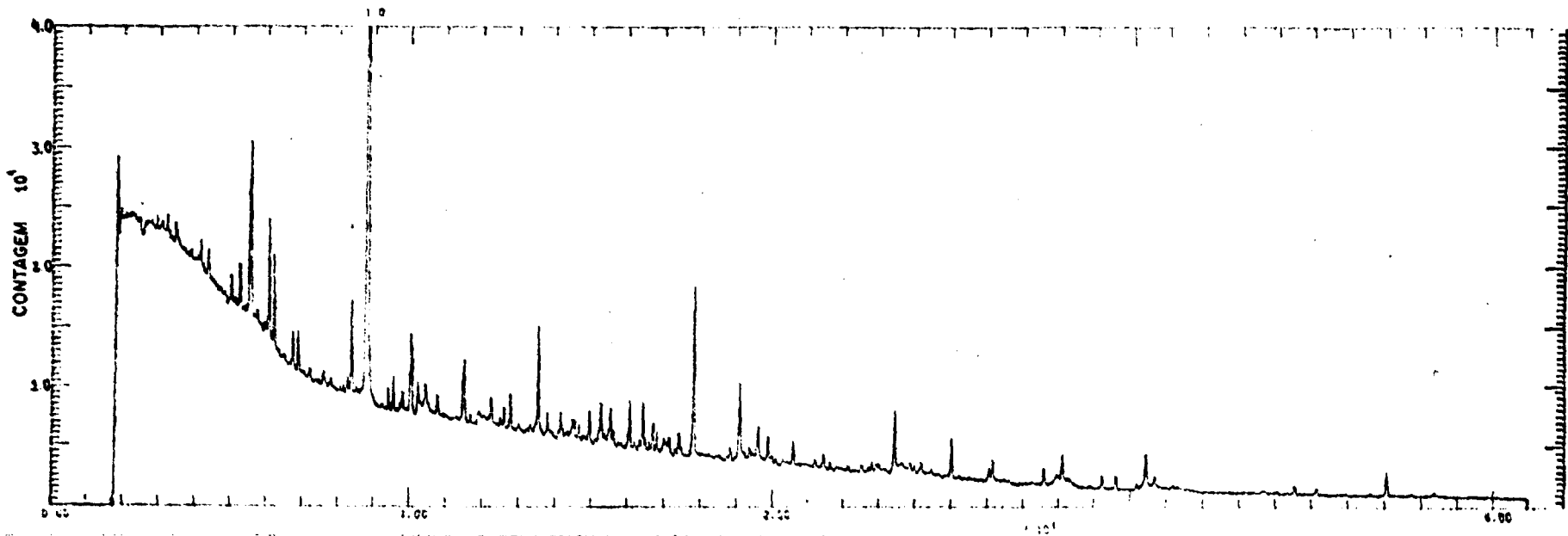
A versão do código SAMPO, desenvolvida em linguagem Fortran V, e recentemente implantada no CDC-Sistema CYBER 170/750 deste Instituto, pode ser utilizada mesmo em espectros extremamente complexos. O SAMPO é o código mais poderoso, existente atualmente, para uma análise numérica de espectros de radiação  $\gamma$ <sup>1)</sup> devido, principalmente, à precisão com que ele separa dupletos, tripletos, quadrupletos e até regiões extremamente complexas.

Embora originalmente o código tenha sido desenvolvido para análise de espectros  $\gamma$ , pode também ser aplicado na análise de espectros de elétrons e espectros mais simples, obtidos com detetores NaI (TL)<sup>2)</sup>.

A metodologia de análise dos espectros utilizando o código, é determinada por processos iterativos envolvendo inicialmente a caracterização dos fotopicos - através de parâmetros relacionados com os dados experimentais e que são determinados pelo próprio código - e posteriormente, através da obtenção das quantidades essenciais de cada fotopico do espectro. O acesso a cada um dos algoritmos existentes no código é feito através de palavras chaves, inseridas no arquivo de dados de entrada, que estabelecem a partida para um dado algoritmo.

## 2. ANÁLISE DOS ESPECTROS

Para fazer os ajustes dos fotopicos que compõem o espectro, o código necessita deste espectro dividido num certo



(FIG.-1): Espectro típico de radiação gama<sup>3)</sup>, acumulado durante 6 horas, no processo de desexcitação de núcleos residuais formados por evaporações de núcleos compostos, <sup>73</sup>Se. Neste caso, o <sup>73</sup>Se é formado pela incidência de <sup>14</sup>N a 48 MeV em <sup>59</sup>Co. O espectro é constituído de cerca de 200 picos, sendo que muitos deles são múltiplos que devem ser resolvidos.

número de regiões, sendo estas, limitadas em canais e contendo um número limitado de fotopicos a serem ajustados. A definição (em canais) dos intervalos que compõem cada região a ser ajustada pelo código depende dos algoritmos usados, e pode ser feita automaticamente ou estabelecida previamente nos dados de entrada. A partir daí, a avaliação das quantidades essenciais de cada fotopico, numa região particular do espectro, é feita por meio de ajustes utilizando aproximações de mínimos quadrados através de funções analíticas internas, previamente calibradas para representar a forma dos picos e determinar a energia da radiação associada com cada pico. Estas calibrações prévias, no caso da forma dos picos, são feitas com base em parâmetros que definem formas-padrões para um fotopico ao longo do espectro e, no caso da avaliação da energia associada com cada fotopico, os parâmetros utilizados constituem-se nos coeficientes que estabelecem uma curva de calibração para o espectro.

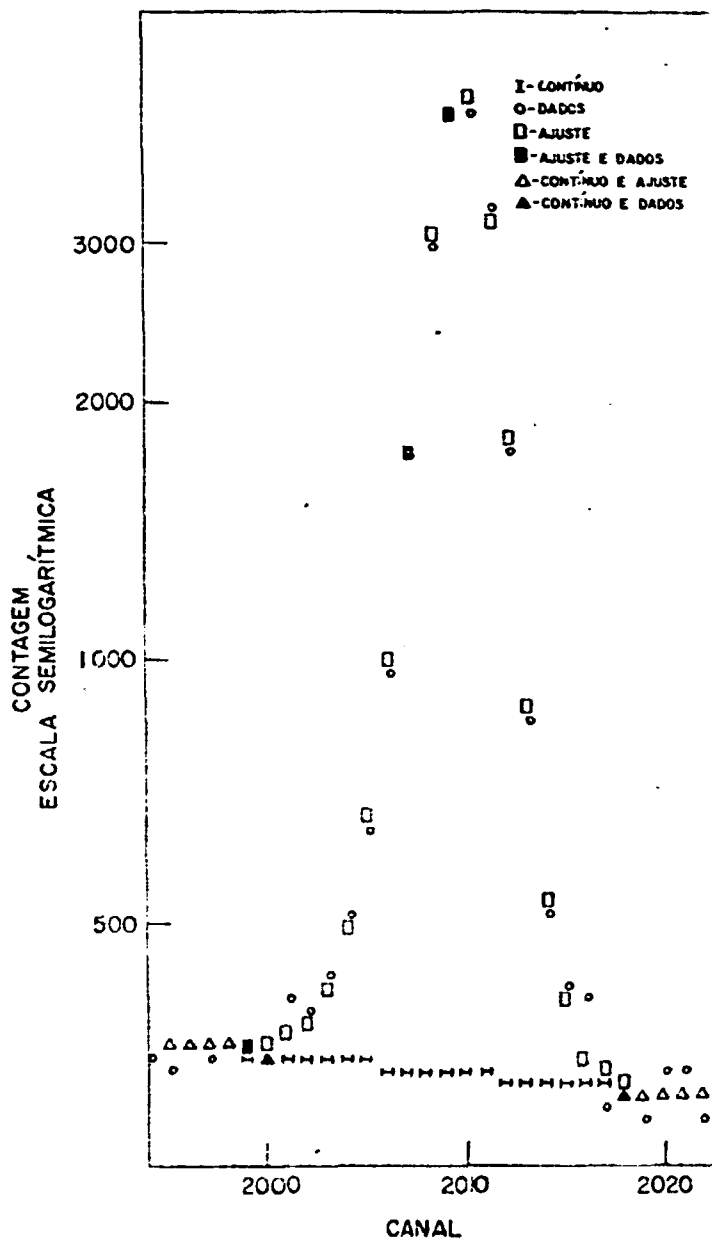
Com a finalidade de estabelecer o padrão de forma de um fotopico, e obter a curva da calibração do espectro-canal x energia da radiação  $\gamma$ , é necessário a utilização de fotopicos bem isolados e de boa estatística, que podem ser selecionados dos próprios espectros a serem analisados, ou a partir de um espectro de calibração, previamente acumulado com boa estatística, constituído das poucas linhas provenientes somente de fontes radioativas e radiação de fundo.

### 2.1. Calibração de Forma

Para estabelecer o padrão de forma de um pico, o código incorpora um algoritmo que calcula uma função analítica para a forma do fotopico, sendo esta construída por uma gaussiana, somada a uma exponencial para as caudas do pico no lado esquerdo (baixa energia) e no lado direito (alta energia). A magnitude de cauda é estabelecida pela distância do centróide do pico ao ponto em que a gaussiana passa a ser descrita por uma exponencial simples (Figura 2).

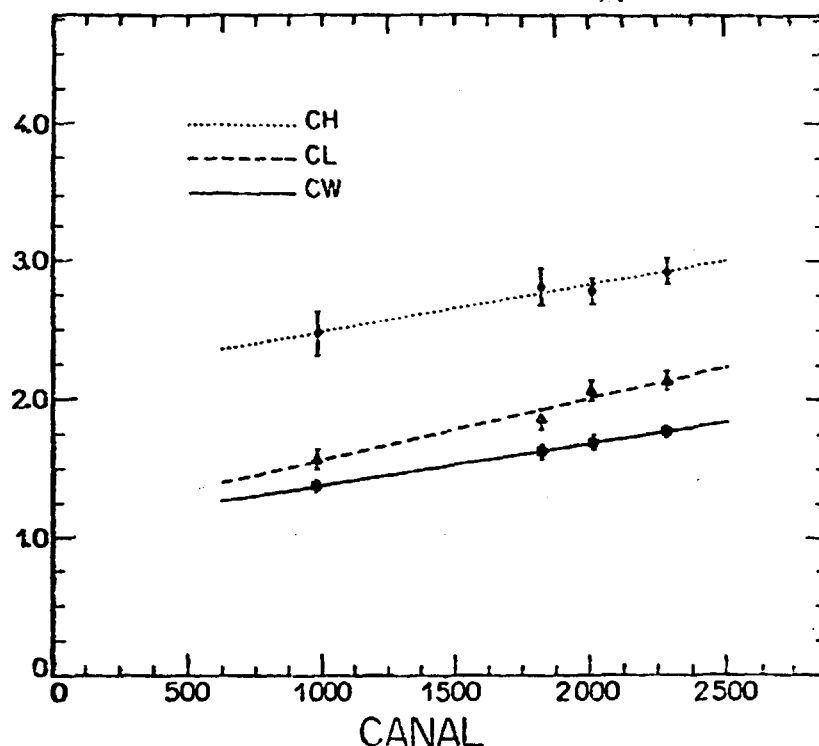
Nesta representação, a forma do pico é definida por três parâmetros:

- CW: a largura da gaussiana.
- CL: a distância do centróide do fotopico ao ponto em que a gaussiana passa a ser descrita por uma exponencial no seu lado de baixa energia.
- CH: a distância do centróide do fotopico ao ponto



(FIG.-2): Fotopicos que podem ser utilizados para calibração da forma dos fotopicos de um espectro  $\gamma$ . Este fotopico corresponde à transição gama de 1173 keV, e possui como parâmetros  $CP=2009,5$ ;  $CL=2,070 \pm 0,067$ ;  $CH=2,792 \pm 0,094$ ;  $CW=1,686 \pm 0,019$ .

em que a gaussiana passa a ser descrita por uma exponencial no seu lado de alta energia.



(FIG.-3): Curvas típicas para cada parâmetro de calibração de forma. As transições gama utilizadas são 569,7 keV; 1173 keV; 1332 keV, pertencentes à fonte  $^{207}\text{B}$  e  $^{60}\text{Co}$ . As curvas para cada parâmetro são obtidas fazendo-se interpolação por mínimos quadrados destes pontos.

Estes parâmetros, entretanto, caracterizam-se por uma variação suave com a energia impondo um padrão de forma, para fotopico, variável ao longo do espectro (Figura 3). Neste sentido, a determinação do padrão de forma do fotopico estabelece uma calibração de forma para os fotopicos dos espectros analisados, pois os parâmetros de forma funcionam como pontos de calibração que o código interpola linearmente para estabelecer padrões para fotopicos situados em qualquer região do espectro. Isto impõe à calibração de forma a necessidade de mais um parâmetro (CP) que localize a região do espectro à qual os demais parâmetros estão referidos.

Lembrando que toda a análise posterior do espectro depende totalmente do resultado das calibrações de forma,



energia e eficiência, algumas informações de ordem prática são oportunas:

a) Mesmo linhas, cujos fotopicos correspondentes apresentem uma boa estatística podem, eventualmente, ser dispensadas. Para isto, basta que se identifique linhas de fundo ou de eventuais contaminantes, muito próximas a elas tornando-se inutilizadas para definição do pico nas regiões do espectro que se localizam (Figura 4). Além disso, valores discrepantes de CL e CH ou incertezas grandes associadas com os valores de CL e CH para um dado pico, também são indicadores da existência de algum problema no fotopico considerado.

b) Na análise do ajuste de um fotopico procura-se identificar se os pontos de ajuste, sistematicamente, afinam ou alargam o pico. Neste caso, deve-se verificar a existência de alguma linha, com energia próxima àquela do fotopico, proveniente de radiação de fundo.

c) Os fotopicos das linhas correspondentes, que eventualmente não sirvam para a calibração de forma, podem ser utilizados para a obtenção da calibração de energia ou mesmo de eficiência, inclusive aqueles fotopicos correspondentes à radiações de fundo.

d) Na maioria dos casos, os erros de calibração dominam a totalidade das incertezas e dependem, fundamentalmente, de quanto esforço é gasto nos procedimentos de calibração.

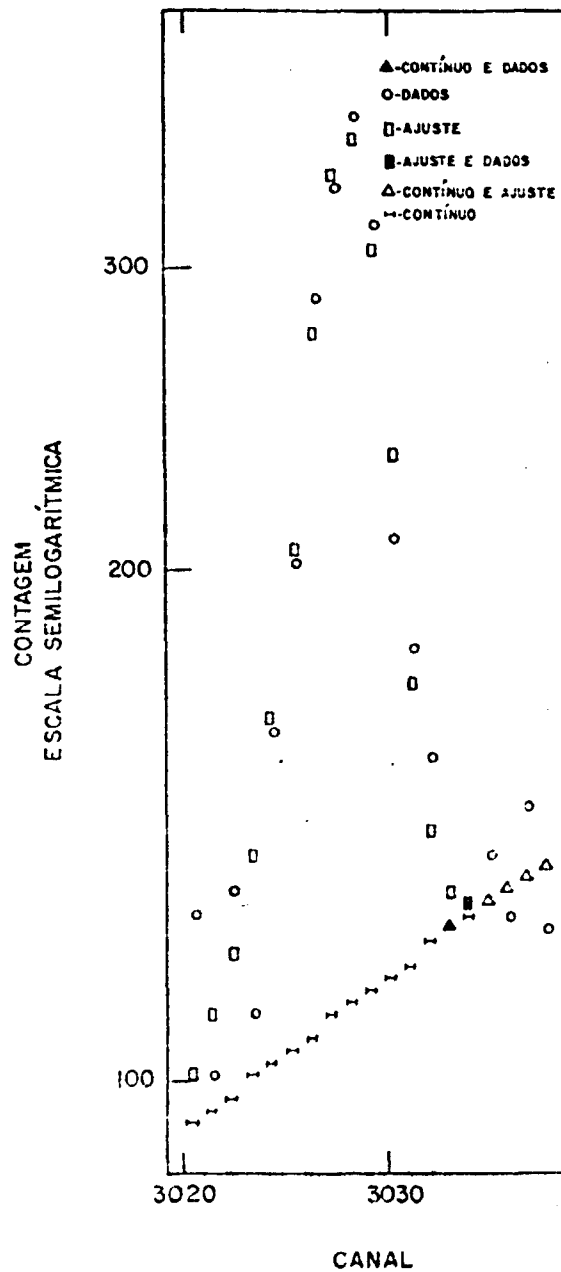
## 2.2. Calibração de Energia

O código SAMPO incorpora dois métodos diferentes para a obtenção de uma curva de calibração de energia. Em ambos, o código necessita, como dados, de um certo número de pontos de calibração.

Através do primeiro método, o código interpola linearmente estes pontos; a calibração de energia, assim estabelecida, é usada para a determinação da energia dos fotopicos de interesse dos espectros obtidos.

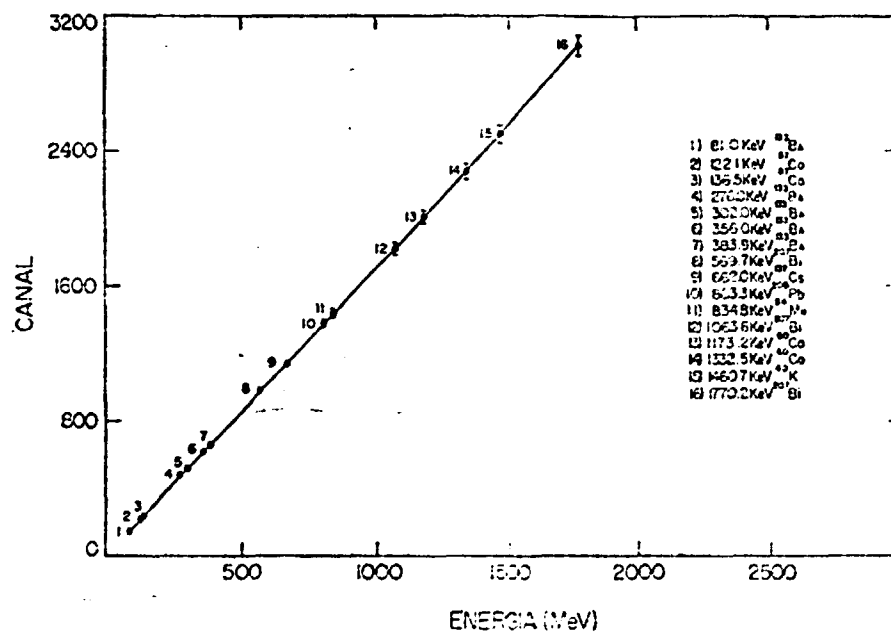
No segundo método, o código produz um ajuste polinomial de mínimos quadrados com os pontos de calibração. Este método ajusta polinômios até o 8º grau (Figura 5).

Em ambos os métodos o código ainda estabelece os



(FIG.-4): Região típica do espectro onde uma transição, em princípio selecionada para calibração de forma, apresenta problemas de contaminação. A transição de 1770,2 keV apresenta um ajuste ruim pelo fato do pico ser constituído de um dubleto. Os parâmetros neste caso possuem os valores  $CP = 3028$ ;  $CL = 4,484 \pm 0,791$ ;  $CH = 2,303 \pm 0,276$ ;  $CW = 1,787 \pm 0,079$ .

erros associados com os valores de energia dos pontos de calibração, obtidos já com base na curva de calibração.



(FIG.-5): Curva típica de calibração de energia<sup>3)</sup>. As fontes indicadas na figura foram utilizadas para acumular o mesmo espectro de calibração que também forneceu a curva de calibração de forma.

### 2.3. Calibração de Eficiência

Através do código SAMPO também é possível a obtenção de uma curva de calibração de eficiência. Para isso existem 2 métodos. Neste caso, em analogia à calibração de energia, o código também necessita como dados, um certo número de ponto de calibração.

O código, através do primeiro método, interpola logaritmicamente estes pontos enquanto que, no segundo método, emprega uma representação funcional aproximada da curva de eficiência para ajustar os pontos de calibração por mínimos quadrados.

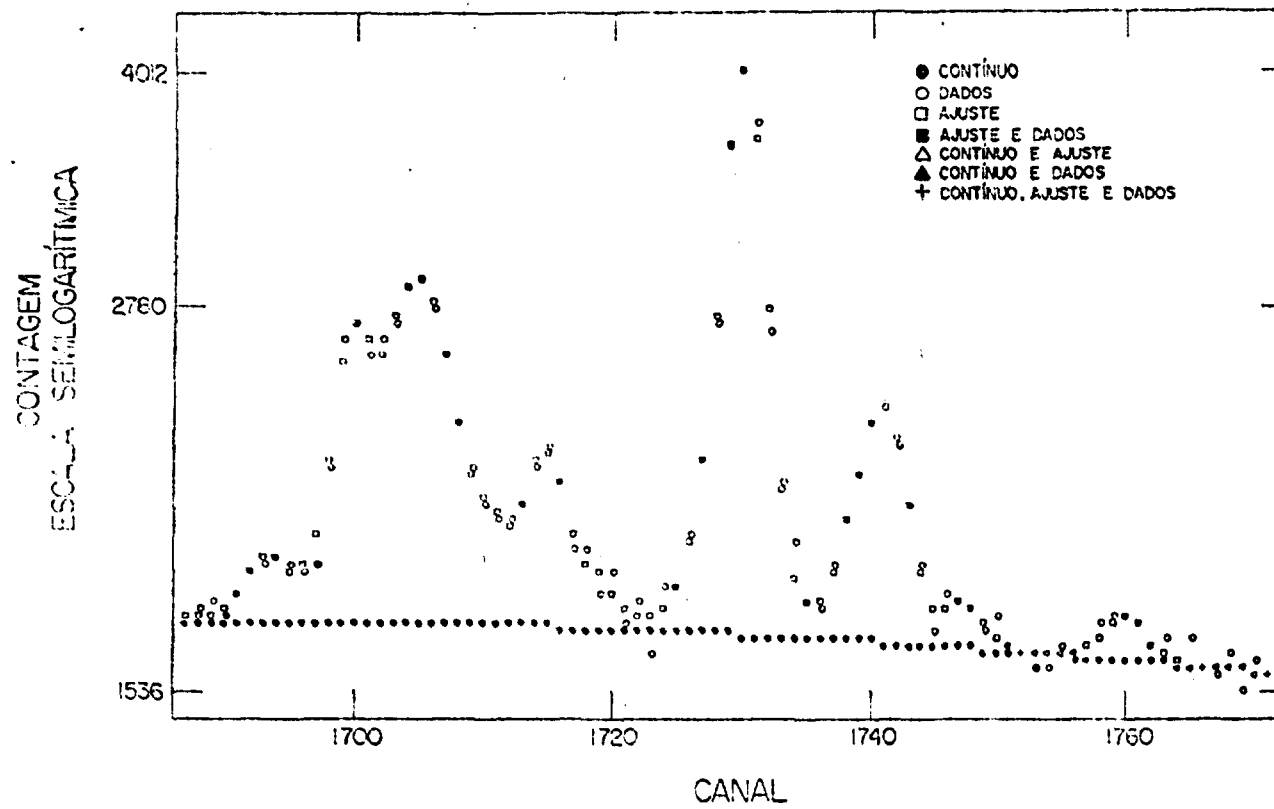
Em ambos os métodos o código ainda determina os erros associados com os valores de eficiência dos pontos de calibração, sendo estes, agora já obtidos com base na curva de calibração determinada. A precisão total obtida depende grandemente da estabilidade do sistema e da qualidade dos dados de calibração.

### 3. MANIPULAÇÃO E FACILIDADES DO CÓDIGO

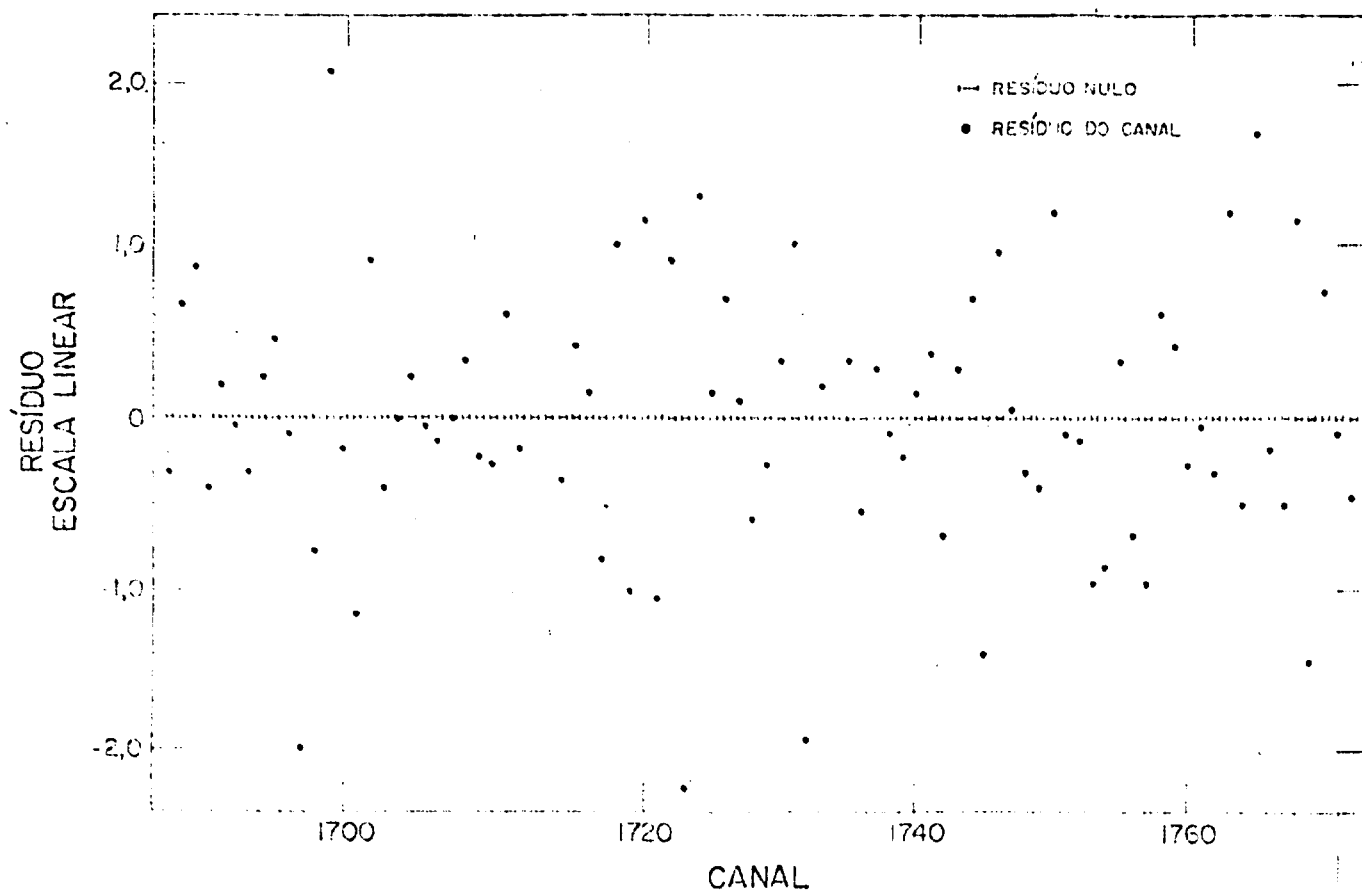
Ao longo de suas diversas fases, a análise é grandemente facilitada por gráficos de cada região, fornecidos pelo próprio código na sua saída (já mostrados nas figuras ilustrativas). Os gráficos são constituídos por pontos experimentais do espectro, pontos de fundo contínuo ajustados por uma das aproximações, e pontos de ajuste obtidos pela soma do contínuo com as funções de forma. Com isto, a qualidade do ajuste de uma dada região pode ser obtida com um auxílio visual das formas dadas pelos pontos experimentais e pelos pontos de ajuste (Figura 6).

Juntamente com os gráficos, os ajustes podem ainda ser discutidos através de uma análise numérica dos resultados. Esta análise é feita utilizando um mapeamento que o programa também fornece na sua saída, indicando os resultados decorrentes dos ajustes feitos numa dada região, em unidades de desvio padrão (Figura 7).

Uma vez que os parâmetros de forma e calibração de energia estão determinados, eles são utilizados como dados de entrada para a análise propriamente dita dos espectros. Esta pode ser iniciada com a utilização de alguns algoritmos que, selecionam automaticamente os intervalos para o ajuste dos fotopicos e fazem também pesquisa automática de picos ao longo de todo espectro. Os resultados são fornecidos de 2 maneiras: através de gráficos e através de listas contendo os picos pesquisados - incluindo uma classificação da relevância do pico no espectro - e os intervalos selecionados. Isto permite uma avaliação preliminar dos fotopicos existentes no espectro. A partir daí, podem ser utilizados algoritmos nos quais define-se com cuidado as diversas regiões em que o espectro total ficará dividido, e especifica-se dentro de cada uma destas regiões os canais em que se quer picos ajustados pelo código. Esta tarefa pode ser grandemente facilitada se, desde o início da análise, o usuário possuir um gráfico do espectro inteiro fornecido pelo traçador de gráficos do computador. Isto facilita a definição e



(FIG.-6): Saída de uma região típica do espectro, ajustado pelo código. Nesta região são ajustados 12 picos nos seguintes canais: 1698,2; 1699,8; 1701,2; 1703,9; 1706,6; 1714,7; 1718,7; 1730,0; 1739,0; 1741,4; 1747,3; 1759,9.



(FIG.-7): Resultado numérico da região apresentada na Figura 6. Este tipo de saída permite localizar algum duplete que eventualmente não esteja sendo visto na análise da região pelo tipo de saída da Figura 6. Isto é observado quando se evidencia um comportamento sistemático dos resíduos (valores crescentes ou decrescentes) em canais sucessivos.

alteração dos intervalos de ajuste devido à visão global que se pode ter do espectro.

Esta fase da análise, embora extremamente facilitada pelo procedimento do código, é a mais exaustiva pois cada região do espectro, que contém picos de interesse, deve ser analisada cuidadosamente, verificando-se a existência de possíveis multipletos a partir de ajustes feitos pelo código. Esta verificação implica num processo interativo com o código em que, numa região inclui-se e/ou retira-se um ou mais canais onde supostamente existam picos e eventualmente até altera-se o intervalo de ajuste.

Na Figura 8 é mostrado um diagrama de blocos<sup>1)</sup> como sugestão para a utilização do código.

Os resultados de todos os ajustes feitos pelo código numa dada execução, seja ela para calibração de forma, energia, eficiência ou para pesquisa de picos, automática ou não, por meio dos algoritmos convenientes, sempre estarão contidos numa tabela impressa no final da listagem.

#### 4. ASPECTOS DA VERSÃO IMPLANTADA

Na implantação do código ampliou-se a capacidade máxima de canais e picos que podem estar contidos numa dada região. Atualmente, as regiões são limitadas pelo ajuste de 12 picos e/ou pela extensão máxima de 300 canais. Além disso, o código é versátil no ajuste do fundo contínuo, que pode ser obtido por uma aproximação polinomial ou linear. Isto é muito conveniente pois garante um ajuste apropriado (aproximação parabólica) para fundos em regiões com a presença de "Compton Edge". Uma região típica desta situação ajustada pode ser vista na Figura 9.

A versão implantada do código não possui a totalidade das subrotinas necessárias à execução de todos os algoritmos possíveis, originalmente permitidos por meio das palavras chaves existentes. Entretanto, destas, a grande maioria está disponível como mostra a Tabela 1. Entre outros originalmente possíveis, o algoritmo (DATATV) que numa análise interativa do tipo "em linha" monta os gráficos numa tela (a mesma onde observa-se o espectro que está sendo acumulado) das regiões do espectro que estão sendo analisados, não está incorporado à esta versão.

Para a execução do código é necessário a preparação de 2 arquivos de entrada: Tape 1, Tape 5. O arquivo Tape 1 contém as palavras chaves e todas as informações exigidas por cada uma delas para acessar o algoritmo correspondente (ver manual e Tabela 2). O arquivo Tape 5 contém o espectro a ser analisado.

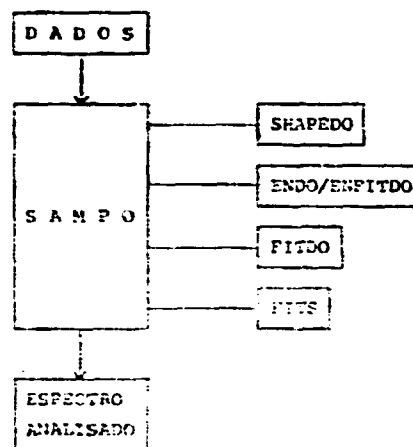
Durante a execução o código armazena os resultados em 2 arquivos de saída (que podem variar dependendo do algoritmo acessado): Tape 3, Tape 2. O arquivo Tape 3 armazena os parâmetros de calibração de forma, no formato com que eles serão usados como dados de entrada para a análise do espectro (Tabela 3). O arquivo Tape 2 armazena todo o resultado dos ajustes realizados no espectro por uma dada execução.

No processo de implantação desenvolveu-se, também, um procedimento para a utilização do código <sup>1)</sup>. Para a execução do código, com os arquivos de dados (Tape 1, Tape 5) devidamente preparados, o procedimento acessa o código SAMPO, os seus arquivos de dados, compila e executa o código.

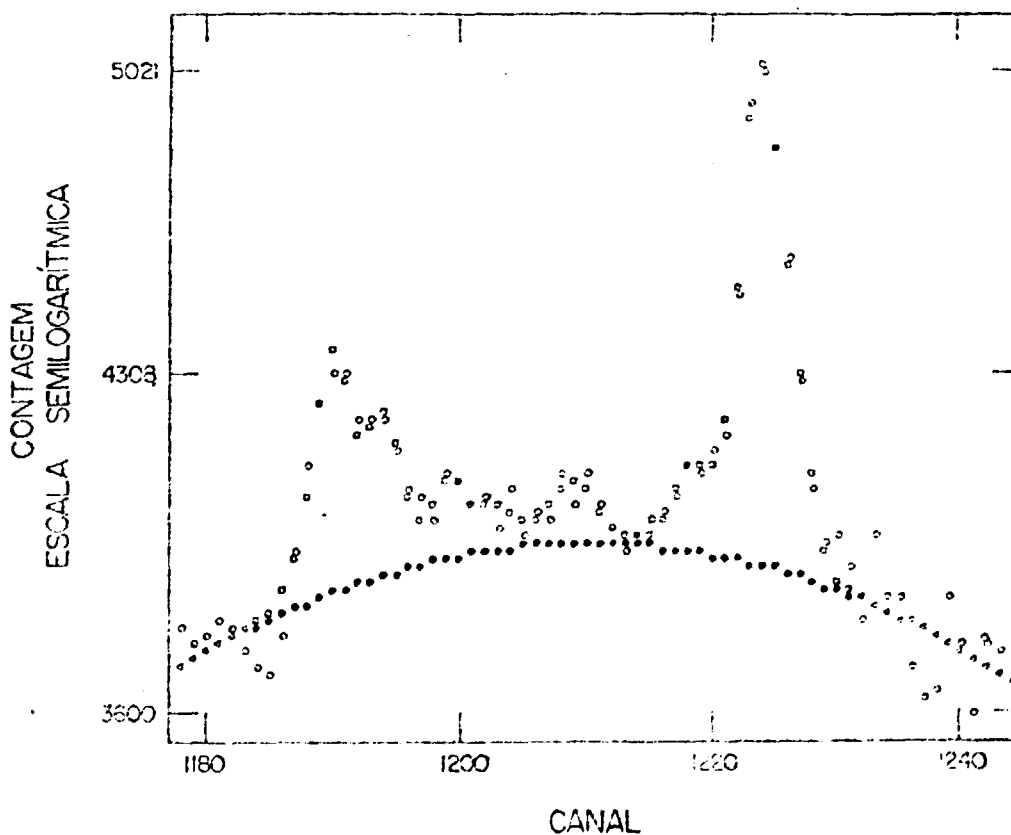
O acesso é feito da seguinte forma.

```
ATTACH, SAMPO/UN = IEAFEUT  
- GAMA
```





(FIG.-8): Diagrama em blocos do procedimento de utilização do código. Estão indicados os diferentes algoritmos que podem ser utilizados para uma análise completa dos espectros.



(FIG.-9): Ajustes de picos e do fundo contínuo realizados pelo código numa região típica com a presença de "COMPTON EDGE". Nesta região são ajustados 8 picos nos canais: 1189,9; 1193,9; 1199,2; 1203,1; 1207,1; 1209,4; 1218,2; 1223,6.

TABELA 1

Palavras chaves existentes na versão implantada. ( )\* indicam as palavras chaves que acessam os algoritmos não disponíveis nesta versão.

---

CALDATA	COMMENTS	CPTIME*	DATAGRAPH
DATAIN	DATAPLOT*	DATAV*	DAYFILE
EFDO	EFFITADJ	EFFITDO	EFFITIN
EFIN	ENDO	ENFITDO	ENFITIN
ENIN	FITDO	FITIN	FITREPEAT
FITS	FITTEST	FITALL	IOFILE*
OPTIONS	PEAKAD	PEAKDROP	PEAKFIND
PEAKLIST	RESET*	RESULT	SHAPEDO
SHAPEIN	STOP	ESCAPE	DATETI*
LESTDA*	LISTSP*	MULTIS	FITLIN
FITSTR	FITSLI	ESCIN	HIDFILE*
SAMPO	THALHI	THALFR	THALFM
THALFD	SPARE	STORES*	PARMITER
SKIP*	VARMIT		

---

TABELA 2a

Arquivo de entrada típico para a obtenção das curvas de calibração de forma e energia.

DATEIN	6.				
OPTIONS	2.	2.		300.	
SHAPEDD	470.	964.	964.		0.
SHAPEDD	1607.	1596.	1625.		0.
SHAPEDD	1823.		1812.		0.
SHAPEDD	2210.	1995.	2022.		0.
SHAPEDD	2291.	2270.	2292.		0.
SHAPEDD	2500.	2493.	2511.		0.
FITS	13.				1.
1	447	459	470		
1	510	540	574		
1	554	640	667		
1	540	557	570		
1	649	649	670		
1	691	1015	1003		
1	1345	1347	1372		
1	1547	1577	1542		
1	1812	1835	1823		
1	1905	2072	2010		
1	2270	2292	2291		
1	2495	2514	2500		
1	3020	3038	3024		
END0	470.	274.		0.05	1.
END0	574.	307.		0.05	0.
END0	652.	343.9		0.05	0.
END0	770.	511.1		0.05	0.
END0	870.	567.7		0.05	0.
END0	1003	553.2		0.05	0.
END0	1374.	618.6		0.05	0.
END0	1542.	611.6		0.05	0.
END0	1823.	1053.6		0.05	0.
END0	2010.	1173.714		0.05	0.
END0	2291.	1337.501		0.05	0.
END0	2500.	1440.7		0.05	0.
END0	3074.	1770.2		0.05	0.
ENFIT07	3.				
CALIBRA	7.	6.			
STOP					

TABELA 2b

Arquivo de entrada típico para obtenção da pesquisa automática de picos.

DATEIN	6.				
OPTIONS	2.	4.		300.	
SHAPEIN	85.	1.157	2.178	1.132	1.
SHAPEIN	4000.	2.912	3.525	2.267	0.
ENFITIN	-6.434433	275.09	0.02	1.	1.
ENFITIN	-5.954217	-11.1	0.47	2.	0.
ENFITIN	-0.000001	1770.8	0.20	3.	0.
PEAKFINO					
ATTACT					
PIF03					
RESULT					
STOP					





## 5: CONSIDERAÇÕES FINAIS

O código SAMPO é utilizado, internacionalmente, na área de espectroscopia  $\gamma$ , devido à sua grande potencialidade e precisão no ajuste de espectros  $\gamma$ . Entretanto, ao ser implementado, o código sofre modificações de acordo com as necessidades específicas da instituição usuária.

O código SAMPO está em condições operacionais sendo que, para a sua implementação no sistema Cyber-IEAv, as principais dificuldades foram:

- disponibilidade do manual de uma versão diferente da versão original utilizada; e
- adaptação dos comandos FORTRAN, válidos para o sistema de origem, porém incompatíveis com Cyber-IEAv.

Por outro lado, alguns aperfeiçoamentos foram introduzidos na versão local do código SAMPO:

- otimização na leitura dos arquivos de dados, através da reescrita da subrotina DATAIN; e
- ampliação da capacidade de ajuste de picos por região de espectro (de 5 picos para 12 picos), bem como na definição de uma determinada região do espectro, em canais (de 200 canais para 300 canais).

O código SAMPO tem sido amplamente testado através da comparação com os resultados fornecidos, para os mesmos espectros e regiões, por versões do código implantadas em outras instituições, apresentando um perfeito desempenho. Nos testes também não foram observados quaisquer incoerências nos resultados, quando confrontados entre si. Os testes se constituíram essencialmente em avaliar e confrontar, ajustes realizados pela versão local em regiões e espectros com diferentes graus de complexidade, bem como valores de ajuste fornecidos pela versão local para a caracterização dos fopicos (áreas, localização dos centróides, energias correspondentes, etc.).

A versão local do código SAMPO já tem sido utilizada também na análise de espectros  $\gamma$  como parte de alguns trabalhos <sup>3,5,6</sup>).

Maiores esclarecimentos e algum detalhamento sobre os processos e as equações utilizadas para a convergência do cálculo envolvido nos ajustes devem ser investigados no manual do código <sup>2)</sup>, que se encontra disponível na biblioteca deste Instituto. Adverte-se, entretanto, para o fato de que o manual se refere a uma versão do código SAMPO diferente da versão original utilizada.

REFERÊNCIAS

1. J.J. Routti, S.P. Prussin, - Nucl. Instr. and Meth. 72 (1969) 125.
2. Manual de utilização do Código SAMPO - J.J. Routti. AEC, Contract nº W - 7405 - Eng. 48.
3. E.F. Chagas - Tese de Mestrado (1984), ITA/CTA.
4. B.R. Petrusanis e outros, IEAv/M-001/83.
5. E.F. Chagas, P.R.S. Gomes, R. Liguori Neto, J.C. Acquadro, E. Crema - Supl. Cienc. Cult. vol. 36 (1984).
6. R. Liguori Neto - Tese de Doutorado (em conclusão), IFUSP.