

MODELO DE AJUSTE DE DATOS EXPERIMENTALES DE TERMOLUMINISCENCIA

Augusto Moreno y Moreno
Departamento de Apoyo en Ciencias Aplicadas
Benemérita Universidad Autónoma de Puebla
4 Sur 104 , Centro Histórico 72000. Puebla Pue,

Augusto Moreno Beltrán
Facultad de Ciencias Químicas
Universidad Nacional Autónoma de México

Resumen

Este modelo ajusta los resultados experimentales para termoluminiscencia de acuerdo a la ecuación :

$$I(T) = \sum_i (A_i * \exp(-1/B_i * (T - C_i)^2))$$

Donde : A_i , B_i , C_i son los parámetros del i-ésimo pico ajustado a una curva gaussiana .

Los ajustes a la curva pueden operarse manual o analíticamente usando la función MACRO y el complemento SOLVER.XLA previamente instalado en el sistema de computación.

se muestra en este trabajo :

1. La información de datos experimentales de una curva de LiF obtenida del Instituto de Física de la UNAM ⁽¹⁾ en la que el modelo de ajuste de datos es operado en la modalidad de macro.
2. Una curva de LiF de cuatro picos obtenida de información de HARSHAW ⁽²⁾ simulada en MICROSOFT EXCEL ^(3,4,5) , discutida en trabajos anteriores , como una referencia , no en macro .

METODOLOGÍA GENERAL DE AJUSTE DE DATOS EXPERIMENTALES DE TERMOLUMINISCENCIA .

Este modelo ajusta los resultados experimentales para termoluminiscencia de acuerdo a la ecuación :

$$I(T) = \sum_{i=1}^n A_i \cdot \exp(-1/B_i \cdot (T - C_i)^2)$$

donde : A_i , B_i , C_i son los parámetros del i-ésimo pico ajustado a una curva gaussiana

para operar el modelo manualmente:

1. COPIE Y PEGUE LOS RESULTADOS EXPERIMENTALES EN LAS COLUMNAS "T" e "I" DEL ÁREA "DATOS"
LOS RESULTADOS DEBEN SER COPIADOS EN ORDEN ASCENDENTES DE TEMPERATURA. ASEGÚRESE DE QUE TODOS LOS RENGLONES CUENTEN CON LAS FÓRMULAS NECESARIAS (COLUMNAS "F" a LA "N").
2. UTILICE LOS MACROS "AGREGA" Y "ELIMINA" PARA DETERMINAR EL NÚMERO DESEADO DE PICOS. (PARA EJECUTAR LOS MACROS PRESIONE LAS TECLAS (ALT) +(F8) o BIEN UTILICE EL MENÚ "HERRAMIENTAS"/"MACROS").
3. CAMBIE LOS VALORES DE LOS PARÁMETROS A_i , B_i , y C_i DE CADA PICO .

para ajustar la curva analíticamente

1. COPIE Y PEGUE LOS RESULTADOS EXPERIMENTALES EN LAS COLUMNAS "T" e "I" DEL ÁREA "DATOS." LOS RESULTADOS DEBEN SER COPIADOS EN ORDEN ASCENDENTES DE TEMPERATURA. ASEGÚRESE DE QUE TODOS LOS RENGLONES CUENTEN CON LAS FORMULAS NECESARIAS (COLUMNAS "F" a LA "N".)
2. EJECUTE EL MACRO "INICIALIZA CURVA" PARA OBTENER LOS LIMITES INFERIORES DEL AJUSTE. EN CASO DE REQUERIR MAS PICOS , OPRIMA "S"/"YES" CUANDO EL MODELO LO INDIQUE. EL MODELO MOSTRARÁ LA POSICIÓN Y ALTURA DEL NUEVO PICO CON UN PUNTO ROJO SOBRE LA LA GRÁFICA.
(PARA EJECUTAR LOS MACROS PRESIONE LAS TECLAS (ALT)+(F8) o BIEN UTILICE EL MENÚ "HERRAMIENTAS / "MACROS" .
3. SI DESEA AGREGAR MAS PICOS, HÁGALO MANUALMENTE Y AJUSTE PARÁMETROS.
4. EJECUTE EL MACRO "OPTIMIZAR AJUSTE"
ES POSIBLE USAR ESTA FUNCIÓN VARIAS VECES SEGUIDAS (NORMALMENTE DOS BASTARÁN)
(PARA EJECUTAR LOS MACROS PRESIONE LAS TECLAS (ALT)+(F8) o BIEN UTILICE EL MENÚ "HERRAMIENTAS"/"MACROS"
5. VERIFIQUE EL REMANENTE DE LA CURVA
SI EL AJUSTE ES AÚN DEFICIENTE, VUELVA AL PASO 2 Y AGREGUE UN PICO ADICIONAL.

Metodología

La inicialización de la curva de ajuste se hace buscando los máximos de acuerdo a los criterios de la primera y segunda derivada.

Una vez que han determinado la posición (C_i) y tamaño (A_i) de los máximos, se incrementa la amplitud (B_i) hasta obtener un límite inferior de la curva.

Inicializada la curva, se utiliza el complemento SOLVER.XLA de EXCEL para obtener el mejor ajuste.

FIGURA 1

El porcentaje de error se ve en el extremo derecho del cuadro de insertación de los parámetros de los seis picos que integran la curva que se discute.

En la figura 2 se presenta la deconvolución de dicha curva después de la acción del macro asociado al modelo propuesto y en la figura 3 el remanente después del ajuste

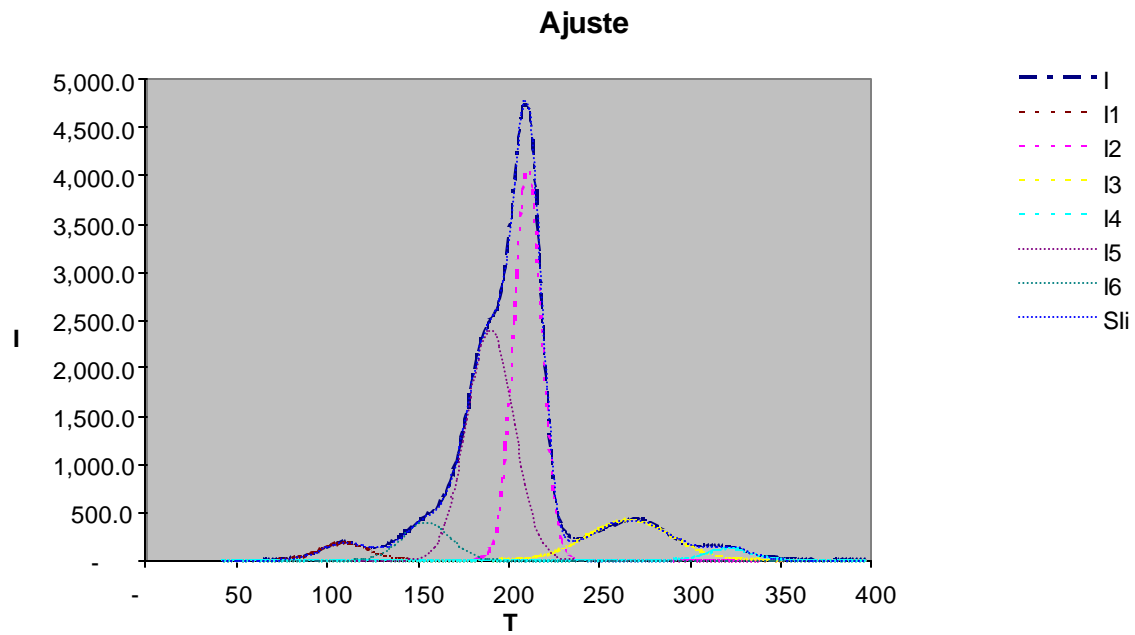


FIGURA 2

El remanente del ajuste se presenta en la figura 3

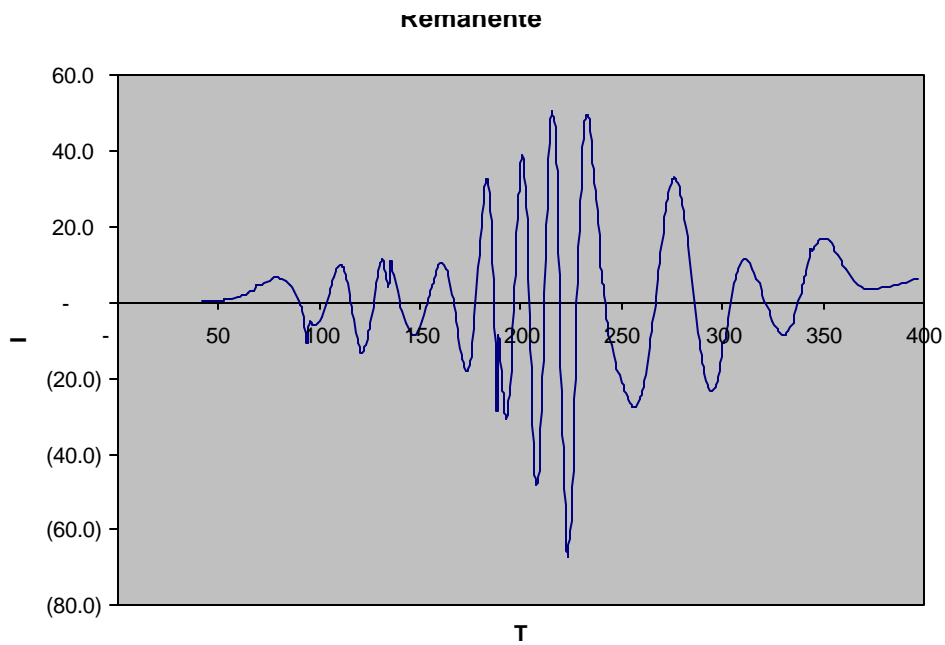


FIGURA 3

CURVA DE LIF DE CUATRO PICOS OBTENIDA DE INFORMACIÓN DE HARSHAW ⁽²⁾ SIMULADA EN MICROSOFT EXCEL ^(3,4,5) , DISCUTIDA EN TRABAJOS ANTERIORES , COMO UNA REFERENCIA , NO EN MACRO

DISCUSIÓN Y RESULTADOS

La figura 4 , de igual manera que el caso anterior .muestra parcialmente la insertación de los picos: I_1, I_2, I_3, I_4 que integran la curva propuesta.

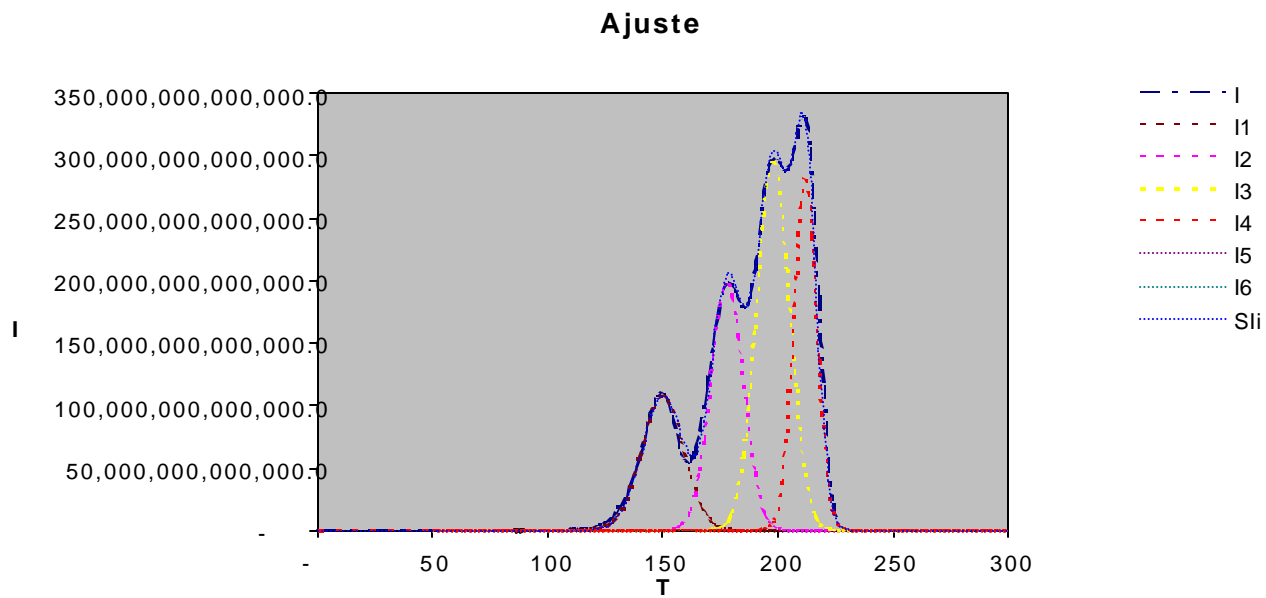


FIGURA 4

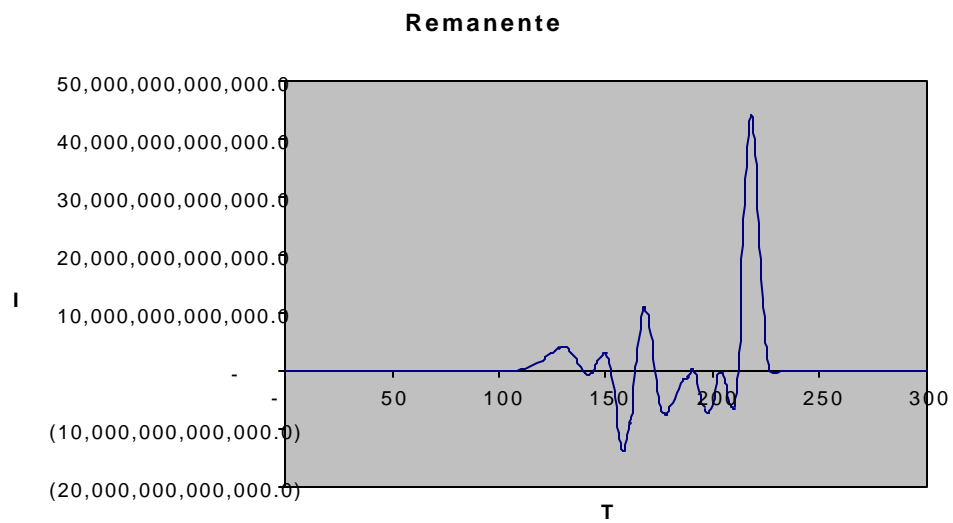


FIGURA 5

La figura 4 presenta la deconvolución de la curva y la figura 5 su remanente.

CONCLUSIONES.

utilización en cualquier analizador comercial que cumpla las condiciones indicadas en la sección de metodología que ha sido expuesto.

REFERENCIAS

- 1.2) Moreno M. Augusto y Moreno Beltrán Augusto. Deconvolución de la curva de emisión termoluminiscente., I CONFERENCIA INTERNACIONAL Y XI CONGRESO NACIONAL DE DOSIMETRÍA DE ESTADO SÓLIDO.
- 3.4.5) Moreno M. Augusto y Moreno Beltrán "Energía de activación y factor de frecuencia de R. CHEN en la ecuación original de RANDALL y otros para cinética de primer orden. III CONFERENCIA INTERNACIONAL, XIII CONGRESO NACIONAL SOBRE DOSIMETRÍA DE ESTADO SÓLIDO. 6-al 8 septiembre de 2000, Toluca, México.