



MINISTÉRIO DA CIÊNCIA E TECNOLOGIA

INSTITUTO DE PESQUISAS ESPACIAIS

BR 5816989

PUBLICAÇÃO Nº
PUBLICATION NO

INPE-4774-FEB/1969

DETERMINAÇÃO POR REGRESSÃO ITERATIVA DE PICOS
JACOBIANOS EM ESPECTROS GAMA

Paulo de Tarso Meyer Kordemann



ESCALA DE ENFERMAGEM

AUTORIZAÇÃO PARA PUBLICAÇÃO
AUTHORIZATION FOR PUBLICATION

PALAVRAS CHAVES/KEY WORDS

Espectrometria gama
Regressão de curva gaussiana

AUTORIZADA POR/AUTHORIZED BY

[Signature]
Mário Roberto Romão
Bárcion Gama

AUTOR RESPONSÁVEL
RESPONSIBLE AUTHOR

[Signature]
Daniel J. R. Kordemann

DISTRIBUIÇÃO/DISTRIBUTION

- INTERNA / INTERNAL
 EXTERNA / EXTERNAL
 RESERVADA / RESTRICTED

REVISADA POR/REVIEWED BY

[Signature]
Saverino J. G. Fátima

CDU/UDC

550.3:539.10

DATA/DATE

22/03/87

PUBLICAÇÃO Nº
PUBLICATION NO

INPE-4174-PRE/1069

ORIGEM
ORIGIN

DGA

PROJETO
PROJECT

INTERNA

TÍTULO/TITLE

DETERMINAÇÃO POR REGRESSÃO ITERATIVA DE PICOS
GAUSSIANOS EM ESPECTROS GAMA

Nº DE PÁGS.
NO OF PAGES

14

NÚMERO DE
LAST PAGE

11

VERSÃO
VERSION

Nº DE PÁGS.
NO OF PAGES

AUTOR/AUTHOR

Daniel Jean Roger Kordemann

RESUMO - NOTAS / ABSTRACT - NOTES

Os parâmetros dos picos presentes nos espectros gama podem ser determinados por um método simples de regressão iterativa. Para cada pico, os parâmetros determinados são associados a uma curva gaussiana (3 parâmetros) situada acima do contínuo linear (2 parâmetros). Este método pode ser usado em vez de métodos mais complexos; além do mais, ele oferece resultado completo do cálculo das incertezas estatísticas e uma precisão maior do que aquela que é dada por métodos mais simples.

COMUNICAÇÃO / COMMUNICATIONS

Este trabalho será apresentado no 29 Encontro Regional de Geofísica (1987), novembro de 1987 - Comunicação oral.

ABSTRACT

The parameters of the peaks shown in gamma-ray spectra may be determined by a simple iterative regression method. For each peak, the parameters determined are associated with a gaussian curve (3 parameters) located above a linear continuum (2 parameters). This method may be used instead of much more complicated ones; furthermore it gives the complete result of the calculation of statistical uncertainties and a precision higher than that which is given by simpler methods.

DETERMINAÇÃO POR REGRESSÃO ITERATIVA DE PICOS GAUSSIANOS EM ESPECTROS GAMA

A espectrometria gama permite determinar de maneira qualitativa e quantitativa os radioelementos emissores gama contidos na amostra analisada. A geometria da detecção e o tamanho das amostras podem ser diferentes assim como o tipo e o volume do detetor (Nordemann, 1966; Nordemann, 1987). O aspecto geral dos espectros depende principalmente da resolução do detetor que é função da sua natureza (cintilador ou semicondutor por exemplo) e, entre outros fatores, do material com o qual ele é feito. Porém, devido às interações da radiação gama com a matéria, estes espectros apresentam picos gaussianos devidos ao efeito fotoelétrico e à absorção total, os quais são mais ou menos largos acima de um fundo devido em primeiro lugar ao efeito Compton.

Depois da identificação dos emissores gama responsáveis pelos picos observados, vários métodos podem ser usados para a determinação da atividade ou do teor destes emissores gama. Em alguns casos os métodos de "stripping" ou de inversão linear são convenientes; eles se baseiam no uso de padrões de teores de emissores gama conhecidos e na resolução de sistemas lineares que envolvem todos ou alguns dos canais das regiões de interesse dos espectros (Crossley e Reid, 1982; Nordemann, 1985). Estes métodos podem ser convenientes quando o número dos radionuclídeos não é muito grande e quando estes são sempre os mesmos, como nas medidas de amostras geológicas onde dominam apenas o potássio 40 e os descendentes do urânio e do tório. Quando os espectros são complexos e os nuclídeos variados, pode ser mais conveniente tentar resolver individualmente cada pico e se aproveitar apenas das emissões múltiplas de alguns radionuclídeos.

A distribuição das taxas de contagem observadas em função do número dos canais, na região de um pico num espectro gama podem ser consideradas como o resultado da soma de uma curva gaussiana que representa o pico em si e de uma curva que representa o flanco da colina Compton (Bevington, 1969). O "fitting" de pontos experimentais com uma tal função é relativamente complexo, uma vez que esta função depende de muí

tos parâmetros, não é linear e não pode ser linearizada por processos simples. Nestas condições, é conveniente empregar um método de regressão iterativa que não exige a linearidade da dependência dos parâmetros. O método empregado (Holberg, 1967) exige apenas a derivabilidade em relação aos parâmetros e às variáveis, o que é o caso da gaussiana acima de uma reta.

METODOLOGIA

Dentro do espectro gama considerado, é escolhida uma região que apresenta um pico devido à presença de um ou de alguns radioelementos emissores gama. O cálculo será efetuado sobre as taxas de contagem dos canais situados entre os dois vales que circundam o pico. Para reduzir o número de parâmetros, supõe-se que as contagens nesta região variariam linearmente em função do número dos canais se o pico não existisse, sendo estas contagens devidas apenas ao efeito Compton dos emissores de energia superior a da região considerada. Na presença do pico, as contagens $Y(X)$ seguirão, em função do número X do canal, as variações da seguinte função:

$$Y(X) = A(1) \cdot X + A(2) + A(3) \cdot \exp\left(-\frac{A(5)}{A(4)} \cdot (X - A(4))^2\right), \quad (1)$$

onde os parâmetros $A(1)$ e $A(2)$ caracterizam o fundo contínuo linear, enquanto os parâmetros $A(3)$, $A(4)$ e $A(5)$ caracterizam a função gaussiana do pico em si; $A(3)$ representa a amplitude, $A(4)$ a posição do centro do pico e $A(5)$ a sua largura. Para facilitar o entendimento, as variáveis, os parâmetros e os símbolos apresentados na fórmula (1) são idênticos aos que aparecem na listagem do programa em linguagem BASIC do anexo 1.

Para a determinação dos cinco parâmetros desconhecidos, emprega-se o método de regressão iterativa descrito por Holberg (1967) que, embora sendo pouco divulgado, já foi usado por Shalev (1977) e Holdemann (1985). Este método se aplica ao "fitting" de qualquer função, sendo a única condição exigida a derivabilidade em função dos parâmetros e das variáveis. Ele permite levar em conta pesos associados a cada medida e pode fornecer evidentemente os coeficientes de correlação e as in

certezas dos parâmetros calculados. Além disto, ele oferece a grande vantagem de ser de fácil implantação em microcomputadores, uma vez que os algoritmos que permitem realizar os cálculos necessários são curtos. Os tempos de cálculo dependem do número de medidas e de parâmetros e não são proibitivos para volumes de dados razoáveis. Este aspecto será discutido mais adiante, assim como as condições necessárias para a convergência das iterações.

Os valores iniciais dos parâmetros $A(J)$ são determinados de maneira adequada para não serem muito diferentes dos valores finais procurados. Isto permite diminuir o número das iterações, assim como o risco de divergência. Esta determinação é feita aproveitando-se de maneira simples da estrutura do pico: posição e contagem dos vales para o fundo linear, posição do máximo, amplitude acima do fundo linear e valor típico da largura para a parte gaussiana do pico.

Para cada iteração, os termos corretivos $E(J)$ a serem aplicados aos valores iniciais dos parâmetros $A(J)$ são calculados pela resolução de um sistema linear de 5 equações e 5 incógnitas. Os termos deste sistema são os somatórios calculados para todos os canais usados a partir das taxas de contagem, as derivadas da diferença entre o resultado experimental e a função calculada nesta iteração em relação aos parâmetros e às incertezas sobre as medidas que são introduzidas como peso estatístico para cada canal. Uma pequena sub-rotina realiza a inversão da matriz 5×5 do sistema. Os termos corretivos $E(J)$ são aplicados aos parâmetros $A(J)$ e as iterações são praticadas até que os termos corretivos sejam globalmente suficientemente pequenos.

No início, o gráfico do espectro gama aparece na tela do monitor a fim de permitir a escolha da região do pico a ser analisada. Depois desta escolha, aparecem na tela do monitor os canais dos vales e do máximo do pico e suas respectivas taxas de contagem. Para cada iteração são apresentados os valores dos parâmetros em processo de determinação, os resultados parciais da integração da área do pico calculados a partir da função gaussiana e do processo simples da secante, as incertezas sobre os resultados parciais e os critérios de continuação das iterações.

Dois versões ligeiramente diferentes foram redigidas e experimentadas, uma em BASIC interpretada (Sanyo BASIC versão 1.34 para MS-DOS versão 2.11 semelhante ao BASIC) e outra em linguagem BASIC compilada (BASCOM). No anexo 1 apresenta-se a listagem da versão redigida em linguagem BASIC interpretada.

A título de exemplo, o programa foi rodado com o espectro contido nos canais de dados iniciando por DATA. A primeira tela que aparece no monitor mostra o gráfico do espectro gama (obtido com um detector a cintilação de iodeto de sódio ativado com tâlio); a presença do cursor movido pelas teclas de setas horizontais (teclas 4 e 6) permite escolher os limites à esquerda e à direita da região de um pico de interesse. A tela seguinte reproduzida na tabela 1 apresenta o número de canais destes limites (XI e XF), as contagens nestes canais (Y) e o número do canal (XM) apresentando a contagem máxima (YM).

TABELA 1

XI = 132	Y = 59
XF = 153	Y = 25
XM = 141	YM = 126

Em seguida, de maneira contínua, por "scrolling" são apresentados na tela do monitor os resultados após cada iteração, até a última para a qual a soma DD dos quadrados dos termos corretivos é avaliada como suficientemente baixa. A tabela 2 apresenta o quadro desta última tela, com os valores achados após cinco iterações para os parâmetros A(1), A(2), A(3), A(4) e A(5), a soma DD, a soma SIG dos quadrados das diferenças entre os pontos experimentais e a curva obtida pela regressão, a resolução RES (expressa em %) observada para pico calculado, a contagem líquida N que corresponde aos pontos situados entre a gaussiana e a reta do fundo, com o desvio padrão determinado também pelo método empregado e o resultado SEC que teria sido obtido se fosse empregado apenas o método da secante. Para estas duas contagens, o valor percentual que aparece entre parênteses é o valor relativo dos desvios calculados.

TABELA 2

A(1) = -1,732	DD = 5,22821E-03
A(2) = 288	SIG = ,551315
A(3) = 75	RES = 6,3%
A(4) = -141,9	N = 725 ± 51 (7%)
A(5) = -,034133	SEC = 728 ± 108 (14.8%)

Várias conclusões podem ser extraídas destes resultados; a mais importante reside nos valores vizinhos dos resultados obtidos pelo método sugerido neste trabalho e pelo método da secante, porém com incertezas muito inferiores no caso da regressão iterativa. Por esta razão, e pela facilidade de uso, recomenda-se o uso deste método de regressão iterativa.

REFERÊNCIAS:

- Bevington P.R., 1969; Data reduction and error analysis in the physical sciences, MacGraw-Hill, New-York.
- Crossley D.J. e Reid A.B., 1982; Inversion of gamma-ray data for element abundances. Geophysics 47(1), 117-126 (Jan. 1982).
NASA, 1968; Numerical least-square method, NASA SP-3044.
- Nordemann D.J.R., 1966; Emissions gamma de quelques meteorites et roches terrestres. Evaluation de la radioactivité du sol lunaire. Thèse, Univ. Paris; Rapport CEA-R3017.
- Nordemann D.J.R., 1985; Inversão iterativa de dados de espectrometria gama ou alfa; Relatório INPE-3739-PRE/859; apresentado no Primeiro Encontro Regional de Geofísica, São José dos Campos, 1985. Relatório INPE- -PRE/ . Submetido à Rev. Bras. Geofís.
- Nordemann D.J.R., 1987; Espectrometria gama de geometria 4# infinita. Relatório INPE- -PRE/ .
- Ruckdeschel F.R., 1981; BASIC Scientific Subroutines. Byte/McGraw-Hill, Peterborough.

- Shalev S., 1977; GENFIT, A general least square fitting program for mini-computer. Instituto de Energia Atômica, São Paulo, INF. IEA 57/CEN-AFR 16.
- Hulberg, J.R., 1967; Prediction Analysis. Van Nostrand, Princeton.

ANEXO 1

LISTAGEM DO PROGRAMA EM BASIC

```
100 'SSSSSS      Y(X)-A(1)*X+A(2)+A(3)*EXP(A(5)*(X+A(4))^2)      SSSSSSS
200 OPTION BASE 1 : DIM Y(400),A(5),D(5,10),C(5,5),D(5,5),E(5),F(5),V(5)
210 P=5 : XP=10 : XU=199 : FOR X=XP TO XU : READ Y(X) : NEXT : COSUB 8000
220 A(1)=(Y(XF)-Y(XI))/(XF-XI) : A(2)=Y(XI)-XI*A(1)
230 A(3)=(Y(XM)-A(2)-A(1)*XM) : A(4)=-XM : A(5)=-.05 : F(2)=-1
240 FOR X=XI TO XF:SEC=SEC+Y(X):NEXT :DSEC=SEC*(Y(XI)+Y(XF))*((XF-XI+1)^2)/4
250 GOTO INT(SEC-(Y(XI)+Y(XF))*(XF-XI+1)/2) : DSEC=INT(SQR(DSEC))
300 SIG=0 : COSUB 1000 : DD=0 : FOR J= 1 TO 5 : E(J)=0 : NEXT
310 FOR J=1 TO 5 : FOR K=1 TO 5 : E(J)=E(J)+D(J,K)*V(K) : C(J,K)=0 : NEXT
320 A(J)=A(J)-E(J) : DD=DD+E(J)*E(J) : NEXT : COSUB 5000 : GOTO 300
1000 FOR J=1 TO 5:V(J)=0:NEXT:FOR X=XI TO XF : XX=X+A(4) : XA=XX*A(5) : Y(1)--X
1330 F(3)--EXP(XX*XA):AF=A(3)*F(3) : F(4)=2*AF*XA : F(5)=AF*XX*XX : LL=Y(X)
1380 FO=Y(X)-A(1)*X-A(2)+AF : SIG=SIG+FO*FO/LL : FOR K=1 TO P: FOR L=K TO P
1400 C(K,L)=C(K,L)+F(K)*F(L)/LL :NEXT L :V(K)=V(K)+F(K)*FO/LL : NEXT K : NEXT X
1410 FOR I=2 TO P : FOR L=1 TO K-1 : C(K,L)=C(L,K) : NEXT L : NEXT K
4000 FOR I=1 TO P:FOR J=1 TO P:B(I,J+P)=0:B(I,J)=C(I,J):NEXT J:B(I,I+P)=1 :NEXT
4030 FOR K=1 TO P : IF K=P THEN 4070
4040 M=K : FOR I=K+1 TO P : IF ABS(B(I,K))>ABS(B(M,K)) THEN M=I
4050 NEXT I : IF M=K THEN 4070
4060 FOR J=K TO 2*P :B=M(K,J) : B(K,J)=B(M,J) :B(M,J)=B :NEXT J
4070 FOR J=K+1 TO 2*P :B(K,J)=B(K,J)/B(K,K) : NEXT J :IF K=1 THEN 4100
4080 FOR I=1 TO K-1 :FOR J=K+1 TO 2*P:B(I,J)=D(I,J)-B(I,K)*B(K,J):NEXT J:NEXT I
4090 IF K=P THEN 4110
4100 FOR I=K+1 TO P:FOR J=K+1 TO 2*P: B(I,J)=D(I,J)-B(I,K)*B(K,J):NEXT J:NEXT I
4110 NEXT K:FOR I= 1 TO P:FOR J=1 TO P:D(I,J)=B(I,J+P):NEXT J : NEXT I : RETURN
```

```
5000 PRINT : PRINT "A(1) -";INT(1000*A(1))/1000,"DB -":SQR(DB)
5020 SIG=SQR(SIG/(XF-XI-4)) : PRINT "A(2) -";INT(A(2)),"SIG-":SIG
5030 PRINT "A(3) -";INT(A(3)),"RES-":INT(-1665/(A(4)*SQR(ABS(A(5)))))/10;" "
5035 N=INT(A(3)*SQR(ABS(3.14159268/A(5))))
5036 DN=INT(N*SIG*SQR(D(3,3)/(A(3)*A(3))+.25*D(5,5)/(A(5)*A(5))))
5040 PRINT "A(4) -";INT(10*A(4))/10,"N -";N;"q-":DN;"(";INT(1000*DN/N)/10;"")"
5050 PRINT "A(5) -";INT(1E+06*A(5))/1E+06,"SEC-":SEC;"q-":DSEC;"(";INT(1000*DSEC/SEC)/10;"")"
5060 IF DB> 0001 THEN RETURN ELSE PRINT : PRINT " * * * * E N D * * * * : END
6010 DATA 1192,9999,9999,9999,9999,9999,9999,9999,9901,9168
6020 DATA 0709,1927,1772,1638,1461,1352,1275,1165,1102,1028
6030 DATA 0972,0936,0867,0839,0806,0738,0715,0673,0653,0621
6040 DATA 566,582,545,540,505,533,534,536,548,490
6050 DATA 459,454,392,581,378,378,354,367,343,331
6060 DATA 320,321,326,311,296,277,267,221,230,201
6070 DATA 214,196,187,192,194,187,189,189,177,184
6080 DATA 181,179,173,165,155,166,159,160,152,161
6090 DATA 149,156,147,150,145,130,119,120,121,121
6100 DATA 108,102,101,113,107,115,119,110,113,108
6110 DATA 094,100,091,078,094,084,089,082,089,073
6120 DATA 087,083,083,083,091,090,082,078,070,065
6130 DATA 057,061,059,062,071,076,077,086,091,107
6140 DATA 105,126,110,111,106,104,071,064,052,042
6150 DATA 40,31,28,25,20,24,22,18,19,21
6160 DATA 21,20,21,19,17,19,18,20,21,20
6170 DATA 15,20,18,22,20,21,16,18,15,15
6180 DATA 13,11,12,13,13,12,13,14,10,09
6190 DATA 10,13,12,12,11,11,13,14,13,09
```

```
8000 CLS : LINE (100,150)-(560,150) : LINE (100,30)-(100,150)
8150 PSET (100,151) : PSET (500,151) : PSET(99,100) : PSET (99,50)
8160 SCA=PC : LOCATE 13,7 : PRINT 100°SCA : LOCATE 7,7 : PRINT 200°SCA
8170 LOCATE 20,12 : PRINT "O":LOCATE 20,36 :PRINT 100 : LOCATE 20,61 : PRINT 200
8180 LOCATE 20,67 : PRINT "CANAL" : LOCATE 4,6 : PRINT "PULSOS"
8200 FOR X=XP TO XU : Y=150-(Y(X) MOD (150°SCA))/SCA
8220 PSET (100+2*X,Y):PSET (100+2*X+1,Y):NEXT
8230 GCURSOR (300,199),(X,Y) : XI=(X-100)\2 : PRINT "XI-";XI,"Y-";Y(XI)
8240 GCURSOR (X,199),(X,Y) : XF=(X-100)\2 : PRINT "XF-";XF,"Y-";Y(XF)
8400 XM=XI : YM=Y(XI) : FOR X=XI TO XF : IF Y(X)>YM THEN YM=Y(X) : XM=X
8990 NEXT : PRINT "XM-";XM,"YM-";Y(XM) : RETURN
9000 SAVE " :FRANJ.BAS",A : STOP
9100 OPEN "O",1,"B:ESP3" : FOR J=XP TO XU : PRINT#1,Y(J) : NEXT : CLOSE : RETURN
9200 OPEN "I",1,"B:ESP3" : FOR J=XP TO XU : INPUT#1,Y(J) : NEXT : CLOSE : RETURN
```

ANEXO II
DESCRIÇÃO DO PROGRAMA

Linha	100	Fórmula fundamental (fórmula 1)
	200-230	Inicialização, leitura dos dados (chamando 8000-8999)
	240-250	Método da secante
	300-320	Programa mestre, laço das iterações (chamando 1000-4110; chamando 5000-5060)

SUB-ROTINAS:

1000-1410	Somatórios, laço dos canais
4000-4110	Inversão da matriz 5x5. O método empregado foi o de eliminação de Gauss-Jordan (Ruckdeschel, 1981)
5000-5060	Resultados na tela e teste das iterações
6010-6190	Dados (espectro gama: contagens x canais)
8000-8999	Gráfico do espectro, escolha da região
9000-9200	Gravação e leitura de arquivos em disquete se houver necessidade.