



AUTARQUIA ASSOCIADA À UNIVERSIDADE
DE SÃO PAULO

**MÉTODOS DE AJUSTE DE CURVAS DE EFICIÊNCIA OBTIDAS
POR MEIO DE ESPECTRÔMETROS DE HPGe**

VANDERLEI CARDOSO

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

Orientador:
Dr. Mauro da Silva Dias

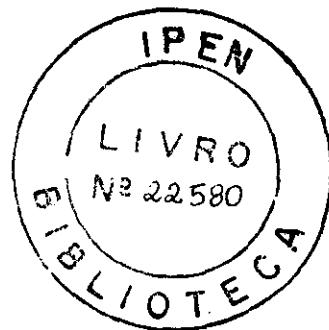
São Paulo
2002

INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES

Autarquia associada à Universidade de São Paulo

**MÉTODOS DE AJUSTE DE CURVAS DE EFICIÊNCIA OBTIDAS POR MEIO
DE ESPECTRÔMETROS DE HPGe**

VANDERLEI CARDOSO



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

Orientador:

Dr: Mauro da Silva Dias

SÃO PAULO

2002

A minha esposa, Vanessa

A minha filha Angélica

Aos meus pais, Mário e Darcy

AGRADECIMENTOS

Ao Dr. Mauro da Silva Dias, orientador deste trabalho, pelas sugestões, apoio, paciência e dedicação, durante o desenvolvimento desta dissertação;

À Dra. Marina Fallone Koskinas, pelas discussões, sugestões, ajuda no processo de medição das fontes radioativas usadas no presente trabalho e apoio durante todo o desenvolvimento do trabalho;

Aos colegas Wilson de Oliveira Lavras e Franco Brancaccio, pela amizade, estímulo e colaboração constantes;

Ao colega Mauro Noriaki Takeda agradecimento especial, pois além dos estímulos e companheirismo, quando possível, sanou-me algumas dúvidas a respeito de programação;

Às colegas Kátia Aparecida Fonseca, Cláudia Cristina Braga, Aída M. Baccarelli e Nora Lia Maidana, pela amizade estímulo e colaboração constantes;

Ao Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, na pessoa do Superintendente Dr. Cláudio Rodrigues, pela possibilidade oferecida para o desenvolvimento do trabalho;

A minha esposa Vanessa, pelo apoio, incentivo, compreensão e paciência oferecidos durante a realização deste trabalho;

A minha filha Angélica que sem dúvida é a fonte de energia para a realização deste trabalho;

Aos meus pais que sempre apoiaram e incentivaram os meus estudos;

Ao pessoal da CPG pelo apoio oferecido;

A todos que direta ou indiretamente colaboraram na execução e realização deste sonho que é este trabalho.

MÉTODOS DE AJUSTE DE CURVAS DE EFICIÊNCIA OBTIDAS POR MEIO DE ESPECTRÔMETROS GAMA DE HPGe

Vanderlei Cardoso

RESUMO

O presente trabalho descreve algumas metodologias desenvolvidas para ajustar curvas de eficiências obtidas por meio de um espectrômetro de HPGe. Os valores interpolados foram determinados por ajuste polinomial simples, por ajuste polinomial envolvendo a razão entre a eficiência de pico experimental e a eficiência total determinada pelo método de Monte Carlo em função da energia. Além disso, foi efetuado um ajuste não-linear, utilizando uma função polinomial segmentada e aplicando o método de Gauss-Marquardt. Para a determinação da área sob o pico de absorção total, foram estudados diferentes metodologias para a obtenção da contagem de fundo. Esta informação foi obtida por integração numérica, ou com auxílio de funções analíticas associadas à região das contagens de fundo. Uma fonte não-calibrada foi incluída no processo de determinação da curva de eficiência, com o objetivo de contribuir com pontos de ajuste adicionais. Como consequência, foi possível determinar a atividade desta fonte não-calibrada. Em todos os ajustes desenvolvidos no presente trabalho, utilizou-se a metodologia de matriz de covariância, que é um procedimento essencial para uma descrição completa das incertezas parciais envolvidas.

METHODS FOR FITTING OF EFFICIENCY CURVES OBTAINED BY MEANS OF HPGe GAMMA-RAY SPECTROMETERS

Vanderlei Cardoso

ABSTRACT

The present work describes a few methodologies developed for fitting efficiency curves obtained by means of a HPGe gamma-ray spectrometer. The interpolated values were determined by simple polynomial fitting and polynomial fitting between the ratio of experimental peak efficiency and total efficiency, calculated by Monte Carlo technique, as a function of gamma-ray energy. Moreover, non-linear fitting has been performed using a segmented polynomial function and applying the Gauss-Marquardt method. For the peak area obtainment different methodologies were developed in order to estimate the background area under the peak. This information was obtained by numerical integration or by using analytical functions associated to the background. One non-calibrated radioactive source has been included in the curve efficiency in order to provide additional calibration points. As a by-product, it was possible to determine the activity of this non-calibrated source. For all fittings developed in the present work the covariance matrix methodology was used, which is an essential procedure in order to give a complete description of the partial uncertainties involved.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	1
1.1	ASPECTOS GERAIS.....	1
1.2	OBJETIVO E JUSTIFICATIVAS.....	2
1.3	APRESENTAÇÃO DOS CAPÍTULOS	3
2	FUNDAMENTOS TEÓRICOS	4
2.1	INTERAÇÃO DA RADIAÇÃO COM A MATÉRIA	4
2.1.1	INTRODUÇÃO.....	4
2.1.2	SEÇÃO DE CHOQUE PARA FÓTONS	5
2.1.3	EFICIÊNCIA DE DETEÇÃO	10
2.2	MÉTODO DE MONTE CARLO.....	12
2.2.1	INTRODUÇÃO.....	12
2.2.2	PROBLEMAS QUE PODEM SER RESOLVIDOS PELO MÉTODO DE MONTE CARLO	13
2.2.3	TRANSPORTE DE RADIAÇÃO GAMA PELO MÉTODO DE MONTE CARLO	15
2.3	MÉTODOS PARA INTERPOLAÇÃO DE CURVAS	17
2.3.1	INTERPOLAÇÃO POLINOMIAL	17
2.3.2	AJUSTE DE FUNÇÕES PELO MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS.....	18
2.3.2.1	Funções Lineares nos Parâmetros	19
2.3.2.2	Funções não lineares nos parâmetros.....	24
2.3.2.2.1	Linearização por expansão em série de Taylor.....	24
2.3.2.2.2	Método de Gauss-Marquardt	27
2.3.3	MISTURA DE FONTES CALIBRADAS E NÃO-CALIBRADAS (<i>MIXING</i>)	30
2.4	ESPECTROSCOPIA X E GAMA COM DETETORES HPGe E GE(LI)	31
2.4.1	INTRODUÇÃO.....	31
2.4.2	EFICIÊNCIA DE DETEÇÃO.....	32
2.4.2.1	Área sob o pico de absorção total	35
2.4.2.1.1	Integração numérica	36
2.4.2.1.2	Cálculo da área por meio de função degrau.....	37
2.4.2.2	Fatores de correção	39
2.4.2.2.1	Decaimento	39
2.4.2.2.2	Fator geométrico:.....	40
2.4.2.2.3	Fator de atenuação:	41
2.4.2.2.4	Tempo morto e empilhamento de pulsos	41
2.4.2.2.5	Correção para efeito de soma em cascata	42
2.4.2.3	Análise das incertezas na eficiência de deteção.....	43
3	PARTE EXPERIMENTAL	44
3.1	DESCRIÇÃO DO ESPECTRÔMETRO DE HPGe	44
3.2	DESCRIÇÃO DAS FONTES RADIOATIVAS UTILIZADAS NA CALIBRAÇÃO	47
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	48
4.1	EFICIÊNCIAS EXPERIMENTAIS	48

4.2	AJUSTE DAS CURVAS DE EFICIÊNCIA EM FUNÇÃO DA ENERGIA DE RADIAÇÃO	
	GAMA	50
4.2.1	AJUSTE POLINOMIAL.....	51
4.2.1.1	Área calculada por integração numérica.....	51
4.2.1.2	Ajuste para área calculada pela Função Degrau (1).....	52
4.2.1.3	Ajuste para área calculada pela Função Degrau (2).....	54
4.2.2	AJUSTE POLINOMIAL COM AUXÍLIO DO MÉTODO DE MONTE CARLO	55
4.2.2.1	Ajuste feito com o cálculo da área por integração numérica	56
4.2.2.2	Ajuste feito para área calculada pela Função Degrau (1)	57
4.2.2.3	Ajuste feito para área calculada pela Função Degrau (2)	58
4.2.3	AJUSTE NÃO-LINEAR POR GAUSS-MARQUARDT.....	60
4.2.3.1	Ajuste com-cálculo de área por integração numérica (ponto de junção fixo)	60
4.2.3.2	Ajuste com cálculo de área por Degrau (2) (ponto de junção fixo).....	62
4.2.3.3	Ajuste feito com o cálculo da área por integração numérica	63
4.2.3.4	Ajuste feito com o cálculo da área pela Função Degrau (2)	65
	REPRESENTAÇÃO GRÁFICA DA CURVA DE EFICIÊNCIA AJUSTADA.....	66
4.4	ATIVIDADE DE ^{24}NA CALCULADA POR MEIO DOS PARÂMETROS DE AJUSTE	67
5	CONCLUSÕES	68
6	APÊNDICE.....	70
6.1	PROGRAMA ALMIX - AJUSTE LINEAR POLINOMIAL COM “MIXING”	70
6.2	PROGRAMA MARMIX: AJUSTE GAUSS MARQUARDT, COM “MIXING”	78
7	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	92

ÍNDICE DE FIGURAS

FIGURA 2-1 ESPECTRO DE ENERGIA CORRESPONDENTE À ABSORÇÃO TOTAL DE UM FEIXE DE RADIAÇÃO GAMA OU X MONOENERGÉTICO ^[1]	7
FIGURA 2-2 ESPALHAMENTO COMPTON	8
FIGURA 2-3 REPRESENTAÇÃO DOS PICOS CORRESPONDENTES À ENERGIA DEPOSITADA NO DETETOR PELO PROCESSO DE PRODUÇÃO-DE-PARES. O PICO A CORRESPONDE AO <i>DUPLO-ESCAPE</i> , B CORRESPONDE AO <i>SIMPLES-ESCAPE</i> E C AO <i>PICO DE ABSORÇÃO TOTAL</i>	10
FIGURA 2-4 COMPORTAMENTO RELATIVA DOS TRÊS PRINCIPAIS TIPOS DE INTERAÇÃO DE FÓTONS X OU GAMA COM A MATÉRIA ^[1]	11
FIGURA 2-5 FLUXOGRAMA DO PROGRAMA DE MONTE CARLO MCEFIC ^[27]	16
FIGURA 2-6 ESPECTRO DE ALTURA DE PULSO COMPARATIVO, USANDO UM CINTILADOR DE NAI(Tl) E UM DETETOR DE Ge(Li) ^[1]	32
FIGURA 2-7 CONTRIBUIÇÃO DOS DIFERENTES MECANISMOS DE PERDA DE ENERGIA ^[1] NOS EVENTOS DE PICO DE ABSORÇÃO TOTAL	34
FIGURA 2-8 ESQUEMA DOS PARÂMETROS UTILIZADOS NO MÉTODO DE INTEGRAÇÃO NUMÉRICA DA ÁREA SOB O PICO DE ABSORÇÃO TOTAL	36
FIGURA 3-1 SISTEMA ELETRÔNICO PARA MEDIDA DA RADIAÇÃO GAMA COM O HPGe	45
FIGURA 3-2 ARRANJO EXPERIMENTAL PARA AS MEDIDAS COM ESPECTRÔMETRO DE HPGe: 1 – DETETOR DE HPGe; 2 – BASE DE LUCITE; 3 – ANEL FIXADOR; 4 – TUBO DE LUCITE. O SUPORTE POSSUI ALTURA FIXA (E); 5 – SUPORTE DE LUCITE PARA FONTE, COM DIÂMETROS INTERNOS (B) DIFERENTES, DEPENDENDO DO TIPO DE FONTE: PADRÃO COM ANEL DE ALUMÍNIO OU DE ANÉIS DE AÇO INOX; 6 – ANEL DE LUCITE E 7 – CRIOSTATO	46
FIGURA 4-1 RESÍDUOS PERCENTUAIS ENTRE OS VALORES EXPERIMENTAIS E AJUSTADOS PARA A CURVA DE EFICIÊNCIA EM FUNÇÃO DA ENERGIA GAMA. A BARRAS DE ERROS CORRESPONDEM AO DESVIO PADRÃO NO VALOR EXPERIMENTAL. CONTAGEM DE FUNDO POR INTEGRAÇÃO NUMÉRICA	52
FIGURA 4-2 RESÍDUOS PERCENTUAIS ENTRE OS VALORES EXPERIMENTAIS E AJUSTADOS PARA A CURVA DE EFICIÊNCIA EM FUNÇÃO DA ENERGIA GAMA. A BARRAS DE ERROS CORRESPONDEM AO DESVIO PADRÃO NO VALOR EXPERIMENTAL. CONTAGEM DE FUNDO POR FUNÇÃO DEGRAU (1)	53
FIGURA 4-3 RESÍDUOS PERCENTUAIS ENTRE OS VALORES EXPERIMENTAIS E AJUSTADOS PARA A CURVA DE EFICIÊNCIA EM FUNÇÃO DA ENERGIA GAMA. A BARRAS DE ERROS CORRESPONDEM AO DESVIO PADRÃO NO VALOR EXPERIMENTAL. CONTAGEM DE FUNDO POR FUNÇÃO DEGRAU (2)	55
FIGURA 4-4 RESÍDUOS PERCENTUAIS ENTRE OS VALORES EXPERIMENTAIS E AJUSTADOS PARA A CURVA DE EFICIÊNCIA EM FUNÇÃO DA ENERGIA GAMA. A BARRAS DE ERROS CORRESPONDEM AO DESVIO PADRÃO NO VALOR EXPERIMENTAL. CONTAGEM DE FUNDO POR INTEGRAÇÃO NUMÉRICA	56
FIGURA 4-5 RESÍDUOS PERCENTUAIS ENTRE OS VALORES EXPERIMENTAIS E AJUSTADOS PARA A CURVA DE EFICIÊNCIA EM FUNÇÃO DA ENERGIA GAMA. A BARRAS DE ERROS CORRESPONDEM AO DESVIO PADRÃO NO VALOR EXPERIMENTAL. CONTAGEM DE FUNDO POR FUNÇÃO DEGRAU (1)	58
FIGURA 4-6 RESÍDUOS PERCENTUAIS ENTRE OS VALORES EXPERIMENTAIS E AJUSTADOS PARA A CURVA DE EFICIÊNCIA EM FUNÇÃO DA ENERGIA GAMA. A BARRAS DE ERROS CORRESPONDEM AO DESVIO PADRÃO NO VALOR EXPERIMENTAL. CONTAGEM DE FUNDO POR FUNÇÃO DEGRAU (2)	59
FIGURA 4-7 RESÍDUOS PERCENTUAIS ENTRE OS VALORES EXPERIMENTAIS E AJUSTADOS PARA A CURVA DE EFICIÊNCIA EM FUNÇÃO DA ENERGIA GAMA. A BARRAS DE ERROS CORRESPONDEM AO DESVIO PADRÃO NO VALOR EXPERIMENTAL. CONTAGEM DE FUNDO POR INTEGRAÇÃO NUMÉRICA	61
FIGURA 4-8 RESÍDUOS PERCENTUAIS ENTRE OS VALORES EXPERIMENTAIS E AJUSTADOS PARA A CURVA DE EFICIÊNCIA EM FUNÇÃO DA ENERGIA GAMA. A BARRAS DE ERROS CORRESPONDEM AO DESVIO PADRÃO NO VALOR EXPERIMENTAL. CONTAGEM DE FUNDO PELA FUNÇÃO DEGRAU (2)	63
FIGURA 4-9 RESÍDUOS PERCENTUAIS ENTRE OS VALORES EXPERIMENTAIS E AJUSTADOS PARA A CURVA DE EFICIÊNCIA EM FUNÇÃO DA ENERGIA GAMA. A BARRAS DE ERROS CORRESPONDEM AO DESVIO PADRÃO NO VALOR EXPERIMENTAL. CONTAGEM DE FUNDO POR INTEGRAÇÃO NUMÉRICA	64
FIGURA 4-10 RESÍDUOS PERCENTUAIS ENTRE OS VALORES EXPERIMENTAIS E AJUSTADOS PARA A CURVA DE EFICIÊNCIA EM FUNÇÃO DA ENERGIA GAMA. A BARRAS DE ERROS CORRESPONDEM AO DESVIO PADRÃO NO VALOR EXPERIMENTAL. CONTAGEM DE FUNDO PELA FUNÇÃO DEGRAU (2)	66
FIGURA 4-11 CURVA OBTIDA PELO AJUSTE DESCrito NO ITEM (4.2.1.3). OS PONTOS REPRESENTAM OS VALORES DAS EFICIÊNCIAS DE PICO EXPERIMENTAIS, COM AS RESPECTIVAS INCERTEZAS. A CURVA CONTÍNUA REPRESENTA O AJUSTE EFETUADO POR MÍNIMOS QUADRADOS	66

ÍNDICE DE TABELAS

TABELA 4-1 RADIONUCLÍDEO, MEIA-VIDA, ENERGIA GAMA, PROBABILIDADE DE EMISSÃO GAMA POR DECAIMENTO, ATIVIDADE E FATORES DE CORREÇÃO PARA O EFEITO SOMA EM CASCATA (F_s), PARA AS FONTES RADIOATIVAS UTILIZADAS NO PRESENTE TRABALHO. OS NÚMEROS ENTRE PARÊNTESSES REPRESENTAM AS INCERTEZAS NOS ÚLTIMOS DÍGITOS.....	48
TABELA 4-2 ENERGIAS, EFICIÊNCIAS EXPERIMENTAIS (1), (2) E (3) E RESPECTIVOS ERROS PARCIAIS.....	50
TABELA 4-3 PARÂMETROS ESTIMADOS, DESVIOS PADRÔES (ENTRE PARÊNTESSES) E RESPECTIVAS MATRIZES DE COVARIÂNCIA (TRIÂNGULO SUPERIOR, INCLUINDO A DIAGONAL PRINCIPAL) E CORRELAÇÃO (TRIÂNGULO INFERIOR). CONTAGEM DE FUNDO POR INTEGRAÇÃO NUMÉRICA.....	51
TABELA 4-4 PARÂMETROS ESTIMADOS, DESVIOS PADRÔES (ENTRE PARÊNTESSES) E RESPECTIVAS MATRIZES DE COVARIÂNCIA (TRIÂNGULO SUPERIOR, INCLUINDO A DIAGONAL PRINCIPAL) E CORRELAÇÃO (TRIÂNGULO INFERIOR). FUNÇÃO DEGRAU (1).....	53
TABELA 4-5 PARÂMETROS ESTIMADOS, DESVIOS PADRÔES (ENTRE PARÊNTESSES) E RESPECTIVAS MATRIZES DE COVARIÂNCIA (TRIÂNGULO SUPERIOR, INCLUINDO A DIAGONAL PRINCIPAL) E CORRELAÇÃO (TRIÂNGULO INFERIOR). FUNÇÃO DEGRAU (2).....	54
TABELA 4-6 PARÂMETROS ESTIMADOS, DESVIOS PADRÔES (ENTRE PARÊNTESSES) E RESPECTIVAS MATRIZES DE COVARIÂNCIA (TRIÂNGULO SUPERIOR, INCLUINDO A DIAGONAL PRINCIPAL) E CORRELAÇÃO (TRIÂNGULO INFERIOR). INTEGRAÇÃO NUMÉRICA.....	56
TABELA 4-7 PARÂMETROS ESTIMADOS, DESVIOS PADRÔES (ENTRE PARÊNTESSES) E RESPECTIVAS MATRIZES DE COVARIÂNCIA (TRIÂNGULO SUPERIOR, INCLUINDO A DIAGONAL PRINCIPAL) E CORRELAÇÃO (TRIÂNGULO INFERIOR). FUNÇÃO DEGRAU (1).....	57
TABELA 4-8 PARÂMETROS ESTIMADOS, DESVIOS PADRÔES (ENTRE PARÊNTESSES) E RESPECTIVAS MATRIZES DE COVARIÂNCIA (TRIÂNGULO SUPERIOR, INCLUINDO A DIAGONAL PRINCIPAL) E CORRELAÇÃO (TRIÂNGULO INFERIOR). FUNÇÃO DEGRAU (2).....	59
TABELA 4-9 PARÂMETROS ESTIMADOS, DESVIOS PADRÔES (ENTRE PARÊNTESSES) E RESPECTIVAS MATRIZES DE COVARIÂNCIA (TRIÂNGULO SUPERIOR, INCLUINDO A DIAGONAL PRINCIPAL) E CORRELAÇÃO (TRIÂNGULO INFERIOR). INTEGRAÇÃO NUMÉRICA.....	61
TABELA 4-10 PARÂMETROS ESTIMADOS, DESVIOS PADRÔES (ENTRE PARÊNTESSES) E RESPECTIVAS MATRIZES DE COVARIÂNCIA (TRIÂNGULO SUPERIOR, INCLUINDO A DIAGONAL PRINCIPAL) E CORRELAÇÃO (TRIÂNGULO INFERIOR). FUNÇÃO DEGRAU (2)	62
TABELA 4-11 PARÂMETROS ESTIMADOS, DESVIOS PADRÔES (ENTRE PARÊNTESSES) E RESPECTIVAS MATRIZES DE COVARIÂNCIA (TRIÂNGULO SUPERIOR, INCLUINDO A DIAGONAL PRINCIPAL) E CORRELAÇÃO (TRIÂNGULO INFERIOR). INTEGRAÇÃO NUMÉRICA.....	64
TABELA 4-12 PARÂMETROS ESTIMADOS, DESVIOS PADRÔES (ENTRE PARÊNTESSES) E RESPECTIVAS MATRIZES DE COVARIÂNCIA (TRIÂNGULO SUPERIOR, INCLUINDO A DIAGONAL PRINCIPAL) E CORRELAÇÃO (TRIÂNGULO INFERIOR). FUNÇÃO DEGRAU (2).....	65
TABELA 4-13 ATIVIDADE DA FONTE DE ^{24}Na CALCULADA PARA OS DIFERENTES MÉTODOS DE AJUSTE	67

1 INTRODUÇÃO

1.1 Aspectos Gerais

A técnica de espectrometria gama, utilizando detetores de HPGe, tem sido amplamente empregada em diversas áreas de pesquisa, em razão do excelente poder de resolução em energia apresentado por estes tipos de detetores^[1]. Em Metrologia Nuclear, esta técnica tem sido utilizada para a determinação da atividade de radionuclídeos, quando não se dispõe de um padrão adequado para a comparação direta. Neste caso, torna-se necessária a obtenção de uma curva de eficiência de detecção em função da energia gama, por meio da qual os valores de eficiência para as energias do radionuclídeo em questão são determinados por interpolação. Para esta determinação, normalmente utiliza-se a área sob o pico de absorção total, correspondente à energia gama considerada.

Vários métodos têm sido utilizados para modelar a função que relaciona a eficiência para o pico de absorção total e a energia da radiação gama ou X^[1-4]. Porém, embora haja uma multiplicidade de funções apresentadas na literatura, nenhum método em particular tem sido recomendado para modelar esta relação física, utilizando detetores de HPGe^[2].

A complexidade da matemática envolvida não assegura uma interpolação correta, uma vez que os valores de eficiência podem estar alterados por efeitos espectrais e nucleares, tais como: empilhamento de pulsos, efeito de soma em cascata, tempo morto, espalhamento da radiação em materiais vizinhos ao detector etc. Apenas em casos ideais, todos estes efeitos podem tornar-se desprezíveis. Entretanto, o comportamento do perfil da função ajustada deve manter-se fiel às considerações físicas da relação entre eficiência

e energia e não ser influenciado por estes efeitos experimentais. Além disso, o tratamento rigoroso da incerteza nos valores interpolados para a eficiência requer o uso da metodologia de Matriz de Covariâncias. A inclusão deste procedimento torna-se essencial para uma descrição completa das incertezas parciais envolvidas.^[4-7]

O Laboratório de Metrologia Nuclear (LMN) do IPEN-CNEN/SP tem adquirido uma larga experiência nos campos de padronização de radionuclídeos e de espectrometria gama e X^[8-17,41], com participação em diversas comparações internacionais patrocinadas pelo Bureau International des Poids et Mesures^[17-20], o que confere ao LMN um excelente grau de confiabilidade em suas calibrações. Entretanto, um rigor maior torna-se necessário, com o propósito de reduzir a incerteza total obtida.

1.2 Objetivo e Justificativas

O objetivo do presente trabalho foi avaliar algumas metodologias de interpolação de curvas de eficiência para detektores semicondutores do tipo HPGe. Isto servirá para aperfeiçoar a metodologia aplicada aos sistemas de medida do Laboratório de Metrologia Nuclear do IPEN, e assim melhorar as calibrações de fontes radioativas efetuadas nestes sistemas. Diferentes técnicas foram estudadas, tais como: Método dos Mínimos Quadrados, aplicado a funções lineares simples e segmentadas por meio do Método de Gauss-Marquardt, para funções não-lineares. Foi estudada também uma metodologia para combinar o Método de Monte Carlo com métodos de ajuste convencionais, de modo a possibilitar a interpolação, utilizando um número pequeno de pontos experimentais. Além disso, foi introduzido o processo de ajuste de eficiência no qual uma ou mais fontes radioativas não-calibradas foram incluídas, juntamente com as calibradas.^[33] Todo o tratamento inclui a metodologia de análise de covariância no

cálculo das incertezas. Os dados experimentais foram obtidos no Laboratório de Metrologia Nuclear do IPEN.

1.3 Apresentação dos Capítulos

O capítulo 2 apresenta os fundamentos teóricos do trabalho, incluindo aspectos básicos da interação da radiação com a matéria, Método de Monte Carlo, métodos de ajustes de curvas e características principais de espectrômetros gama baseados em detectores de HPGe.

No capítulo 3 é apresentada a parte experimental, descrevendo o espectrômetro de HPGe do Laboratório de Metrologia Nuclear do IPEN, além das características principais das fontes radioativas utilizadas na calibração.

No capítulo 4 são apresentados os resultados obtidos e sua discussão. Finalmente, no capítulo 5 são apresentadas as conclusões sobre o trabalho e propostas de trabalho.

2 FUNDAMENTOS TEÓRICOS

2.1 Interação da radiação com a matéria

2.1.1 Introdução

Quando partículas carregadas atravessam a matéria, elas sofrem colisões elásticas e inelásticas com os átomos e moléculas do meio. Enquanto a colisão elástica produz deflexões na trajetória da partícula incidente, a colisão inelástica produz íons positivos e elétrons, usualmente chamados de par-de-íons. No caso de partículas carregadas pesadas, as colisões podem dar origem a núcleos de recuo. A produção dos pares-de-íons por partículas carregadas se dá por interações Coulombianas. Outras formas de transferência de energia podem ocorrer por meio de excitação dos átomos ou moléculas e pela radiação de freimento (“Bremsstrahlung”). Esta última ocorre preferencialmente pela interação dos elétrons com o campo Coulombiano nuclear e é dominante para altas energias e materiais de alto número atômico.

A energia dos fótons X ou gama pode ser expressa como $E = h\nu$, onde ν é a freqüência do fóton e h é a constante de Planck. Interações desse fótons com a matéria são consideradas independentes da origem do fóton, dependendo apenas de sua energia.

Diferentemente das partículas carregadas, um feixe de radiação gama bem colimado apresenta uma atenuação exponencial na matéria. Isto ocorre porque os fótons são absorvidos ou espalhados em um único evento. Existem diversos tipos de interação que causam espalhamento ou absorção de fótons X ou gama, conforme apresentado a seguir:

Tipo de interação	Efeito da radiação
1- Interação com elétrons atômicos	a) absorção completa
2. Interação com nucleons	b) espalhamento elástico (coerente)
3- Interação com o campo elétrico ao redor do núcleo ou elétron	c) espalhamento inelástico (incoerente)
4- Interação com o campo nuclear ao redor dos nucleons	

Portanto, há doze maneiras de combinar as colunas 1 e 2, resultando em doze processos diferentes. Porém, muitos desses processos ocorrem apenas raramente. Os processos principais de transferência de energia pelos raios X e gama na matéria são: (i) efeito Fotoelétrico, ocorrendo com maior probabilidade em baixas energias; (ii) efeito Compton, ocorrendo com maior probabilidade em energias intermediárias; e (iii) Produção-de-Pares (eletron-pósitron) que ocorre para fótons com energia acima de 1022,0 keV.

2.1.2 Seção de choque para fótons

As medidas de atenuação de raios X e gama baseiam-se no fato de que a intensidade da radiação decresce ao passar através da matéria. Em tal passagem, para uma pequena espessura Δx , a variação na intensidade ΔI é proporcional à espessura e a intensidade incidente I . Isto é,

$$\Delta I = -\mu I \Delta x \quad (2.1)$$

onde μ é uma constante de proporcionalidade chamada de coeficiente de atenuação ou seção de choque macroscópica total. Se a radiação é monoenergética, μ é constante e a integração dessa equação fornece a intensidade da radiação transmitida por um material de espessura x :

$$\frac{I}{I_0} = e^{-\mu x} \quad (2.2)$$

onde I_0 é a intensidade da radiação incidente.

Os três processos de interação da radiação gama com a matéria (Efeito Fotoelétrico, Efeito Compton, e Produção-de-Pares) agem de forma independente. Desse modo, é possível separar o coeficiente de atenuação em três, designados por τ (Fotoelétrico), σ (Compton) e κ (produção de pares):

$$\mu = \tau + \sigma + \kappa \quad (2.3)$$

Um quarto processo que é o espalhamento coerente (σ_{coe}) também pode contribuir para atenuação do feixe de fôtons, embora não transfira energia aos átomos do meio:

$$\mu = \tau + \sigma + \kappa + \sigma_{coe} \quad (2.4)$$

Para energias abaixo de aproximadamente 100keV, a incidência maior de interação de fôtons X ou gama ou X em materiais de alto número atômico Z é por meio do efeito Fotoelétrico. Neste efeito, a energia do fôton $h\nu$ é transferida totalmente para um elétron ligado, o qual abandona o átomo com uma energia igual a do fôton, menos a energia de ligação (E_b) da camada K, L, M, etc., do qual é ejetado:

$$E_{e^-} = h\nu - E_b \quad (2.5)$$

onde E_{e^-} é a energia cinética do elétron ejetado. A energia que resta aparece na forma de raio X característico ou elétron Auger durante o preenchimento da vacância na camada interna.

Um fóton incidente não pode ser totalmente absorvido por um elétron livre. A absorção total somente ocorre se o elétron estiver ligado ao átomo. Desse modo, o momento é conservado pelo recuo do átomo residual. Os elétrons mais ligados possuem maior probabilidade de absorção por efeito fotoelétrico, sendo que aproximadamente 80% dos processos de absorção fotoelétrica ocorrem na camada K, desde que a energia do fóton incidente $h\nu$ exceda a energia de ligação correspondente. O efeito fotoelétrico possui uma forte dependência com o número atômico (Z^3 ou Z^4) e cai com $1/(h\nu)^3$. Portanto, é um processo dominante em baixas energias.

A absorção fotoelétrica é o processo ideal, quando há interesse em medir a energia do fóton original. Como a energia dissipada por emissão do raio X característicos e elétrons Auger freqüentemente é absorvida no meio, um único pico aparece no espectro de energia absorvida, correspondendo a energia dos raios gama incidentes (figura 2.1)

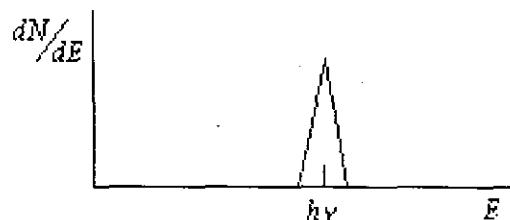


Figura 2-1 Espectro de energia correspondente à absorção total de um feixe de radiação gama ou X monoenergético^[1]

O efeito dominante em energias intermediárias é o Efeito Compton. No efeito Compton, o fóton é espalhado e comporta-se como uma partícula, com energia $h\nu$ e momento $h\nu/c$. A energia é transferida para um elétron livre que é defletido em uma certa direção, sendo o fóton espalhado com uma energia menor $h\nu'$. A divisão da energia entre os dois depende do ângulo de espalhamento, conforme mostra a figura 2.2. A energia do fóton espalhado $h\nu'$, em termos de ângulo de espalhamento θ , é dada por [35].

$$h\nu' = \frac{h\nu}{I + \alpha(1 - \cos \theta)} \quad (2.6)$$

onde: $\alpha = \frac{h\nu}{m_o c^2}$

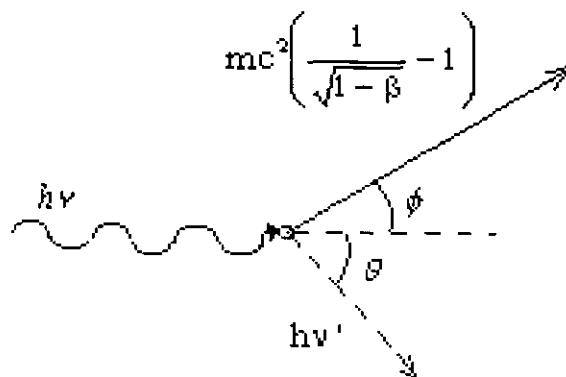


Figura 2-2 Espalhamento Compton

A energia cinética do elétron de recuo resulta^[28]:

$$E_{e^-} = h\nu - h\nu' = h\nu \left(I - \frac{I}{I + \alpha(1 - \cos \theta)} \right) \quad (2.7)$$

Pode-se deduzir que, para um ângulo de espalhamento muito pequeno ($\theta \approx 0$), $h\nu' \approx h\nu$ e $E_{e^-} \approx 0$. O elétron de recuo Compton possui uma energia muito baixa e o fóton espalhado possui aproximadamente a mesma energia do fóton incidente. Para uma colisão frontal, ou seja $\theta = \pi$, o fóton incidente é retro-espalhado, enquanto o elétron de recuo segue em ângulos dianteiros. Essa situação representa a energia máxima que pode ser transferida para um elétron em uma interação.

As relações que determinam a seção de choque Compton indicam que o espalhamento Compton é dominante em energias intermediárias de fótons X ou gama. Por outro lado, esse processo está relacionado com a densidade de elétrons no meio. Como essa densidade é aproximadamente constante em diferentes materiais, resulta que a probabilidade de interação por efeito Compton praticamente independe do tipo de material absorvedor.

Para um fóton incidente de energia maior do que duas vezes a energia de repouso do elétron (1022,0 keV), um terceiro tipo de interação, conhecido como produção-de-pares, torna-se importante. Nesta interação, o fóton é completamente absorvido e em seu lugar aparece um par elétron-pósitron. O processo de aniquilação de pares ocorre somente para partículas carregadas, principalmente nas proximidades do campo Coulombiano de um núcleo. A energia em excesso, acima de 1022,0 keV, é transferida na forma de energia cinética das partículas^[1]:

$$E_{e^-} + E_{e^+} = h\nu - 2m_0c^2 \quad (2.8)$$

Para energias típicas, o elétron e o pósitron penetram no máximo poucos milímetros antes de perder toda energia cinética no meio absorvedor. Em seguida, o

pósitron aniquila-se com um elétron, produzindo dois fótons com energias 511,0 keV, denominados fótons de aniquilação. Os processos de produção de pares e aniquilação normalmente ocorrem dentro do tempo de resolução do detetor, e os fótons de aniquilação propagam-se essencialmente em direções opostas, um relação ao outro.

O pico correspondente à energia cinética total do par (elétron-pósitron) criado pelo fóton incidente, está localizado $2mc^2$ abaixo da energia do fóton incidente, conforme ilustrado na Figura 2.3. Isto corresponde ao duplo escape dos raios gamas de aniquilação. Um outro pico pode ocorrer, chamado simples escape, quando apenas um dos fótons de aniquilação for absorvido no meio. Caso ambos sejam absorvidos, os eventos corresponderão ao pico de absorção total.

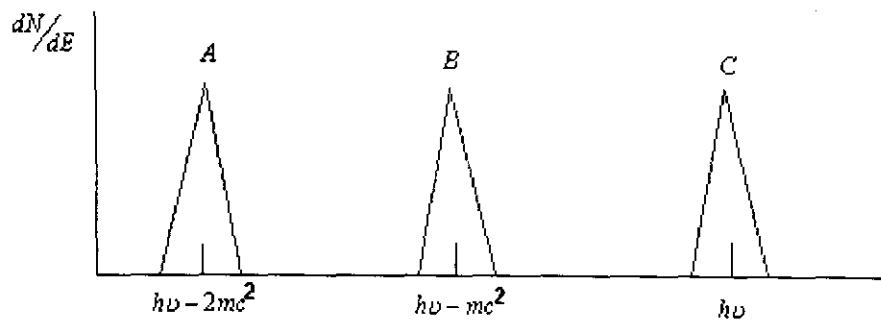


Figura 2-3 Representação dos picos correspondentes à energia depositada no detetor pelo processo de Produção-de-Pares. O pico **A** corresponde ao *Duplo-Escape*, **B** corresponde ao *Simples-Escape* e **C** ao *Pico de Absorção Total*

2.1.3 Eficiência de Detecção

A detecção da radiação gama é possível pelas interações dos elétrons secundários produzidos pelos processos acima descritos, no meio absorvedor. Os fótons X ou gama produzem elétrons dentro do volume sensível dos detetores, tais como cristais de Iodeto de Sódio, germânio e silício. No germânio e silício as interações produzem

pares de elétron-lacuna, que são coletados e dão origem a pulsos, cuja amplitude está relacionada com a energia depositada no cristal.

O comportamento relativo destes três processos para diferentes materiais absorvedores e energias de fótons X ou gama é ilustrada na figura 2.4. A curva à esquerda representa a energia para a qual a absorção fotoelétrica e espalhamento Compton são igualmente prováveis, em função do número atômico do absorvedor. A curva à direita representa a energia para a qual o espalhamento Compton e produção-de-pares são igualmente prováveis. Três regiões estão assim definidas na figura, dentro das quais a absorção fotoelétrica, espalhamento Compton, ou a produção de pares é dominante.

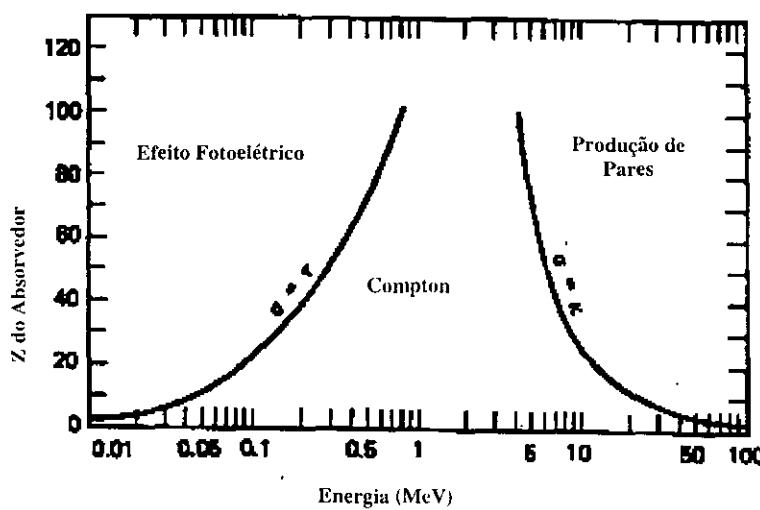


Figura 2-4 Comportamento relativa dos três principais tipos de interação de fótons X ou gama com a matéria^[1].

Usualmente, considera-se dois tipos de eficiências: eficiência total (ϵ_T) e eficiência de pico (ϵ_p), definidas pelas seguinte relações:

$$\varepsilon_T = \frac{\text{número de gamas detetados}}{\text{número de gamas emitidos}} \quad (2.9)$$

$$\varepsilon_p = \frac{\text{número de gamas totalmente absorvidos no detector}}{\text{número de gamas emitidos}} \quad (2.10)$$

Estas eficiências podem ser determinadas de modo *absoluto* (com fontes radioativas calibradas) ou de modo *relativo* (com fontes não-calibradas), conforme descrito na seção 2.3.

2.2 Método de Monte Carlo

2.2.1 Introdução

Diversos fenômenos físicos não podem ser resolvidos analiticamente. Nestes casos, pode-se recorrer a métodos de simulação para obter aproximações da quantidade de interesse. De uma maneira geral, estes métodos tentam reproduzir, num ambiente controlado, o que se passa no problema real. A solução do problema consiste na simulação de variáveis aleatórias. Isto deu origem ao chamado *Método de Monte Carlo* (MMC), baseado na utilização de um gerador de números aleatórios equiprováveis.

Uma característica dos MMC é que seus algoritmos têm uma estrutura muito simples. Como regra, elabora-se primeiro um programa para a realização de um evento aleatório. Depois esse evento é repetido N vezes de modo que cada experiência seja independente das outras e toma-se a média dos resultados obtidos em todas experiências.

Outra característica, é a incerteza estatística, que é proporcional à $\sqrt{\frac{D}{N}}$, onde

D é uma constante e N é o numero de histórias. Esta fórmula permite observar que para diminuir o erro em 10 vezes é preciso aumentar N em 100 vezes. Tal aumento em N implica num aumento considerável no tempo de processamento. Técnicas de otimização podem ser aplicadas, de modo que a maioria das histórias geradas sejam aproveitadas para obter a grandeza de interesse.

2.2.2 Problemas que podem ser resolvidos pelo Método de Monte Carlo

Pode-se determinar um modelo probabilístico artificial que permita resolver diversos problemas matemáticos, até mesmo aqueles que não possuam a menor relação com questões aleatórias como, por exemplo, o cálculo da área de uma superfície. Como consequência, pode-se dizer que o método de Monte Carlo é um método geral para a solução de problemas matemáticos. Em particular, o método de Monte Carlo tem sido uma ferramenta computacional rotineira para problemas de transporte de partículas, com maior ênfase ao nêutron e ao fóton.

O sucesso do método de Monte Carlo depende de um conjunto de números aleatórios altamente confiáveis. Números aleatórios podem ser obtidos utilizando tabelas construídas através de procedimentos experimentais, como por exemplo, uma roleta de números. Entretanto, esses números podem não conter a uniformidade necessária que um cálculo de Monte Carlo requer. Mesmo que essa uniformidade exista, a utilização desta tabela requer uma grande área de memória para seu armazenamento, o que constitui uma desvantagem.

Geralmente, é dada preferência ao uso de números pseudo-aleatórios gerados por um algoritmo que produz uma seqüência de números aparentemente não-correlacionados, que estão uniformemente distribuídos em um determinado intervalo $[a,b]$ pré-definido. Em geral, um gerador de números aleatórios deve satisfazer os seguintes critérios básicos:

- 1) A distribuição de números deve ser uniforme dentro de um intervalo específico, e também deve satisfazer a alguns testes estatísticos.
- 2) O cálculo deve gerar uma grande quantidade de números únicos antes de repetir o ciclo.
- 3) O cálculo deve ser rápido.

Um método simples de multiplicação é muitas vezes usado para gerar números aleatórios. Um número inteiro é usado como ponto de partida ou “semente”, além de duas constantes inteiros escolhidas. Números aleatórios sucessivos são derivados de uma relação de recorrência:

$$r_{i+1} = (a \cdot r_i) \bmod m \quad (2.11)$$

Onde $\bmod m$, segundo a aritmética modular, indica que $r_{i+1} - ar_i$ é um múltiplo inteiro do número inteiro positivo m .

Com escolhas apropriadas das constantes **a** e **m** pode-se obter uma seqüência finita de números que parecem ser aleatoriamente selecionados entre 1 e $(m-1)$. Geradores de números aleatórios em algumas linguagens de programação são muitas vezes baseadas em algumas variações da equação (2.11).

O programa de Monte Carlo aplicado no presente trabalho foi elaborado em linguagem QBasic e utiliza a função de geração de números aleatórios incorporada no sistema. Ensaios de uniformidade, indicaram a boa qualidade deste gerador^[27].

2.2.3 Transporte de radiação gama pelo Método de Monte Carlo

Considere-se os três principais processos de interação da radiação gama com a matéria, a saber : efeito fotoelétrico (**A**), efeito Compton (**B**) e efeito de produção de pares (**C**). Supondo que as probabilidades de ocorrer os eventos **A**, **B** e **C** sejam respectivamente $p_1 = 0,2$, $p_2 = 0,5$ e $p_3 = 0,3$ ^[35], tem-se que, para um grande número N de números aleatórios r gerados entre (0,1):

0,2N estarão no intervalo $0 < r \leq 0,2$

0,5N estarão no intervalo $0,2 \leq r < 0,7$

0,3N estarão no intervalo $0,7 \leq r < 1$

Cada vez que a experiência é simulada, gera-se um número r . Se esse número está no intervalo correspondente ao evento **A**, aceita-se como ocorrido o evento **A**. se estiver no intervalo **B**, aceita-se **B** e assim sucessivamente. Deste modo, obtém-se a contabilidade dos diferentes eventos e, desse modo, pode-se determinar a taxa de ocorrência de cada um. Com isto, é possível obter-se os diversos parâmetros que caracterizam um sistema de detecção, tais como: energia depositada, eficiência etc.

A figura 2.5 apresenta um fluxograma do programa MCEFIC^[27], que foi utilizado no presente trabalho para calcular a eficiência de detecção de um cristal semicondutor de HPGe. A versão utilizada no presente trabalho é aplicável para fontes puntiformes e leva em consideração a presença da janela do detetor.

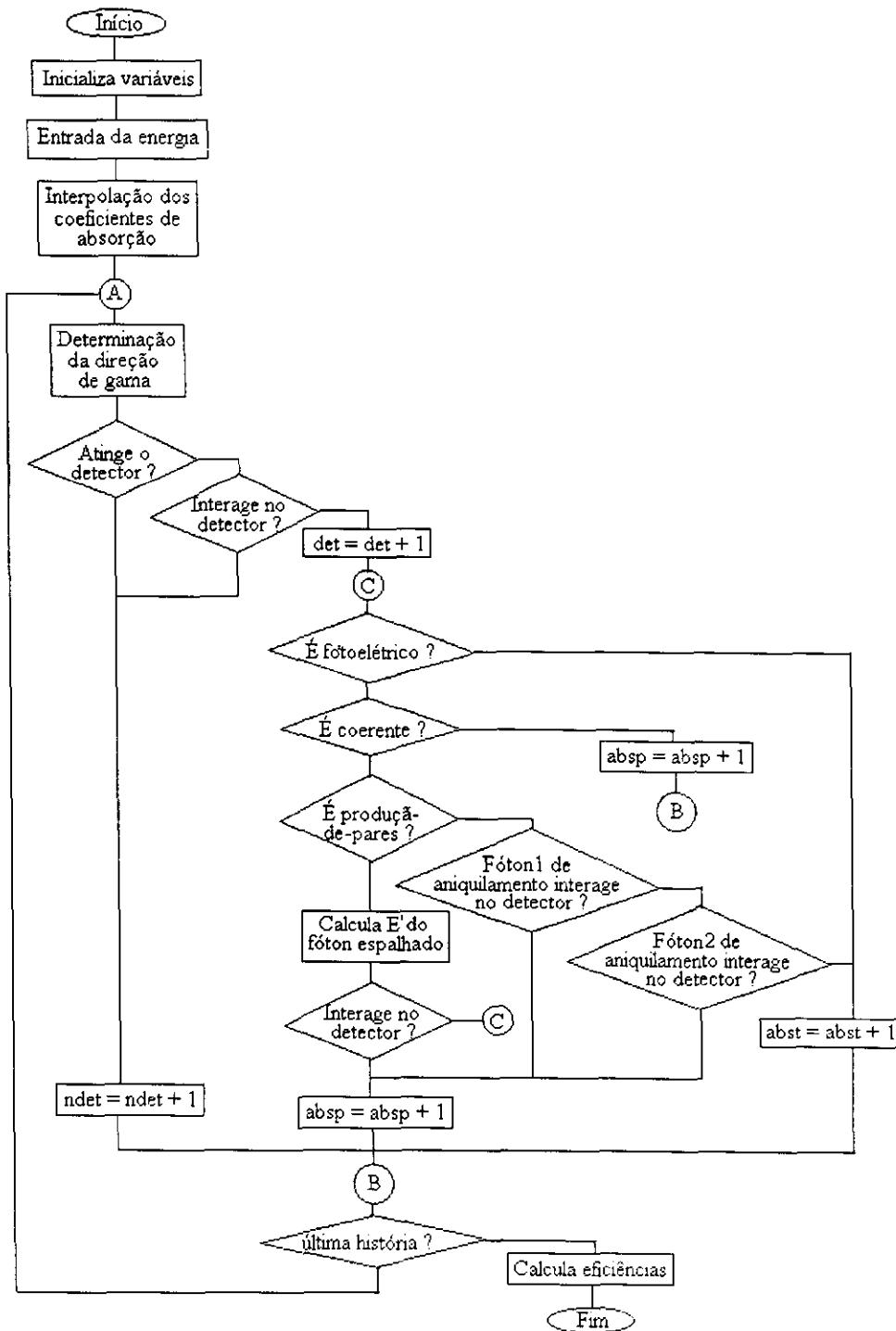


Figura 2-5 Fluxograma do programa de Monte Carlo MCEFIC^[27]

2.3 Métodos para interpolação de curvas

Como no presente trabalho, o objetivo foi estudar métodos de interpolação de curvas que relacionam a eficiência para o pico de absorção total, como função da energia gama, em detetores semicondutores do tipo HPGe. Para isto, diferentes métodos foram estudados, conforme descritos a seguir.

2.3.1 Interpolação polinomial

Antes do advento da computação, para se calcular valores de funções transcendentas o processo de interpolação era largamente usado. Normalmente o pesquisador possuía somente uma tabela com valores de tais funções para um certo conjunto de argumentos e, quando era necessário o cálculo de algum valor não tabelado, o pesquisador recorria à interpolação.

Considera-se uma função conhecida $y = f(x)$ apenas para um número finito e discreto de pontos $\{(x_0, y_0), (x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)\}$, obtidos experimentalmente, em um intervalo $[a, b]$. Desejando-se obter valores $f(x_k)$, $x_k \neq x_i$, utilizando os dados experimentais, realiza-se uma interpolação para se obter $f(x_k)$, aproximadamente. Para isso é construída a partir dos dados, uma nova função ϕ que interpola a f , tal que:

$$(1) \quad (\forall x_i, x_0 \leq x_i \leq x_n) [\phi(x_i) = f(x_i)]$$

$$(2) \quad (\forall x \in [x_0, x_n]) [\phi(x) \approx f(x)]$$

Pelo fato de extrema praticidade, os polinômios são a classe de funções mais usadas para resolver problemas de interpolação, pois possuem a vantagem de serem

fáceis de derivar, integrar e calcular seu valor. Alguns desses polinômios interpoladores são^[37]: Polinômio de Lagrange; Polinômio de Newton e *Splines* Cúbicos.

Apesar da praticidade, no presente trabalho estes processos de interpolação não foram utilizados, por não possibilitarem a inclusão das incertezas nos valores experimentais. Por esta razão, deu-se preferência aos métodos de ajustes de funções.

2.3.2 Ajuste de funções pelo método dos Mínimos Quadrados

Para um conjunto de dados $\{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_m, y_m)\}$, o ajuste é uma técnica de aproximação de funções com características diferentes da interpolação. Analogamente ao processo de ajuste usando polinômios interpoladores, seu objetivo é encontrar uma função $y = f(x)$ que relate x com y e permita calcular y para algum x que não conste dos dados experimentais.

As características principais que tornam este procedimento conveniente são:

- i) O ajuste traduz um comportamento médio dos dados, enquanto que no processo de interpolação, devido as incertezas (E_i) experimentais nos m pares (x_i, y_i) com i variando de I até m , tem-se $f(x_I) + E_I, f(x_2) + E_2, \dots, f(x_m) + E_m$ para y_1, y_2, \dots, y_m . Portanto, não há razão para se determinar uma função f que coincida com todos os pontos experimentais.
- ii) Para um conjunto com um número elevado de pontos, o processo de aproximação dos dados por interpolação pode gerar matrizes de covariâncias dos parâmetros de ordem também elevada. Como essa matriz é obtida pelo processo de inversão de uma outra matriz de mesma ordem, esse cálculo pode apresentar erros

numéricos significativos. Desta forma, as incertezas apresentadas para cada parâmetro ajustado podem não ser confiáveis.

iii) Conhecendo a natureza do problema é possível, em alguns casos, conhecer o tipo de função que relaciona as variáveis x e y .

O método de ajuste de funções, adotado no presente trabalho, aplica a técnica dos Mínimos Quadrados para algumas funções lineares e não-lineares nos parâmetros, conforme descrito a seguir.

2.3.2.1 Funções Lineares nos Parâmetros

A técnica dos mínimos quadrados para ajuste de dados, é utilizada no cálculo de um conjunto de constantes (coeficientes ou parâmetros) c_j , de uma função f^* que aproxima uma função f , desconhecida da forma^[38]:

$$f^*(x) = c_1\varphi_1(x) + c_2\varphi_2(x) + c_3\varphi_3(x) + \dots + c_n\varphi_n(x) \quad (2.12)$$

A função f^* é uma função linear com relação as constantes desconhecidas c_j (parâmetros), enquanto as funções básicas $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \dots, \varphi_n$ podem ser funções não-lineares em x .

As funções $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \dots, \varphi_n$ são escolhidas de acordo com a natureza dos dados experimentais. As constantes c_j são determinadas pela solução de um sistema de equações lineares algébricas descritas a seguir.

Define-se resíduo ou erro, como sendo a diferença entre $f^*(x)$ e y_i para um conjunto de pontos (x_i, y_i) :

$$R_i = f^*(x_i) - y_i \quad (2.13)$$

com i variando de 1 até um número natural m , onde $m > n$.

Para um conjunto de dados $\{(x_i, y_i) | i \text{ variando de } 1 \text{ até } m\}$, a função f^* que melhor se ajusta, pelo método dos mínimos quadrados, é a função cujos parâmetros c_j são determinados, de modo que a soma dos quadrados dos resíduos seja mínima:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^m R_i^2 = \sum (f^*(x_i) - y_i)^2 \quad (2.14)$$

ou, para ajustes ponderados:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^m R_i^2 = \sum (f^*(x_i) - y_i)^2 \omega_i \quad (2.15)$$

onde ω_i são os pesos em cada i -ésimo ponto.

No presente trabalho o conjunto de dados (x_i, y_i) a serem ajustados são obtidos experimentalmente e, portanto, deve-se levar em conta as incertezas nos valores de y_i . Estas incertezas podem estar correlacionadas entre si, assim é conveniente utilizar um tratamento matricial ao estudo de ajuste de funções, determinando-se uma matriz de covariância V_y , quadrada e de ordem m . Esta ordem m corresponde ao número de pontos experimentais a serem ajustados. Nesta matriz, os elementos da diagonal correspondem às variâncias dos pontos e os elementos fora da diagonal às covariâncias.

Neste tratamento matricial, o método dos mínimos quadrados consiste em minimizar uma função, que é semelhante à função (2.15)^[38]:

$$\chi^2 = (\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{c})' V^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{c}) \quad (2.16)$$

onde:

\mathbf{y} : é o vetor constituído pelos valores experimentais, $\mathbf{y} = \begin{pmatrix} \mathbf{y}_1 \\ \mathbf{y}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{y}_m \end{pmatrix}$;

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} f_1(x_1) & f_2(x_1) & \cdots & f_p(x_1) \\ f_1(x_2) & f_2(x_2) & \cdots & f_p(x_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ f_1(x_m) & f_2(x_m) & \cdots & f_p(x_m) \end{bmatrix}$$

é a matriz planejamento de ordem p por m , onde p é o número de parâmetros a serem ajustados, m o número de pontos experimentais e $f_j(x_i)$, com $j = 1, 2, \dots, p$ são funções conhecidas e calculadas para valores conhecidos de x_i ;

$\mathbf{c} = [c_1 \ c_2 \ \cdots \ c_p]$ é o vetor dos parâmetros ajustados ,

$(\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{c})'$ é um vetor linha,

$(\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{c})$ é um vetor coluna e

V^{-1} : é uma matriz de ordem m , inversa da matriz de covariância dos dados de entrada.

Para o caso onde as incertezas não são correlacionadas, a matriz V^{-1} é diagonal e os elementos da diagonal correspondem a ω_i^{-1} .

A estimativa c por mínimos quadrados, corresponde ao vetor de parâmetros que minimiza χ^2 . Portanto, a condição torna-se:

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial c} = 0 \quad (2.17)$$

Derivando-se (2.16) em relação a cada parâmetro de ajuste obtém-se:

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial c} = -2(X^t V^{-1} [y - Xc]) \quad (2.18)$$

Se $X^t V^{-1} X$ não é singular, as incertezas nos parâmetros e as respectivas variâncias são dadas por:

$$Cov(c) = (X^t V^{-1} X)^{-1} \quad (2.19)$$

Obtém-se finalmente a estimativa dos parâmetros por mínimos quadrados:

$$c = (X^t V^{-1} X)^{-1} X^t V^{-1} y \quad (2.20)$$

No presente trabalho, foi proposto dois processos de ajuste utilizando funções lineares para os parâmetros.

O primeiro processo de ajuste proposto é de um polinômio do tipo

$$y(x) = \sum_{k=1}^m a_k x^{k-1} \quad (2.21)$$

onde: $y(x_i) = \ln(\varepsilon_{fi})$ e $x_i = \ln\left(\frac{E_i}{E_0}\right)$;

E_i é a energia considerada e E_0 é uma energia de referência, escolhida arbitrariamente, dentro do intervalo considerado.

As incertezas associadas a cada valor interpolado $y(x_i)$ são dadas por^[21]:

$$\sigma_y^2 = F \operatorname{Cov}(c) F' \quad (2.22)$$

onde F é o vetor formado por $f_j(x_i)$, com $j=1, \dots, p$, e $f_j(x_i)$ são os elementos de X .

O segundo processo de ajuste proposto, foi desenvolvido com auxílio do método de Monte Carlo. Para o ajuste dos dados experimentais foi utilizado um programa modificado a partir do programa MCEFIC^[27] que simula o experimento de detecção de radiação gama por um detector HPGe. As eficiências totais em função da energia gama foram obtidas pela simulação que o programa faz das interações da radiação gama com o detector, levando-se em conta a geometria do experimento. A versão utilizada considera a fonte puntiforme e posicionada coaxialmente com relação ao detector.

Uma vez calculada a eficiência total por Monte Carlo, a interpolação dos valores de eficiência de pico experimentais foi obtida pela seguinte relação:

$$y(x) = \sum_{k=1}^m a_k x^{k-1} \quad (2.23)$$

onde: $y(x_i) = \ln\left(\frac{\varepsilon_{exp}}{\varepsilon_T}\right)_i ;$

ε_{exp} = é a eficiência de pico experimental;

ε_T = é a eficiência total calculada por Monte Carlo e

A estimativa c por mínimos quadrados, corresponde ao vetor de parâmetros que minimiza χ^2 . Portanto, a condição torna-se:

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial c} = 0 \quad (2.17)$$

Derivando-se (2.16) em relação a cada parâmetro de ajuste obtém-se:

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial c} = -2(X^t V^{-1} (y - Xc)) \quad (2.18)$$

Se $X^t V^{-1} X$ não é singular, as incertezas nos parâmetros e as respectivas variâncias são dadas por:

$$Cov(c) = (X^t V^{-1} X)^{-1} \quad (2.19)$$

Obtém-se finalmente a estimativa dos parâmetros por mínimos quadrados:

$$c = (X^t V^{-1} X)^{-1} X^t V^{-1} y \quad (2.20)$$

No presente trabalho, foi proposto dois processos de ajuste utilizando funções lineares para os parâmetros.

O primeiro processo de ajuste proposto é de um polinômio do tipo

$$y(x) = \sum_{k=1}^m a_k x^{k-1} \quad (2.21)$$

onde: $y(x_i) = \ln(\varepsilon_{fi})$ e $x_i = \ln\left(\frac{E_i}{E_0}\right)$;

E_i é a energia considerada e E_0 é uma energia de referência, escolhida arbitrariamente, dentro do intervalo considerado.

As incertezas associadas a cada valor interpolado $y(x_i)$ são dadas por^[21]:

$$\sigma_y^2 = F \operatorname{Cov}(c) F^t \quad (2.22)$$

onde F é o vetor formado por $f_j(x_i)$, com $j=1, \dots, p$, e $f_j(x_i)$ são os elementos de X .

O segundo processo de ajuste proposto, foi desenvolvido com auxílio do método de Monte Carlo. Para o ajuste dos dados experimentais foi utilizado um programa modificado a partir do programa MCEFIC^[27] que simula o experimento de detecção de radiação gama por um detector HPGe. As eficiências totais em função da energia gama foram obtidas pela simulação que o programa faz das interações da radiação gama com o detector, levando-se em conta a geometria do experimento. A versão utilizada considera a fonte puntiforme e posicionada coaxialmente com relação ao detector.

Uma vez calculada a eficiência total por Monte Carlo, a interpolação dos valores de eficiência de pico experimentais foi obtida pela seguinte relação:

$$y(x) = \sum_{k=1}^m a_k x^{k-1} \quad (2.23)$$

onde: $y(x_i) = \ln\left(\frac{\varepsilon_{exp}}{\varepsilon_T}\right)_i$;

ε_{exp} = é a eficiência de pico experimental;

ε_T = é a eficiência total calculada por Monte Carlo e

$$x = \ln\left(\frac{E_i}{E_0}\right)$$

As incertezas nos valores ajustados são dadas pela expressão (2.22).

Neste modelo, o valor ajustado exprime a razão pico/total. Este valor é aproximadamente igual à unidade, para baixas energias gama, uma vez que o efeito de interação dominante é o Fotoelétrico. Para altas energias esta razão diminui e o efeito dominante torna-se o espalhamento múltiplo Compton, seguido de Fotoelétrico. Neste caso, a simulação da eficiência de pico é complicada, em razão da sensibilidade ao número de espalhamentos que podem ocorrer, antes da completa absorção do fóton. Uma descrição mais exata desses processos pode ser efetuada por meio de programas de Monte Carlo mais elaborados, tais como: MCNP^[31] e GEANT^[32], o que foge ao escopo do presente trabalho, sendo recomendada para trabalhos futuros.

2.3.2.2 Funções não lineares nos parâmetros

Quando se quer ajustar funções não-lineares aos parâmetros, não se pode simplesmente impor que: $\frac{\partial \chi^2}{\partial c_{ij}} = 0$ pois isto resultaria em relações que não conduzem a um sistema linear. Deste modo, é necessário efetuar um procedimento de linearização conforme descrito a seguir.

2.3.2.2.1 Linearização por expansão em série de Taylor

Este método tem como princípio expandir a função $f(x_i, c)$ em uma série de Taylor em torno de um valor c' (que se supõe próximo do valor verdadeiro, \hat{c}) até o termo de primeira ordem, ou seja:

$$f(x_i, \hat{c}) \approx f(x_i, c') + \sum_{i=1}^m \left[\frac{\partial f(x_i, c)}{\partial c_v} \Big|_{c'} \right] (c_v - c'_v) \quad (2.24)$$

Definindo,

$$\delta f_i = f(x_i, \hat{c}) - f(x_i, c')$$

$$\delta c_v = \hat{c}_v - c'_v$$

$$\text{e} \quad X_{iv} = \frac{\partial f(x_i, c)}{\partial c_v} \Big|_{c'} \quad (2.25)$$

Pode-se escrever a equação (2.24) como:

$$\delta f_i = X_{iv} \delta c_v \quad (2.26)$$

Se a expansão de primeira ordem for suficiente, isto é, se o restante da expansão de (2.24) for desprezível, pode-se aproximar o valor do Qui-Quadrado (χ^2), por:

$$\chi^2 = [y - f(c) - X\delta c]^t V^{-1} [y - f(c) - X\delta c] \quad (2.27)$$

$$\text{ou} \quad \chi^2 = [y' - X\delta c]^t V^{-1} [y' - X\delta c] \quad (2.28)$$

onde $y' = y - f(c)$.

Aplicando a condição $\frac{\partial \chi^2}{\partial \delta c_v} = 0$ obtém-se a seguinte solução para o incremento dos parâmetros:

$$\delta c = [X^t V^{-1} X]^{-1} [X^t V^{-1} y'] \quad (2.29)$$

Esta equação é idêntica ao caso de funções lineares nos parâmetros (2.20).

Entretanto, o que se obtém na solução desse sistema são os incrementos δc dos parâmetros, e não propriamente os parâmetros, como no caso linear. Espera-se com esse método que os novos valores dos parâmetros:

$$c'' = c' + \delta c \quad (2.30)$$

sejam mais próximos de \hat{c} (o valor verdadeiro dos parâmetros) do que as estimativas anteriores de c' .

O processo iterativo que descreve a procura de c , é como segue:

- i) Propõe-se os valores iniciais de c' para \hat{c} . Calcula-se $\chi^2(c)$ por meio de (2.28);
- ii) Constrói-se o vetor y' e a matriz X através das expressões $y' = y - f(c)$ e (2.25);
- iii) Calcula-se δc por meio de (2.29);
- iv) Calcula-se c'' por meio de (2.30) e $\chi^2(c'')$ por meio de (2.28);
- v) Caso as variações em χ^2 , $\chi^2(c'') - \chi^2(c')$, e nos parâmetros, δc_v , sejam desprezíveis, tem-se então que $c'' = \hat{c}$, concluindo assim o processo iterativo. Caso contrário, repete-se o processo a partir de (ii), substituindo c' por c'' e $\chi^2(c)$ por $\chi^2(c'')$.

No caso em que o processo tenha convergido, as incertezas nos parâmetros e respectivas variâncias podem ser estimadas por^[21]

$$\text{Cov}(\mathbf{c}) = \left[\mathbf{X}^t \mathbf{V}^{-1} \mathbf{X} \right]^{-1} \quad (2.31)$$

com a matriz \mathbf{X} calculada com os parâmetros $\hat{\mathbf{c}}$, obtidos através do processo iterativo.

A questão da convergência de $\delta\mathbf{c}_v$ consiste em compará-las com a incerteza do parâmetro c_v obtida a partir da matriz de covariância (2.31).

O critério de convergência de χ^2 consiste em verificar a condição:

$$\chi^2(c'') - \chi^2(c) << 1 \quad (2.32)$$

As incertezas nos valores interpolados $y(x)$ são dadas por^[33]:

$$\sigma_y^2 = \left[\frac{\partial y(x_i)}{\partial c_1} \quad \frac{\partial y(x_i)}{\partial c_2} \quad \dots \frac{\partial y(x_i)}{\partial c_p} \right] \text{Cov}(\mathbf{c}) \left[\frac{\partial y(x_i)}{\partial c_1} \quad \frac{\partial y(x_i)}{\partial c_2} \quad \dots \frac{\partial y(x_i)}{\partial c_p} \right]^t \quad (2.33)$$

2.3.2.2.2 Método de Gauss-Marquardt

Neste método de ajuste, procede-se como no método anterior, com algumas pequenas alterações nas etapas das iterações. Define-se uma matriz de covariância \mathbf{M}^λ tal que seus elementos sejam dados por:

$$\mathbf{M}^\lambda = (I + \lambda \delta_{\nu\mu}) \left(\mathbf{X}^t \mathbf{V}^{-1} \mathbf{X} \right) \quad (2.34)$$

onde $\nu\mu = 1, 2, \dots, p$ referem-se aos parâmetros e $\delta_{\nu\mu}$ é a função delta de Kroenecker.

Esse processo iterativo segue os seguintes passos:

- 1) Inicializa-se os valores de \mathbf{c}' para $\hat{\mathbf{c}}$. Calcula-se $\chi^2(\mathbf{c}')$ por meio de (2.28);
- 2) Constrói-se o vetor \mathbf{y}' e a matriz \mathbf{X} através das expressões $\mathbf{y}' = \mathbf{y} - f(\mathbf{c}')$ e (2.25);

- 3) Determina-se a matriz M^λ por meio de (2.34) com λ moderadamente pequeno (geralmente 0,001) e calcula-se os incrementos δc por meio de (2.29);
- 4) Se $\chi^2(c'') > \chi^2(c')$ aumenta-se λ por um fator de 10 e retorna-se à etapa (3);
- 5) Se $\chi^2(c'') < \chi^2(c')$ diminui-se λ por um fator de 10 e considera-se c'' o novo ponto de partida a ser analisado na etapa (2). Esse processo é repetido até convergir;
- 6) Uma vez que o processo tenha收敛ido, deve-se considerar $\lambda = 0$ e calcular a matriz de covariâncias $M^{-1} = [X^T V^{-1} X]^{-1}$ para determinar as incertezas nos parâmetros e respectivas correlações. Observar que não foi utilizada a matriz M^λ para esse fim, uma vez que esta matriz pode eventualmente incorporar um λ significativamente diferente de zero.

As incertezas nos valores ajustados são dadas pela expressão (2.33). Este método, em relação ao anterior, tem como vantagens a convergência mais rápida e uma tolerância maior para o valor inicial dos parâmetros.

No presente trabalho, foi proposta a seguinte função para descrever a curva de eficiência do detetor HPGe, que é variação de uma função utilizada na literatura^[4]. O método de ajuste adotado foi o Gauss Marquardt. Esta função foi denominada Função Polinomial Segmentada, sendo dada pela seguinte relação:

$$\ln(\varepsilon_f) = \begin{cases} a_0 + a_1 \ln\left(\frac{E}{a_4}\right) + a_2 \ln^2\left(\frac{E}{a_4}\right), & E \leq a_4 \\ b_0 + b_1 \ln\left(\frac{E}{a_4}\right) + b_2 \ln^2\left(\frac{E}{a_4}\right), & a_4 < E \leq a_5 \\ c_0 + c_1 \ln\left(\frac{E}{a_5}\right) + c_2 \ln^2\left(\frac{E}{a_5}\right), & a_5 < E \end{cases} \quad (2.35)$$

onde ε_f é a eficiência de pico para a energia específica E , a_4 e a_5 correspondem a pontos de junção da função, ajustados juntamente com os parâmetros $\{a_i, b_i, c_i\}$. A justificativa para o uso dessa função é porque, em geral, a curva de eficiência em detetores de HPGe apresentam três regiões com comportamentos distintos: a primeira abaixo de aproximadamente 200keV, a segunda entre 200keV e 1300keV e a outra para energias superiores a 1200keV.

A continuidade da função nos pontos de junções faz com que:

$$a_0 = b_0 \quad e \quad c_0 = b_0 + b_1 \ln\left(\frac{a_5}{a_4}\right) + b_2 \ln\left(\frac{a_5}{a_4}\right)^2$$

e a suavidade do comportamento da função nos pontos de junção implica que:

$$a_1 = b_1 \quad e$$

$$c_1 = b_1 + 2b_2 \ln\left(\frac{a_5}{a_4}\right)$$

Desta forma a função proposta torna-se:

$$\ln(\varepsilon_f) = b_0 + b_1 \ln\left(\frac{E}{a_4}\right) + \beta \ln^2\left(\frac{E}{a_4}\right) + \vartheta \ln^2\left(\frac{E}{a_5}\right) \quad (2.36)$$

onde, para: $E \leq a_4$, tem-se $\beta = a_2$ e $\vartheta = 0$;

$$a_4 < E \leq a_5, \text{ tem-se } \beta = b_2 \text{ e } \vartheta = 0$$

$$a_5 < E, \text{ tem-se } \beta = 0 \text{ e } \vartheta = c_2$$

2.3.3 Mistura de fontes calibradas e não-calibradas (*Mixing*)

Este método^[33] pode ser usado para determinar a atividade de uma fonte radioativa não-calibrada por processo de ajuste da curva de eficiência do detetor de HPGe. Além disso, a fonte não-calibrada fornece pontos adicionais para o conjunto de dados.

Considerando duas fontes, uma calibrada e a outra não-calibrada, a relação entre os dados é dada por^[33]

$$\begin{bmatrix} C_{y_1} \\ C_{y_2} \\ \vdots \\ U_{y_1} \\ U_{y_2} \\ \vdots \end{bmatrix} \cong \begin{bmatrix} 0 & I & C_{x_1} & (C_{x_1})^2 & \dots \\ 0 & I & C_{x_2} & (C_{x_2})^2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots \\ I & 0 & U_{x_1} & (U_{x_1})^2 & \dots \\ I & 0 & U_{x_2} & (U_{x_2})^2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{a_0} \\ C_{a_0} \\ a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (2.37)$$

Neste caso, dois parâmetros Ca_0 e Ua_0 são ajustados, um correspondente à fonte calibrada e o outro correspondente à fonte não-calibrada. Os demais parâmetros a_1 , a_2 , ..., a_p , obtidas para as eficiências absoluta e relativa são os mesmos, uma vez que possuem a mesma dependência com a energia.

2.4 Espectroscopia X e gama com detetores HPGe e Ge(Li)

2.4.1 Introdução

Detetores de germânio, produzidos pelo processo de difusão de lítio, são denominados Ge(Li). Na década de 60 que este tipo de detector tornou-se comercialmente acessível e comum durante cerca de duas décadas. Na década de 80 houve o surgimento dos detetores de germânio hiperpuro (HPGe)^[1] que mostrou ser uma alternativa vantajosa em relação aos detetores de Ge(Li), descontinuando assim a sua produção em favor do tipo HPGe.

Os detetores de Ge(Li) e HPGe são detetores semicondutores e apresentam grande poder de resolução em energia. Normalmente possuem profundidade de depleção de 1 cm ou mais. Normalmente, coloca-se uma janela fina na capa protetora do detector, feita de alumínio ou berílio, para que a atenuação dos raios X e gama seja mínima.

A sua excelente resolução em energia torna este tipo de detector ideal para aplicação em espectroscopia gama ou X. A figura 2.6 apresenta um espectro comparativo da altura do pulso de um cintilador NaI(Tl) e um detector de germânio para espectros de fótons incidentes idênticos. A superioridade do sistema de germânio em resolução de energia permite a separação de muitas energias de fótons próximas, o qual permanecem não resolvidos no espectro de NaI(Tl). Os detetores de NaI(Tl) podem ser vantajosos, quando a separação entre os picos é grande e necessita-se de uma eficiência de deteção maior.

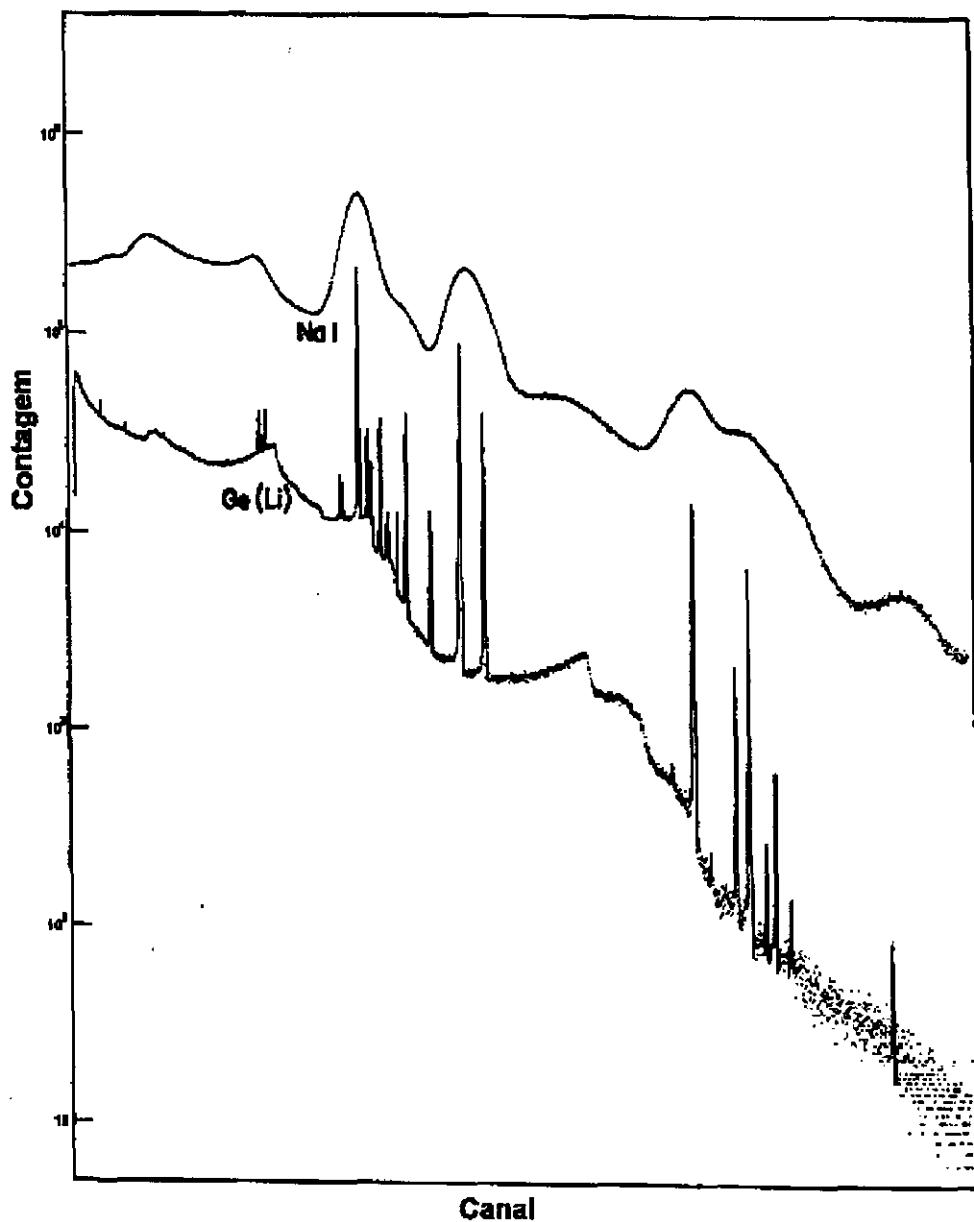


Figura 2-6 Espectro de altura de pulso comparativo, usando um cintilador de NaI(Tl) e um detetor de Ge(Li)^[1]

2.4.2 Eficiência de deteção

Em medidas de atividade de uma fonte radioativa, ou da probabilidade de emissão gama por decaimento de um radionuclídeo, um dos parâmetros mais importantes é a eficiência de deteção no intervalo de energia de interesse e na geometria do arranjo

experimental. A eficiência $\varepsilon_p(E)$, denominada eficiência de pico, corresponde à razão entre o número de eventos registrados no pico de absorção total, e o número de fótons emitidos pela fonte, sendo representada pela relação:

$$\varepsilon_\gamma = \frac{S(E)}{I_\gamma \cdot (E)_{A,T}} \cdot f \quad (2.38)$$

Onde:

S é a área sob o pico de absorção total para a energia gama considerada;

I_γ é a probabilidade da emissão gama por decaimento da linha considerada;

A é a atividade da fonte;

T é o tempo de medida;

f são fatores de correção para tempo morto, geometria de detecção, decaimento radioativo, atenuação na fonte, conforme descritos a seguir.

Esta eficiência é obtida pela medida de fontes radioativas padrões, ou seja, que possuem atividade e intensidades gama por decaimento bem conhecidas. A eficiência é ajustada em função da energia por meio de parametrização adequada, que é o objetivo do presente trabalho.

Em baixas energias o efeito responsável pelos eventos que contribuem para o pico de absorção total em detectores de HPGe é a absorção fotoelétrica. As interações múltiplas, tais como espalhamento Compton seguidos por absorção fotoelétrica é que contribuem de modo predominante ao pico de absorção total em energias mais elevadas conforme mostra a figura 2.9. O pico de absorção total em energias superiores a 1022,0 keV passa a ter uma contribuição adicional pelo efeito de produção-de-pares, para as interações onde os fótons de aniquilação sejam totalmente absorvidos no volume sensível

do detector. Para absorção parcial dos fótons de aniquilação, os eventos dão origem aos picos de primeiro e segundo escapes.

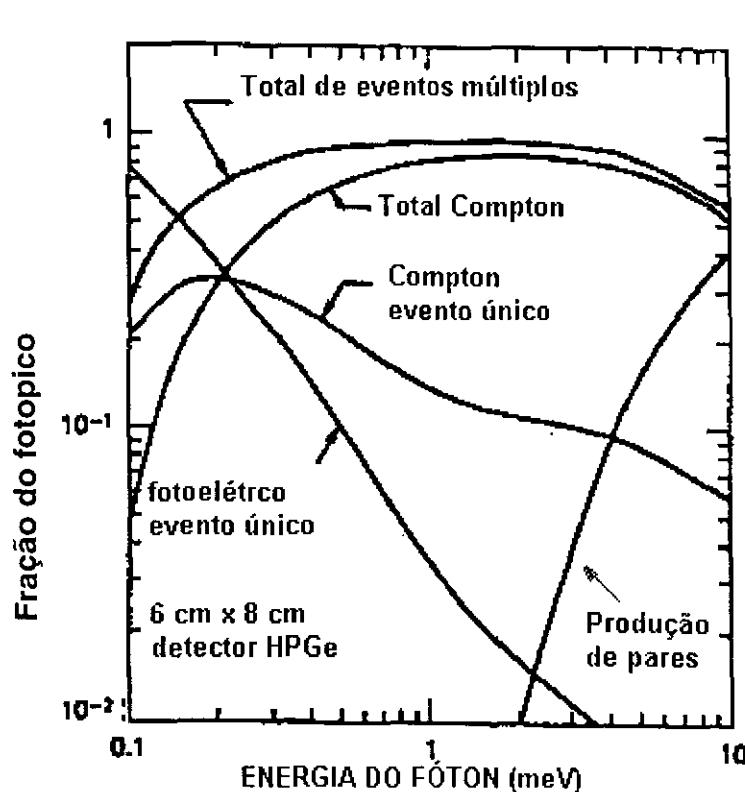


Figura 2-7 Contribuição dos diferentes mecanismos de perda de energia^[1] nos eventos de pico de absorção total.

Quando a atividade de uma fonte não é conhecida, somente a eficiência relativa pode ser calculada^[33]. Esta eficiência é dada por:

$$\varepsilon_r = \alpha \frac{S(E)}{I_\gamma} f \quad (2.39)$$

onde α é uma constante arbitrária.

O cálculo das eficiências de deteção para cada linha de emissão das fontes padrões medidas, foi efetuado por meio do programa ALPINO^[36]. Este programa, elaborado em linguagem FORTRAN, calcula a atividade ou eficiência de deteção

(segundo opções de entrada) para cada energia gama da fonte medida, diretamente a partir do espectro obtido. As opções que permitem operar este programa são:

- a) calcula a eficiência ou atividade;
- b) podem ser ingressados os parâmetros da curva de calibração em eficiência ou o valor da eficiência de uma energia de transição gama específica;
- c) área sob o pico de absorção total (calculada ou incluída como dado de entrada);
- d) canais que delimitam o pico e as contagens de fundo (o programa localiza o centróide do pico de absorção total, determina a largura a meia altura e os canais, ou ingressam-se os valores desejados para o cálculo das áreas);
- e) correção do tempo morto (é calculado pelo programa ou especifica-se a mesma);
- f) subtração ou não da contagem de fundo.

2.4.2.1 Área sob o pico de absorção total

No presente trabalho, não houve necessidade de se determinar a centróide do pico com grande exatidão. O objetivo principal foi obter a área líquida do pico de absorção total. Deste modo, um cuidado especial foi tomado, estudando-se diferentes metodologias para a subtração da contagem de fundo.

Foram utilizadas duas metodologias para o cálculo da área do pico de absorção total.

2.4.2.1.1 Integração numérica

É um método simplificado, que tem sido utilizado em espectroscopia gama no Physikalisch Technische Bundesanstalt (PTB), Alemanha^[40], para a determinação de áreas líquidas.

Este método é ilustrado na figura 2.8.

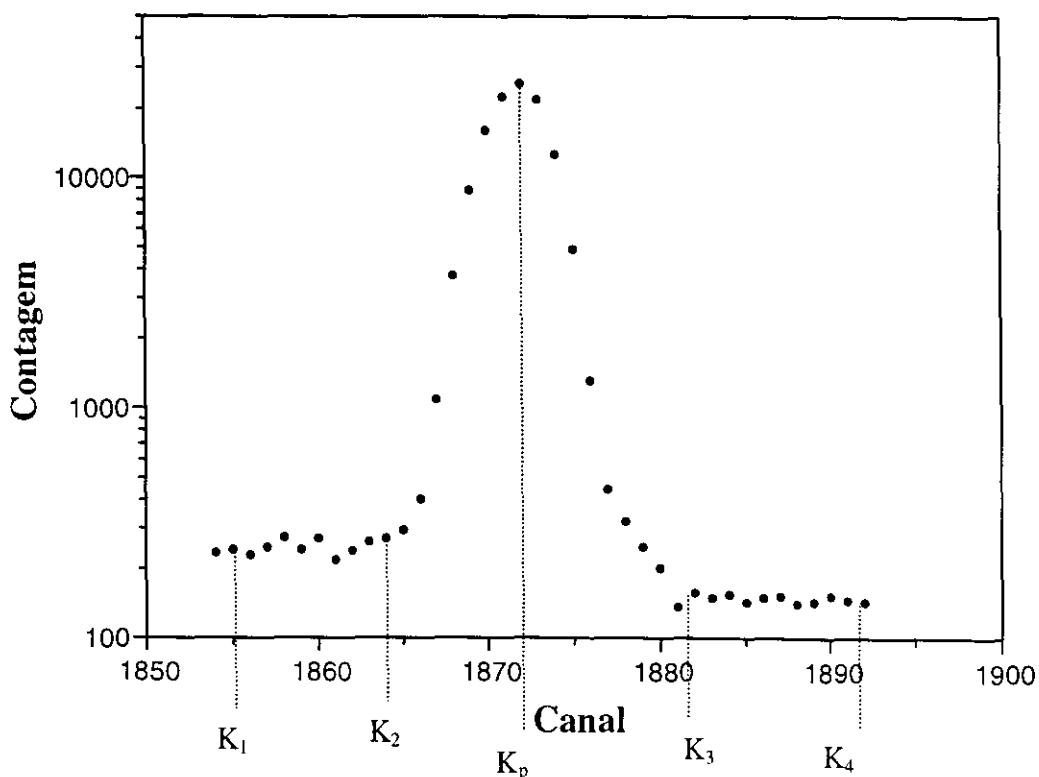


Figura 2-8 Esquema dos parâmetros utilizados no método de integração numérica da área sob o pico de absorção total.

No programa ALPINO^[24], A centróide é identificada por meio da calibração de canais em função da energia. As posições dos canais (K_i) que definem as regiões de contagem de fundo e de pico são dadas por:

$$K_p \quad \text{canal da centróide,}$$

$$K_1 \quad \text{início da contagem de fundo} = K_p - (h_1 \text{ FWHM});$$

$$K_2 \quad \text{início do pico de absorção total} = K_p - (h_2 \text{ FWHM});$$

$$K_3 \quad \text{fim do pico de absorção total} = K_p + (h_3 \text{ FWHM});$$

$$K_4 \quad \text{fim da contagem de fundo} = K_p + (h_4 \text{ FWHM});$$

Os valores adotados para h_1 , h_2 , h_3 e h_4 foram respectivamente: 4, 2, 2 e 4

A área sob o pico de absorção total foi calculada segundo a expressão

$$S = \sum_{K_2+1}^{K_3-1} C_i - (S_B \cdot F_K) \quad (2.40)$$

onde:

C_i contagem do canal i ,

S_B área sob o espectro das contagens de fundo dada por

$$S_B = \sum_{K_1}^{K_2} C_i + \sum_{K_3}^{K_4} C_i \quad (2.41)$$

F_K fator que leva em consideração o número de canais do pico de absorção total e o número de canais da região do fundo.

2.4.2.1.2 Cálculo da área por meio de função degrau

Foi também estudado métodos alternativos para o cálculo da área sob o pico de absorção total. Este estudo serviu para comparar os resultados nas eficiências obtidas por estes processos, e as obtidas considerando as áreas calculadas por integração numérica,

bem como a influência nos ajuste das funções. A justificativa para estes processos alternativos é que, para determinados picos de absorção total, a radiação de fundo associada apresenta-se de modo “complexo”, exigindo-se assim, um estudo mais detalhado com respeito à radiação de fundo.

No presente trabalho, adotou-se para a radiação de fundo as seguintes funções:

$$D_1(x) = (a_0 + a_1 x_k + a_2 x_k^2) \left(\frac{I}{1+e^z} \right) + (b_0 + b_1 x_k + b_2 x_k^2) \left(1 - \frac{I}{1+e^z} \right) \quad (2.42)$$

e

$$D_2(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 \left(\frac{1}{1+e^z} \right) \quad (2.43)$$

onde: $z = \frac{x_k - x_p}{S}$ e

$$S = \frac{FWHM}{2\sqrt{2\ln 2}} = \frac{FWHM}{2,3548}$$

x_p canal da centróide

x_k canal situado entre o início e o fim da região da contagem de fundo.

A função (2.42) tende para o polinômio em a_i , ajustado para os canais à esquerda do pico, e para o polinômio em b_i , ajustado para os canais à direita do pico. Na região do pico, a função combina os polinômios em a_i e b_i com a função sigmoidal, que proporciona um degrau suave, parametrizado pela variável z .

A função (2.42) assim como a função (2.43), ajusta para os canais à esquerda do pico e à direita do pico, os respectivos polinômios quadráticos:

$$a_0 + a_1 x + a_2 x^2 \quad e \quad b_0 + b_1 x + b_2 x^2.$$

Portanto, a relação (2.43) corresponde à relação (2.42), impondo que as duas parábolas tenham os mesmos coeficientes linear e quadrático. O valor de x_p e FWHM foram estimados previamente para cada um dos picos e, em seguida, fixados como constantes. Em versões futuras pretende-se utilizá-los como parâmetros ajustáveis.

2.4.2.2 Fatores de correção

2.4.2.2.1 Decaimento

A atividade A de uma fonte radioativa num determinado instante, é função da atividade inicial, A_0 , do tempo t_e transcorrido entre a sua calibração ou produção e o instante de medida, do tempo de medida e da meia-vida desse radionuclídeo. A expressão utilizada para esta correção é dada por:

$$A_0 = A e^{\lambda t_e} \frac{\lambda T}{1 - e^{-\lambda T}} \quad (2.44)$$

onde:

A = atividade medida;

λ = constante de desintegração = $\frac{\ln 2}{T_{1/2}}$ e $T_{1/2}$ a meia vida do radionuclídeo

t_e = tempo transcorrido desde a data de referência até o instante do início da medida;

T é o tempo de duração da medida;

2.4.2.2.2 Fator geométrico:

A eficiência do pico de absorção total num detetor de HPGe para fontes puntiformes é função da energia da transição gama e da distância fonte-detetor. Esta eficiência é aproximadamente proporcional a $(d + d')^2$, para d muito maior que o diâmetro da fonte ou detetor. Nessa expressão, d' corresponde a distância de penetração efetiva no volume sensível do detetor, que depende da energia do fóton. Portanto, eficiência para o pico de absorção total $\varepsilon(E_\gamma, d)$ deve ser expressa de acordo com a expressão^[8]:

$$\varepsilon(E_\gamma, d) = \frac{\varepsilon_0(E_\gamma)}{[d + d'(E_\gamma)]^2} \quad (2.45)$$

onde:

ε_0 é a eficiência para o fóton de energia E_γ , considerada como a eficiência intrínseca do pico de absorção total.

A distância fonte-superfície do detetor, d , foi considerada constante e conhecida. O valor d' foi determinado teoricamente, considerando o coeficiente de absorção do detetor, $\mu(E)$, e a profundidade sensível do detetor de HPGe, $h = 51.2$ mm, de acordo com a expressão^[8]:

$$d' = \frac{1}{\mu} \left(1 + \frac{\mu h}{1 - e^{\mu h}} \right) \quad (2.46)$$

o fator geométrico é determinado pela expressão:

$$f_{geo} = \frac{(d_{amostra} + d')^2}{(d_{padrão} + d')^2} \quad (2.47)$$

2.4.2.2.3 Fator de atenuação:

Para a atenuação da radiação gama na própria amostra, o fator de correção é dado por:

$$f_c = \exp\left[\sum x_i \mu_i\right] \quad (2.48)$$

onde: μ é o coeficiente de atenuação linear total^[29,30] do material i que envolve a fonte radioativa e x_i é a espessura do material i .

2.4.2.2.4 Tempo morto e empilhamento de pulsos

Para corrigir o efeito do tempo morto e de empilhamento de pulsos foi adotado o método de pulsador. Pulsos eletrônicos de um pulsador de precisão com freqüência baixa (60 Hz) e conhecida são enviados a um pré-amplificador juntamente com os pulsos provenientes do detetor. Uma região do espectro acumulado é selecionada, de modo que o pico do pulsador não interfira com nenhum outro pico existente no espectro.

Pelo número de contagens do pico do pulsador, pode-se calcular esta correção por meio da relação equação:

$$t_\tau = \frac{S_{Pref}}{S_{Pfonte}} \quad (2.49)$$

onde: S_{Pref} é a área de referência do pico do pulsador (60cps)

S_{Pfonte} é a área do pico do pulsador no espectro da fonte

2.4.2.2.5 Correção para efeito de soma em cascata

Um problema que se apresenta na calibração em eficiência é a detecção simultânea de outras radiações que ocorrem em cascata com o gama a ser medido. Se estas radiações em cascata forem detetadas durante um intervalo de tempo menor que o tempo de resolução do espectrômetro, o pulso resultante corresponderá à soma dos pulsos individuais. Desta forma, o número de contagens sob o pico de absorção total será alterado, crescendo ou diminuindo, dependendo da localização da transição gama no esquema de desintegração considerado. Este efeito é geralmente denominado *soma em cascata* ou *soma em coincidência*^[39]

Este efeito é função das eficiências total e de pico para os gamas envolvidos na cascata. No presente trabalho, estas eficiências foram calculadas numericamente pelo Método de Monte Carlo, utilizando o programa MCEFIC^[27]. Outro algoritmo de Monte Carlo, denominado **COINCIG**^[39], acompanha o caminho no esquema de desintegração desde o estado inicial do radionuclídeo precursor, até o estado fundamental do núcleo filho. Cada etapa no esquema de desintegração é selecionada por meio de números aleatórios, levando em conta as probabilidades de transição e coeficientes de conversão interna. As transições selecionadas são identificadas apropriadamente de acordo com o tipo de interação que tenha ocorrido, dando origem a eventos de absorção total ou parcial dentro do cristal do detector. Uma vez que o estado final tenha sido atingido, as transições selecionadas são contabilizadas para verificar quais pares de transições ocorreram simultaneamente. Com este procedimento foi possível calcular o efeito de soma em cascata para todas as transições gama utilizadas na calibração. Os resultados obtidos são apresentados no Capítulo 4.

2.4.2.3 Análise das incertezas na eficiência de deteção

A metodologia de matriz de covariância é a forma mais completa de representação das incertezas em dados experimentais, pois além da incerteza total, ela fornece informações sobre a existência do nível de correlação entre as incertezas nos parâmetros. O método de derivação da matriz de covariância (V_x) para dados experimentais tem sido discutido em detalhes por diversos autores^[5, 7, 25, 26].

Após a identificação das diferentes fontes de erros no processo de medida dos radionuclídeos, e levando-se em conta a correlação entre os erros, obtém-se a matriz de covariância das incertezas na eficiência, (V_ϵ)^[33].

$$V_\epsilon = \begin{bmatrix} (\sigma(c_{\epsilon 1})/c_1)^2 & (\sigma_A/A)^2 & \dots & 0 & 0 & \dots \\ (\sigma_A/A)^2 & (\sigma(c_{\epsilon 2})/c_2)^2 & \dots & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & (\sigma(u_{\epsilon 1})/u_{\epsilon 1})^2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & (\sigma(u_{\epsilon 2})/u_{\epsilon 2})^2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \quad (2.50)$$

Os termos com índice c referem-se as fontes calibradas e com índice u , a fontes não-calibradas. Os termos não diagonais em V_ϵ vem da dependência entre as atividades das fontes a partir de dados obtidos com fontes calibradas.

Os termos da diagonal são dados por:

$$\left(\frac{\sigma(c_\epsilon)}{c_\epsilon}\right)^2 = \left(\frac{\sigma_A}{A}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_S}{S}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_{I_\gamma}}{I_\gamma}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_{f_\tau}}{f_\tau}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_{f_\lambda}}{f_\lambda}\right)^2 \quad (2.51)$$

para fontes calibradas, e

$$\left(\frac{\sigma(u_\epsilon)}{u_\epsilon}\right)^2 = \left(\frac{\sigma_S}{S}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_{I_\gamma}}{I_\gamma}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_{f_\tau}}{f_\tau}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_{f_\lambda}}{f_\lambda}\right)^2 \quad (2.52)$$

para fontes não-calibradas.

Onde: S é a área sob o pico de absorção total para a energia gama considerada;

A é a atividade da fonte;

I_γ é a probabilidade da emissão gama por decaimento da linha considerada;

f_τ é o fator de correção para tempo morto e

f_λ é o fator de correção para decaimento da fonte radioativa.

As relações (2.51) e (2.52), correspondem as incertezas nas eficiências das fontes calibradas e não-calibradas, respectivamente.

3 PARTE EXPERIMENTAL

3.1 Descrição do espectrômetro de HPGe

O detector utilizado no presente trabalho foi de germânio Hiper Puro (HPGe), marca INTERTECHNIQUE modelo EGC-20, de geometria cilíndrica e eficiência relativa de 20%. Este detector possui um diâmetro externo de 51,2 mm, área sensível 20,6 cm² e volume sensível 99,7 cm³. O detector opera a -3000 Volts. A eletrônica associada, convencional para este tipo de medida, é esquematizada na figura 3-1. O sistema é constituído por pré-amplificador e filtro de alta tensão incorporados ao criostato, um amplificador marca INTERCHNIQUE, modelo 724, um analisador multicanal ORTEC, modelo ACE de 4096 canais e um micro computador PC compatível.

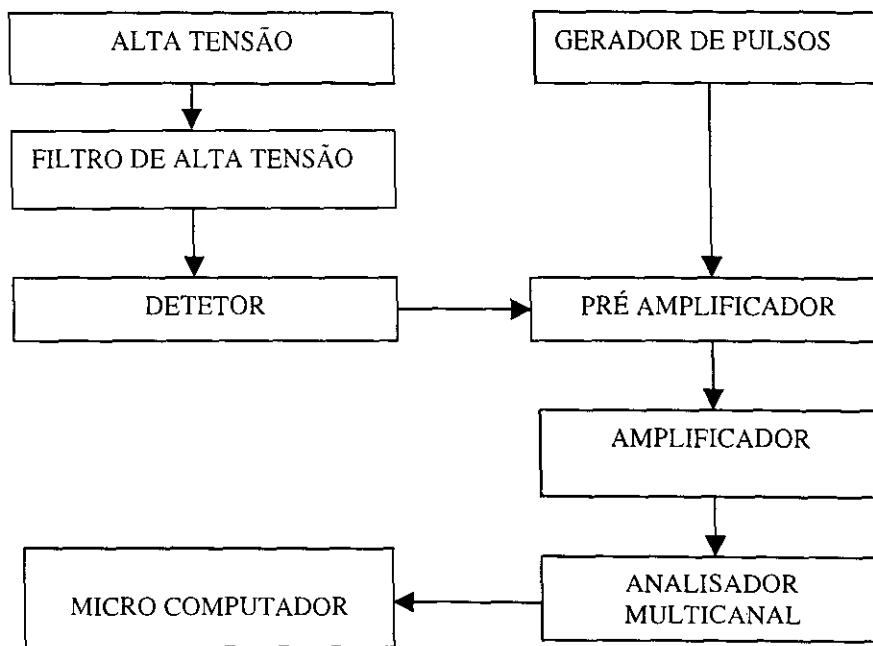


Figura 3-1 Sistema eletrônico para medida da radiação gama com o HPGe.

O arranjo experimental pode ser visualizado na figura 3.2

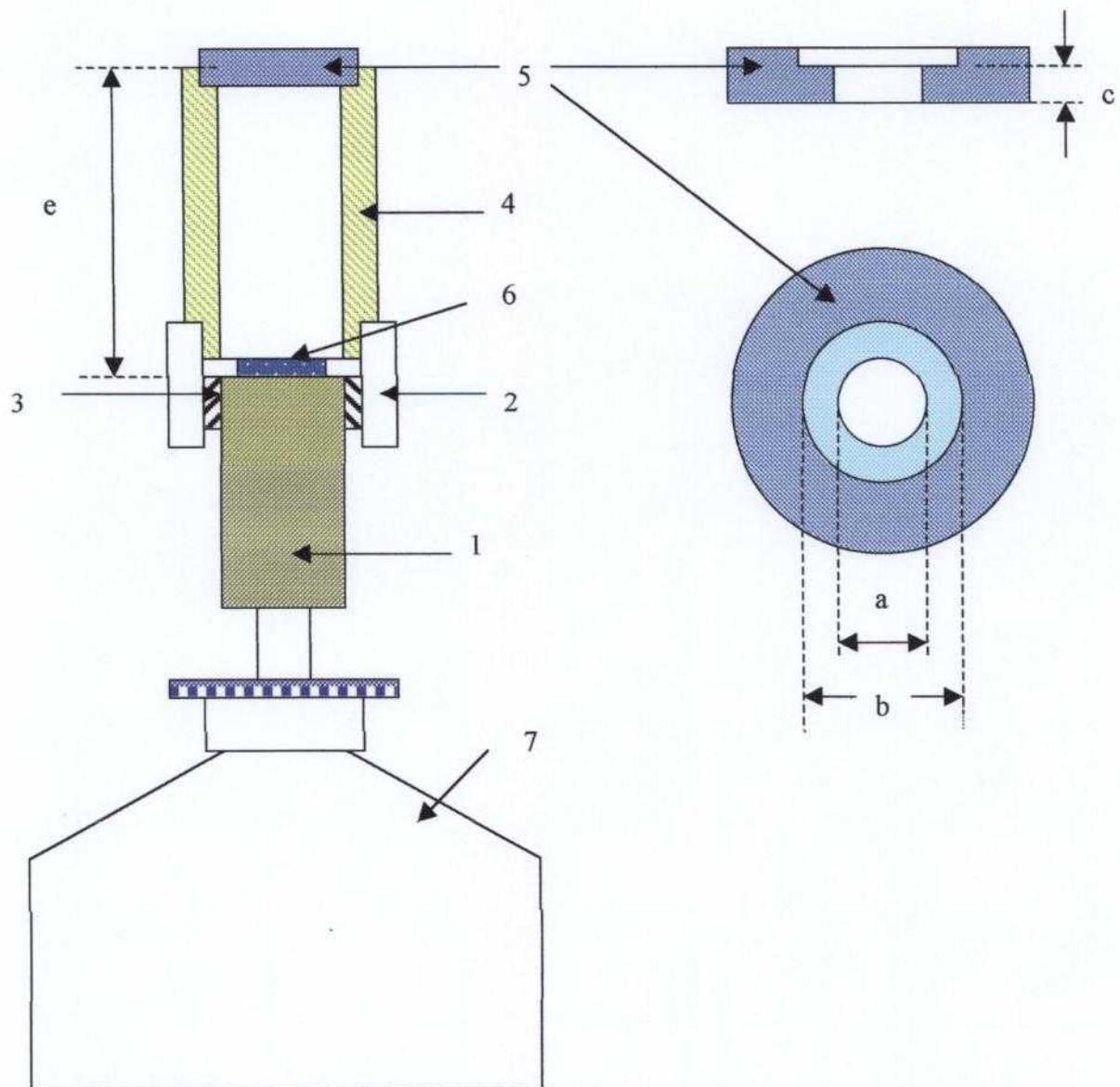


Figura 3-2 Arranjo experimental para as medidas com espectrômetro de HPGe: 1 – detector de HPGe; 2 – base de lucite; 3 – anel fixador; 4 – tubo de lucite. O suporte possui altura fixa (e); 5 – suporte de lucite para fonte, com diâmetros internos (b) diferentes, dependendo do tipo de fonte: padrão com anel de alumínio ou de anéis de aço inox; 6 – anel de lucite e 7 – criostato.

O detector de HPGe(1) possui na sua parte superior, um anel fixador e um suporte usinado em lucite (2). Neste suporte é encaixado um tubo do mesmo material, com altura fixa (4). Estes suportes foram feitos de modo a garantir a reprodutibilidade no

posicionamento da fonte da ordem de \pm 0,3 mm. A distância entre a fonte e a superfície do cristal, utilizada no presente trabalho, foi de 17,9 cm.

3.2 Descrição das fontes radioativas utilizadas na calibração

As fontes radioativas utilizadas foram padrões da Agência Internacional de Energia Atômica, para os seguintes radionuclídeos: ^{241}Am , ^{133}Ba , ^{152}Eu , ^{137}Cs e ^{60}Co . Estas fontes são seladas internamente por um sanduíche de polietileno, com 0,22 mm de espessura, e externamente por lâminas de alumínio de $(0,52 \pm 0,02)$ mm de espessura. Além destas fontes, foram utilizadas na calibração: uma fonte de ^{88}Y , padronizada em sistema de coincidências $4\pi\beta-\gamma$ do Laboratório de Metrologia Nuclear do IPEN e uma fonte de ^{24}Na , não-calibrada. Esta última foi utilizada, para permitir a inclusão da metodologia de “*Mixing*”^[33], combinando fontes calibradas e não-calibradas no ajuste da eficiência do detetor de HPGe.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 Eficiências experimentais

A tabela 4.1 apresenta as principais características das fontes radioativas utilizadas: radionuclídeo; meia-vida; atividade; energia gama e o fator de correção para o efeito soma em cascata.

Tabela 4-1 Radionuclídeo, meia-vida, energia gama, probabilidade de emissão gama por decaimento, atividade e fatores de correção para o efeito soma em cascata (f_s), para as fontes radioativas utilizadas no presente trabalho. Os números entre parênteses representam as incertezas nos últimos dígitos.

Radionuclídeo	Meia-vida ^[30] (d)	E_γ	$I_\gamma^{[30]}$	Atividade (kBq)	f_s
¹³³ Ba	3862(15)	81,00	0,3676(30)		1,00958
		276,40	0,07147(30)		1,00555
		302,85	0,1830(6)	376,0(4,5)	1,00595
		356,02	0,6194(14)		1,00507
		383,85	0,08905(29)		1,00456
¹⁵² Eu	4933(11)	121,78	0,2837(13)		1,00535
		244,70	0,0753(4)		1,00857
		344,28	0,2657(11)		1,00263
		411,13	0,02238(10)		1,00853
		443,96	0,03125(14)	404,0(6,5)	1,00000
		778,90	0,1297(6)		1,00451
		867,39	0,04214(25)		1,01095
		964,05	0,1463(6)		1,00807
		1112,10	0,1354(6)		1,00744
		1408,00	0,2085(9)		1,00722
⁶⁰ Co	1925,5(6)	1173,20	0,99857(22)	379,2(1,9)	1,00271
		1332,50	0,9983(6)		1,00276
²⁴¹ A _m	157850(236)	59,54	0,3600(40)	286,5(3,2)	1,00170
¹³⁷ Cs	11020(66)	661,66	0,8510(20)	406,5(4,1)	1,00000
⁸⁸ Y	106,63(3)	898,04	0,9400(28)	16,35(25)	1,00394
		183t,10	0,9936(3)		1,00370
²⁴ Na	0,6236(2)	1368,60	0,999936(15)	-	1,00210
		2754,00	0,99855(5)		1,00255

A tabela 4.2 apresenta os três valores de eficiências experimentais (1), (2) e (3), obtidos para cada energia considerada. Cada um destes valores refere-se a um tipo de cálculo de área sob o pico de absorção total, correspondentes a diferentes funções utilizadas para a determinação da contagem de fundo: (1) Integração numérica; (2) Função Degrau (1) e (3) função Degrau(2). Esta tabela apresenta também as incertezas parciais consideradas nas medidas. Os parâmetros apresentados são os seguintes:

- σ_{S_1} : Incertezas no cálculo da área do pico de absorção total no processo de integração numérica;
- σ_{S_2} : Incertezas no cálculo da área do pico de absorção total com auxílio da função degrau (1);
- σ_{S_3} : Incertezas no cálculo da área do pico de absorção total com auxílio da função degrau (2);
- σ_A : Incerteza na atividade do radionuclídeo;
- σ_{I_γ} : Incerteza na intensidade gama;
- σ_τ : Incerteza na correção do tempo morto;
- σ_λ : Incerteza no decaimento do radionuclídeo;
- σ_{f_s} : Incerteza no fator de correção para o efeito de soma em cascata;

Tabela 4-2 Energias, eficiências experimentais (1), (2) e (3) e respectivos erros parciais.

Energia (keV)	Eficiência (1) $\times 10^{-3}$	Eficiência (2) $\times 10^{-3}$	Eficiência (3) $\times 10^{-3}$	σ_{s_1} (%)	σ_{s_2} (%)	σ_{s_3} (%)	σ_A (%)	σ_{I_γ} (%)	σ_τ (%)	σ_λ (%)	σ_{f_s} (%)
59,54	3,6685	3,4926	3,8615	0,14	0,13	0,13	1,10	1,11	0,29	0,00	0,26
81,00	3,9721	4,0190	4,0025	0,09	0,13	0,09	1,20	0,82	0,31	0,50	0,15
121,78	3,6859	3,8058	3,6627	0,09	0,09	0,08	1,60	0,46	0,31	0,22	0,08
244,70	2,2870	2,3037	2,2886	0,25	0,29	0,22	1,60	0,53	0,31	0,22	0,12
276,40	2,0456	2,0502	2,0482	0,32	0,33	0,27	1,20	0,42	0,31	0,50	0,08
302,85	1,8758	1,8737	1,8783	0,18	0,19	0,17	1,20	0,33	0,31	0,50	0,08
344,28	1,6559	1,6475	1,6574	0,13	0,17	0,12	1,60	0,41	0,31	0,22	0,04
356,02	1,6020	1,5926	1,6033	0,10	0,10	0,09	1,20	0,22	0,31	0,50	0,08
383,85	1,4869	1,4757	1,4873	0,27	0,30	0,26	1,20	0,32	0,31	0,50	0,08
411,13	1,3887	1,3766	1,3883	0,74	0,91	0,59	1,60	0,45	0,31	0,22	0,12
443,96	1,2864	1,2739	1,2851	0,58	0,70	0,49	1,60	0,45	0,31	0,22	0,08
661,66	0,8707	0,8626	0,8664	0,14	0,15	0,14	1,00	0,23	0,38	0,27	0,00
778,90	0,7473	0,7420	0,7429	0,31	0,30	0,28	1,60	0,46	0,31	0,22	0,06
867,39	0,6774	0,6739	0,6730	0,72	1,05	0,59	1,60	0,59	0,31	0,22	0,15
898,04	0,6566	0,6536	0,6526	0,76	0,72	0,73	1,50	0,30	0,30	0,13	0,06
964,05	0,6163	0,6143	0,6127	0,30	0,31	0,28	1,60	0,41	0,31	0,22	0,12
1112,10	0,5436	0,5433	0,5409	0,34	0,50	0,31	1,60	0,44	0,31	0,22	0,10
1173,20	0,5189	0,5191	0,5165	0,26	0,27	0,25	0,50	0,02	0,31	0,07	0,04
1332,50	0,4646	0,4658	0,4631	0,26	0,26	0,26	0,50	0,01	0,31	0,07	0,04
1368,60	^(a) 1000,0	^(a) 1000,0	^(a) 1000,0	0,30	0,38	0,30	^(b)	0,00	0,32	0,02	0,02
1408,00	0,4428	0,4443	0,4417	0,26	0,26	0,26	1,60	0,43	0,31	0,22	0,11
1836,10	0,3486	0,3504	0,3486	0,85	0,81	0,84	1,50	0,03	0,30	0,13	0,06
2754,00	^(a) 498,00	^(a) 498,00	^(a) 498,00	0,42	0,55	0,42	^(b)	0,00	0,32	0,02	0,04

Obs: (a) atividades normalizadas; (b) incertezas nulas por serem fontes não-calibradas;

4.2 Ajuste das curvas de eficiência em função da energia de radiação gama

As seções seguintes mostram os valores dos parâmetros ajustados, com suas respectivas incertezas, para as funções estudadas no presente trabalho.

4.2.1 Ajuste Polinomial

4.2.1.1 Área calculada por integração numérica

O resultado apresentado na tabela 4.3 corresponde ao ajuste efetuado utilizando a função descrita pela equação (2.21). O grau do polinômio foi escolhido de modo a minimizar o Qui-quadrado reduzido, cujo valor resultou 1,07. A probabilidade de exceder este valor é de 0,39, indicando um bom ajuste.

Tabela 4-3 Parâmetros estimados, desvios padrões (entre parênteses) e respectivas matrizes de covariância (triângulo superior, incluindo a diagonal principal) e correlação (triângulo inferior). Contagem de fundo por integração numérica.

Parâmetro	Valor	Ua ₀	Ca ₀	a ₁	a ₂	a ₃	a ₄	a ₅
Ua ₀	0,01271(44)	0,000019	0,000000	-0,000005	-0,000016	-0,000016	-0,000006	-0,000001
Ca ₀	-7,6856(67)	0,005	0,000045	0,000028	-0,000012	-0,000031	-0,000012	-0,000001
a ₁	-0,870(12)	-0,098	0,344	0,000142	0,000002	-0,000172	-0,000103	-0,000017
a ₂	-0,0342(69)	-0,534	-0,251	0,019	0,000047	0,000035	0,000006	0,000000
a ₃	-0,150(16)	-0,215	-0,277	-0,869	0,309	0,000277	0,000161	0,000026
a ₄	-0,076(10)	-0,137	-0,185	-0,866	0,090	0,966	0,000100	0,000017
a ₅	-0,0077(17)	-0,106	-0,115	-0,821	-0,018	0,912	0,986	0,000003
χ^2/v		1,07						

A figura 4.2 corresponde ao gráfico dos resíduos percentuais deste ajuste. As barras de erros correspondem ao desvio padrão no valor experimental. A distribuição dos resíduos não indica tendenciosidade no ajuste, apresentando um resultado satisfatório.

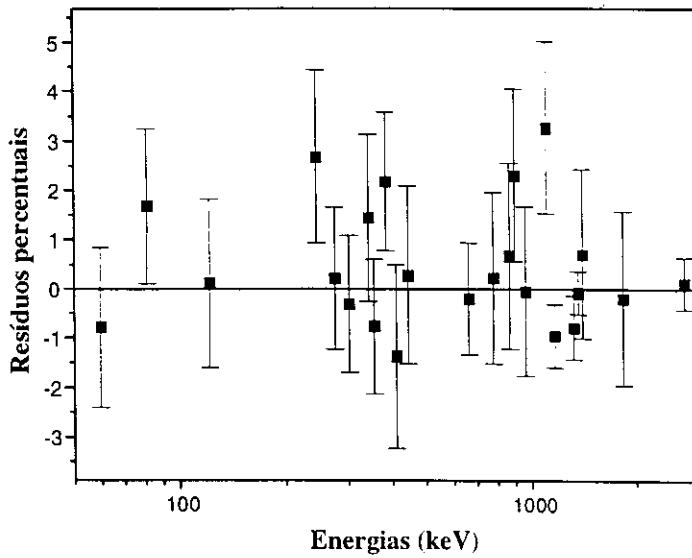


Figura 4-1 Resíduos percentuais entre os valores experimentais e ajustados para a curva de eficiência em função da energia gama. As barras de erros correspondem ao desvio padrão no valor experimental. Contagem de fundo por integração numérica.

4.2.1.2 Ajuste para área calculada pela Função Degrau (1)

A tabela 4.4 mostra os resultados obtidos pelo ajuste da função polinomial (equação 2.21), utilizando a Função Degrau (1) para a contagem de fundo. O grau do polinômio foi escolhido de modo a minimizar o valor do Qui-quadrado reduzido, que resultou 5,5. A probabilidade de exceder este valor é menor que 10^{-4} , indicando um mau ajuste.

A figura 4.3 corresponde ao gráfico dos resíduos percentuais deste ajuste. As barras de erros correspondem ao desvio padrão no valor experimental. A distribuição dos resíduos indica uma flutuação excessiva entre os pontos, o que é confirmado pelo valor elevado do Qui-Quadrado. Uma explicação para este comportamento pode ser o fato de que a função Degrau (1) ajusta duas parábolas independentes para cada lado do pico. Deste modo, a forma da contagem de fundo sob o pico de absorção total é muito dependente da forma das contagens de fundo laterais, as quais podem ter um comportamento mais complexo.

Tabela 4-4 Parâmetros estimados, desvios padrões (entre parênteses) e respectivas matrizes de covariância (triângulo superior, incluindo a diagonal principal) e correlação (triângulo inferior). Função Degrau (1).

Parâmetro	Valor	U _{a₀}	C _{a₀}	a ₁	a ₂	a ₃	a ₄	a ₅
U _{a₀}	0,0136(48)	0,000023	0,000000	-0,000005	-0,000019	-0,000020	-0,000008	-0,000001
C _{a₀}	-7,6830(48)	0,003	0,000023	0,000018	-0,000006	-0,000020	-0,000009	-0,000001
a ₁	-0,856(11)	-0,099	0,318	0,000130	0,000005	-0,000156	-0,000095	-0,000016
a ₂	-0,0506(75)	-0,532	-0,175	0,062	0,000057	0,000045	0,000010	0,000000
a ₃	-0,166(17)	-0,249	-0,253	-0,824	0,361	0,000275	0,000158	0,000026
a ₄	-0,0719(99)	-0,165	-0,186	-0,840	0,138	0,964	0,000098	0,000017
a ₅	-0,0055(17)	-0,129	-0,131	-0,803	0,030	0,910	0,986	0,000003

χ^2/ν 5,5

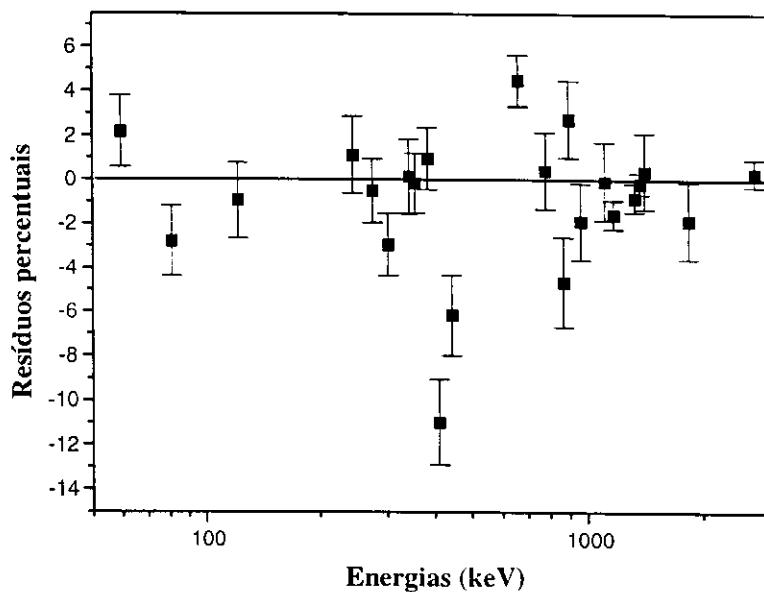


Figura 4-2 Resíduos percentuais entre os valores experimentais e ajustados para a curva de eficiência em função da energia gama. A barras de erros correspondem ao desvio padrão no valor experimental. Contagem de fundo por Função Degrau (1).

4.2.1.3 Ajuste para área calculada pela Função Degrau (2)

O resultado apresentado na tabela 4.5 corresponde ao ajuste efetuado utilizando a função descrita pela equação (2.21), aplicando a função Degrau (2) para a contagem de fundo. O Qui-quadrado reduzido resultou 1,19. A probabilidade de exceder este valor é de 0,25, indicando um bom ajuste.

A figura 4.3 corresponde ao gráfico dos resíduos percentuais deste ajuste. As barras de erros correspondem ao desvio padrão no valor experimental. A distribuição dos resíduos não indica tendenciosidade no ajuste, apresentando portanto um resultado satisfatório.

Tabela 4-5 Parâmetros estimados, desvios padrões (entre parênteses) e respectivas matrizes de covariância (triângulo superior, incluindo a diagonal principal) e correlação (triângulo inferior). Função Degrau (2).

Parâmetro	Valor	U _{a₀}	C _{a₀}	a ₁	a ₂	a ₃	a ₄	a ₅
U _{a₀}	0,0162(84)	0,000070	0,000000	-0,000013	-0,000057	-0,000062	-0,000026	-0,000004
C _{a₀}	-7,6887(48)	0,012	0,000023	0,000017	-0,000006	-0,000021	-0,000009	-0,000001
a ₁	-0,859(11)	-0,141	0,313	0,000129	0,000018	-0,000137	-0,000086	-0,000014
a ₂	-0,031(11)	-0,642	-0,127	0,150	0,000113	0,000110	0,000038	0,000004
a ₃	-0,176(18)	-0,405	-0,235	-0,654	0,560	0,000341	0,000184	0,000029
a ₄	-0,095(10)	-0,294	-0,187	-0,734	0,342	0,962	0,000108	0,000018
a ₅	-0,0117(17)	-0,241	-0,140	-0,726	0,230	0,906	0,986	0,000003
χ ² /v	1,19							

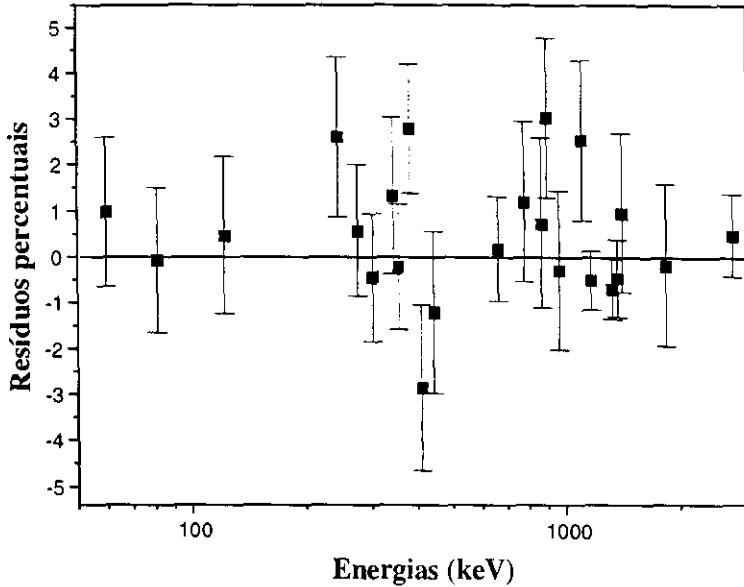


Figura 4-3 Resíduos percentuais entre os valores experimentais e ajustados para a curva de eficiência em função da energia gama. As barras de erros correspondem ao desvio padrão no valor experimental. Contagem de fundo por Função Degrau (2).

4.2.2 Ajuste Polinomial com auxílio do método de Monte Carlo

Este ajuste foi efetuado por meio da equação (2.23). Os valores de eficiência total foram calculados pelo programa MCEFIC^[27], considerando a aproximação para fonte puntiforme. A atenuação na janela do detector (0,5 mm) foi considerada e o ajuste foi feito para intervalo entre 121 e 2754 keV.

A razão entre as eficiências de pico e total para as energias de 59 e 81 keV resultaram 1.070 e 1.025, respectivamente. Considerando apenas a incerteza experimental, estas razões diferem do valor calculado por Monte Carlo (igual à unidade), indicando algum efeito sistemático no detector, por exemplo, coleta incompleta de carga, o qual pode reduzir a eficiência de pico para valores abaixo da eficiência total.

A seguir estão os resultados de eficiência obtidos, utilizando diferentes metodologias de cálculo de área sob o pico de absorção total.

4.2.2.1 Ajuste feito com o cálculo da área por integração numérica

Tabela 4-6 Parâmetros estimados, desvios padrões (entre parênteses) e respectivas matrizes de covariância (triângulo superior, incluindo a diagonal principal) e correlação (triângulo inferior). Integração numérica.

Parâmetro	Valor	U_{a_0}	C_{a_0}	a_1	A_2	a_3	a_4
U_{a_0}	5,9806(44)	0,000019	0,000000	-0,000007	-0,000017	-0,000013	-0,000003
C_{a_0}	-1,7167(68)	0,004	0,000046	0,000026	-0,000014	-0,000028	-0,000008
a_1	-0,6274(96)	-0,161	0,392	0,000093	-0,000020	-0,000094	-0,000030
a_2	-0,0357(75)	-0,528	0,000	-0,275	0,000056	0,000067	0,000017
a_3	-0,149(12)	-0,239	-0,334	-0,790	0,727	0,000150	0,000045
a_4	-0,0524(37)	-0,172	-0,301	-0,818	0,605	0,983	0,000014
χ^2/ν	1,13						

A figura 4.4 corresponde ao gráfico dos resíduos percentuais deste ajuste. As barras de erros correspondem ao desvio padrão no valor experimental. A distribuição dos resíduos não indica tendenciosidade no ajuste, apresentando um resultado satisfatório.

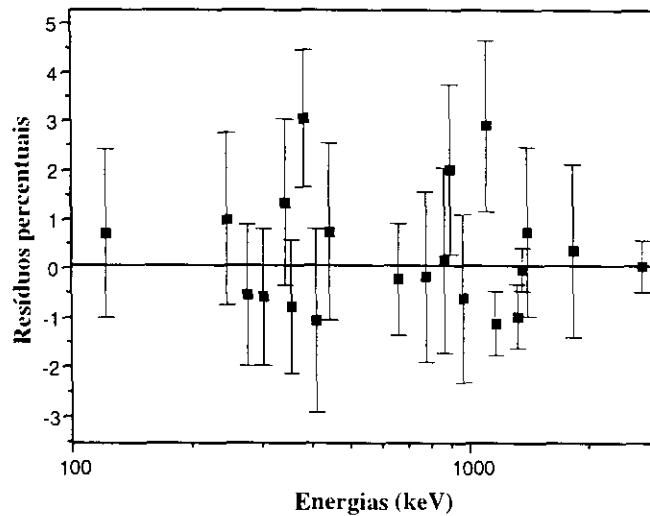


Figura 4-4 Resíduos percentuais entre os valores experimentais e ajustados para a curva de eficiência em função da energia gama. A barras de erros correspondem ao desvio padrão no valor experimental. Contagem de fundo por Integração numérica.

4.2.2.2 Ajuste feito para área calculada pela Função Degrau (1)

A tabela 4.7 mostra os resultados obtidos pelo ajuste da função polinomial (equação 2.23), utilizando a Função Degrau (1) para a contagem de fundo. O grau do polinômio foi escolhido de modo a minimizar o valor do Qui-quadrado reduzido, cujo valor resultou 5,2. A probabilidade de exceder este valor é menor que 10^{-4} , indicando um péssimo ajuste.

A figura 4.5 corresponde ao gráfico dos resíduos percentuais deste ajuste. As barras de erros correspondem ao desvio padrão no valor experimental. A distribuição dos resíduos indica uma flutuação excessiva entre os pontos, o que é confirmado pelo valor elevado do Qui-Quadrado. A explicação dada no item 4.2.1.2 para este comportamento, aplica-se também para este caso, uma vez que ambas utilizam função Degrau (1).

Tabela 4-7 Parâmetros estimados, desvios padrões (entre parênteses) e respectivas matrizes de covariância (triângulo superior, incluindo a diagonal principal) e correlação (triângulo inferior). Função Degrau (1).

Parâmetro	Valor	U_{a_0}	C_{a_0}	a_1	a_2	a_3	a_4
U_{a_0}	5,9853(48)	0,000023	0,000000	-0,000008	-0,000021	-0,000016	-0,000004
C_{a_0}	-1,7095(48)	0,000	0,000023	0,000016	-0,000008	-0,000017	-0,000005
a_1	-0,6089(94)	-0,168	0,344	0,000088	-0,000014	-0,000084	-0,000027
a_2	-0,0558(82)	-0,530	0,000	-0,176	0,000068	0,000075	0,000019
a_3	-0,173(12)	-0,271	-0,284	-0,725	0,732	0,000153	0,000046
a_4	-0,0564(37)	-0,200	-0,262	-0,770	0,602	0,982	0,000014
χ^2/ν	5,20						

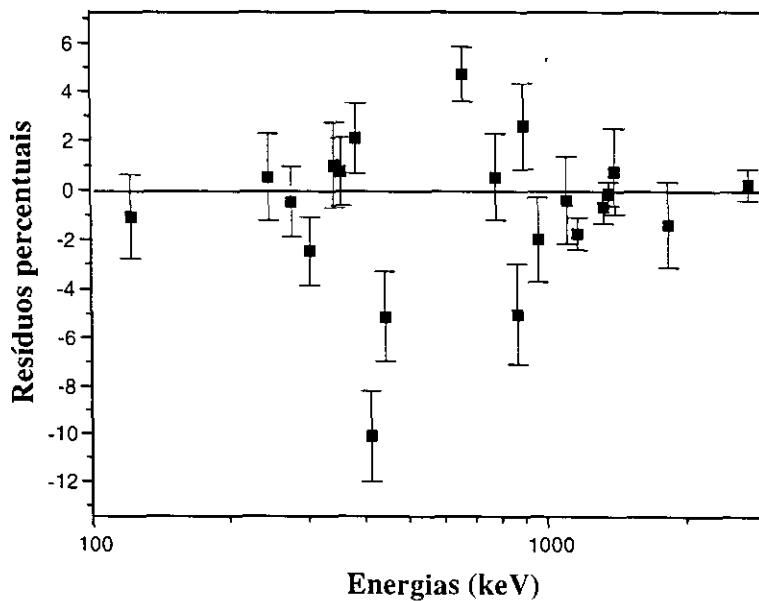


Figura 4-5 Resíduos percentuais entre os valores experimentais e ajustados para a curva de eficiência em função da energia gama. As barras de erros correspondem ao desvio padrão no valor experimental. Contagem de fundo por Função Degrau (1).

4.2.2.3 Ajuste feito para área calculada pela Função Degrau (2)

O resultado apresentado na tabela 4.8 corresponde ao ajuste efetuado utilizando a função descrita pela equação (2.23), aplicando a função Degrau (2) para a contagem de fundo. O Qui-quadrado reduzido resultou 1,10. A probabilidade de exceder este valor é de 0,42, indicando um bom ajuste.

A figura 4.6 corresponde ao gráfico dos resíduos percentuais deste ajuste. As barras de erros correspondem ao desvio padrão no valor experimental. A distribuição dos resíduos não indica tendenciosidade no ajuste, apresentando um resultado satisfatório.

Tabela 4-8 Parâmetros estimados, desvios padrões (entre parênteses) e respectivas matrizes de covariância (triângulo superior, incluindo a diagonal principal) e correlação (triângulo inferior). Função Degrau (2).

Parâmetro	Valor	Ua ₀	Ca ₀	a ₁	a ₂	a ₃	a ₄
Ua ₀	5,9836(83)	0,000069	0,000000	-0,000021	-0,000061	-0,000048	-0,000011
Ca ₀	-1,7205(48)	0,003	0,000023	0,000015	-0,000008	-0,000016	-0,000005
a ₁	-0,62219(95)	-0,262	0,324	0,000091	0,000011	-0,000061	-0,000021
a ₂	-0,043(12)	-0,635	0,000	0,097	0,000134	0,000126	0,000030
a ₃	-0,162(14)	-0,421	-0,249	-0,466	0,793	0,000188	0,000053
a ₄	-0,0559(40)	-0,332	-0,244	-0,569	0,663	0,979	0,000016
χ^2/ν	1,10						

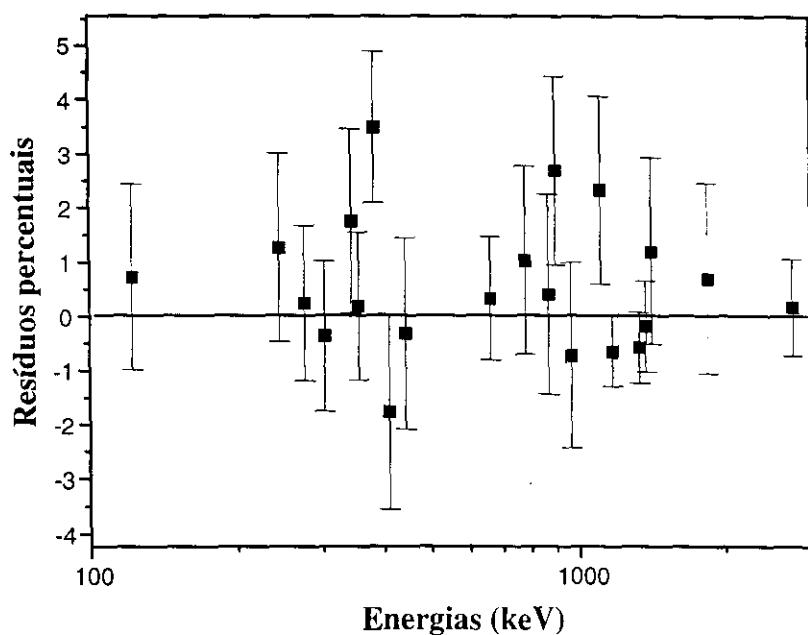


Figura 4-6 Resíduos percentuais entre os valores experimentais e ajustados para a curva de eficiência em função da energia gama. As barras de erros correspondem ao desvio padrão no valor experimental. Contagem de fundo por Função Degrau (2).

4.2.3 Ajuste não-linear por Gauss-Marquardt

Este ajuste, feito utilizando a função proposta (2.23), tem como característica a representação da curva de eficiências em função da energia em três regiões distintas. Essa função, por ter um número elevado de parâmetros a serem ajustados, foi inicialmente ajustada em um intervalo menor, entre 59 e 1300 keV, com o objetivo de determinar um ponto de junção para cada modelo de cálculo de área neste intervalo. Para o cálculo de área por integração numérica o ponto obtido foi o de 258.14 keV, e para o cálculo de área utilizando a função degrau (2) foi o de 280.21 keV. Por apresentar valores discrepantes nos ajustes anteriores, a função degrau (1) não foi utilizada neste processo de ajuste. Após serem fixados estes valores de junção, foi efetuado o ajuste com auxílio da função (2.23) no intervalo total, entre 59 e 2754 keV.

4.2.3.1 Ajuste com-cálculo de área por integração numérica (ponto de junção fixo)

O resultado apresentado na tabela 4.9 corresponde ao ajuste efetuado utilizando a função descrita pela equação (2.23), onde o número de parâmetros ajustados foi 7 e o primeiro ponto de junção fixo com o valor de 258,14. O Qui-Quadrado reduzido obtido foi 1.62. A probabilidade de exceder este valor é de 0,057, indicando um ajuste de má qualidade.

A figura 4.7 corresponde ao gráfico dos resíduos percentuais deste ajuste. A variação um pouco excessiva dos resíduos e o ponto fixo de junção podem ser os motivos pelos quais esse ajuste não resultou satisfatório.

Tabela 4-9 Parâmetros estimados, desvios padrões (entre parênteses) e respectivas matrizes de covariância (triângulo superior, incluindo a diagonal principal) e correlação (triângulo inferior). Integração numérica.

Parâmetro	Valor	U_{a_0}	C_{b_0}	b_1	a_2	b_2	c_2	a_5
U_{b_0}	1,5803(75)	0,000057	0,000020	-0,000019	-0,000027	0,000006	-0,000003	-0,008821
C_{b_0}	-6,1194(71)	0,379	0,000051	-0,000036	-0,000049	0,000019	0,000030	0,051238
b_1	-1,033(12)	-0,214	-0,430	0,000139	0,000144	-0,000097	-0,000103	-0,275707
a_2	-0,462(13)	-0,268	0,000	0,916	0,000177	-0,000096	-0,000108	-0,275320
b_2	0,0541(87)	0,087	0,301	-0,944	-0,830	0,000075	0,000071	0,201392
c_2	-0,129(13)	-0,034	0,317	-0,668	-0,619	0,623	0,000172	0,189159
a_5	1170(25)	-0,047	0,292	-0,946	-0,838	0,939	0,584	609,826
χ^2/ν	1,62							

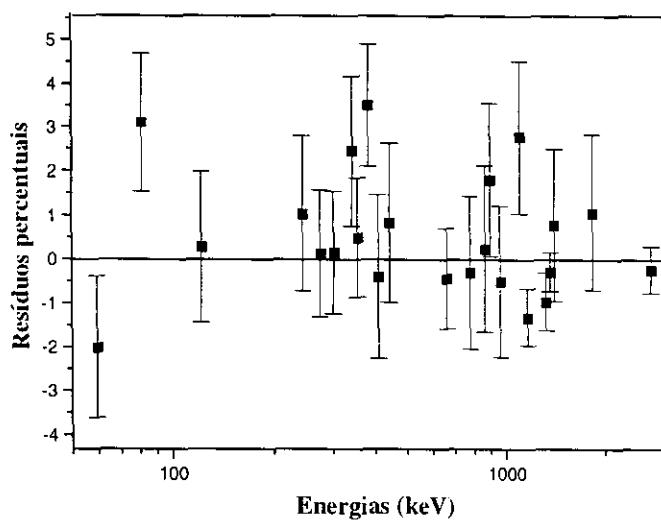


Figura 4-7 Resíduos percentuais entre os valores experimentais e ajustados para a curva de eficiência em função da energia gama. As barras de erros correspondem ao desvio padrão no valor experimental. Contagem de fundo por integração numérica.

4.2.3.2 Ajuste com cálculo de área por Degrau (2) (ponto de junção fixo)

O resultado apresentado na tabela 4.10 corresponde ao ajuste efetuado utilizando a função descrita pela equação (2.23), onde o número de parâmetros ajustados foi 7 e o primeiro ponto de junção fixo com o valor de 280,21. O Qui-Quadrado reduzido obtido foi 1,10. A probabilidade de exceder este valor é de 0,36, indicando um bom ajuste.

A figura 4.8 corresponde ao gráfico dos resíduos percentuais deste ajuste. As barras de erros correspondem ao desvio padrão no valor experimental. A distribuição dos resíduos não indica nenhuma tendenciosidade no ajuste, apresentando portanto um resultado satisfatório.

Tabela 4-10 Parâmetros estimados, desvios padrões (entre parênteses) e respectivas matrizes de covariância (triângulo superior, incluindo a diagonal principal) e correlação (triângulo inferior). Função degrau (2).

Parâmetro	Valor	U_{a_0}	C_{b_0}	b_1	a_2	b_2	c_2	a_5
U_{a_0}	1,5034(98)	0,000096	0,000019	-0,000010	-0,000016	-0,000003	-0,000096	-0,018202
C_{b_0}	-6,1995(58)	0,326	0,000034	-0,000017	-0,000025	0,000003	0,000019	0,011710
b_1	-1,039(11)	-0,094	-0,271	0,000115	0,000107	-0,000081	-0,000085	-0,254418
a_2	-0,401(11)	-0,147	0,000	0,909	0,000122	-0,000072	-0,000082	-0,227485
b_2	0,0588(80)	-0,034	0,061	-0,942	-0,813	0,000064	0,000056	0,192890
c_2	-0,171(23)	-0,433	0,145	-0,351	-0,330	0,311	0,000507	0,161540
a_5	1286(25)	-0,074	0,080	-0,947	-0,825	0,964	0,286605	626,26700
χ^2/v		1,10						

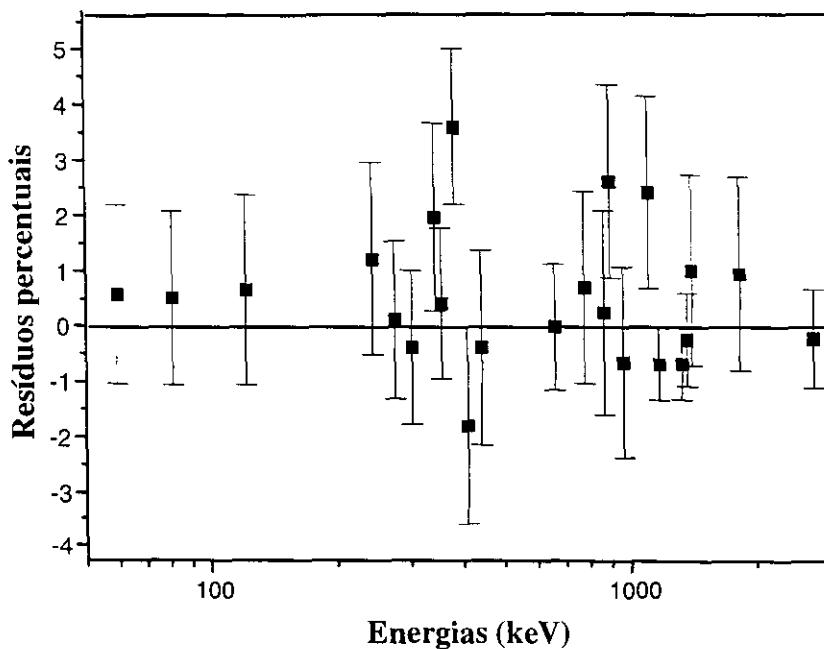


Figura 4-8 Resíduos percentuais entre os valores experimentais e ajustados para a curva de eficiência em função da energia gama. As barras de erros correspondem ao desvio padrão no valor experimental. Contagem de fundo pela função degrau (2).

4.2.3.3 Ajuste feito com o cálculo da área por integração numérica

Neste processo de ajuste foi novamente utilizada a equação (2.23) sem fixar o ponto de junção, ou seja, os oito parâmetros da função foram deixados livres. O resultado é apresentado na tabela 4.11 correspondendo a 8 parâmetros de ajuste. O Qui-Quadrado reduzido obtido foi 2,37. A probabilidade de exceder este valor é menor que 10^{-4} , indicando um mau ajuste.

A figura 4.9 corresponde ao gráfico dos resíduos percentuais deste ajuste. As barras de erros correspondem ao desvio padrão no valor experimental. A distribuição dos resíduos indica uma flutuação um pouco excessiva entre os pontos, o que é confirmado pelo valor elevado do Qui-Quadrado. Uma explicação para este comportamento pode ser a metodologia do cálculo da área.

Tabela 4-11 Parâmetros estimados, desvios padrões (entre parênteses) e respectivas matrizes de covariância (triângulo superior, incluindo a diagonal principal) e correlação (triângulo inferior). Integração numérica.

Parâmetro	Valor	U_{a_0}	C_{b_0}	b_1	a_2	b_2	c_2	a_4	a_5
U_{b_0}	1,562(36)	0,001261	0,001243	0,000389	-0,000585	-0,000333	-0,000344	-0,344264	-0,382117
C_{b_0}	-6,139(36)	0,971	0,001300	0,000382	-0,000618	-0,000330	-0,000312	-0,351353	-0,379478
b_1	-1,039(17)	0,662	0,639	0,000274	-0,000052	-0,000211	-0,000251	-0,116307	-0,170262
a_2	-0,451(21)	-0,796	-0,001	-0,152	0,000428	0,000065	0,000020	0,161021	0,136198
b_2	0,059(13)	-0,715	-0,697	-0,971	0,240	0,000172	0,000192	0,096973	0,137850
c_2	-0,153(19)	-0,523	-0,467	-0,819	0,052	0,791	0,000343	0,096754	0,147059
a_4	263(10)	-0,976	-0,981	-0,707	0,784	0,743	0,526	98,662000	108,6340
a_5	1219(12)	-0,928	-0,908	-0,887	0,568	0,906	0,685	93,111	134,3020
χ^2/v	2.37								

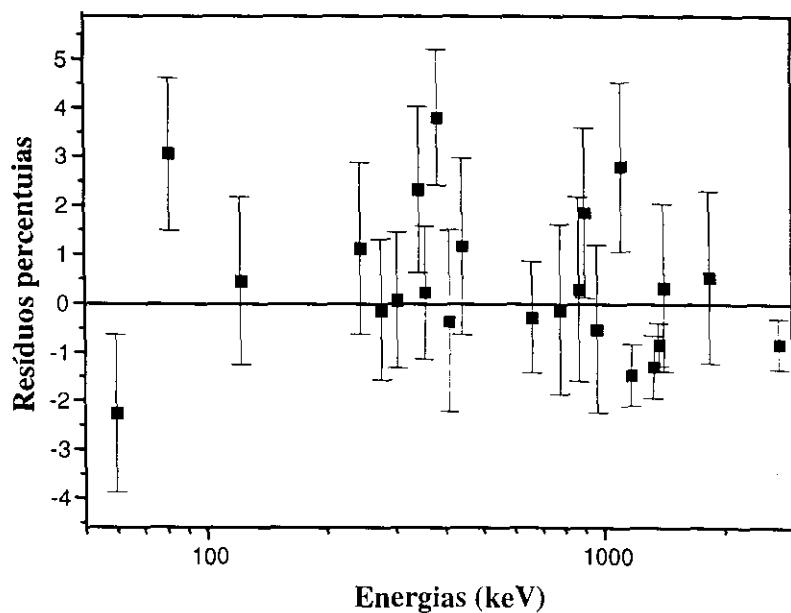


Figura 4-9 Resíduos percentuais entre os valores experimentais e ajustados para a curva de eficiência em função da energia gama. As barras de erros correspondem ao desvio padrão no valor experimental. Contagem de fundo por Integração numérica.

4.2.3.4 Ajuste feito com o cálculo da área pela Função Degrau (2)

Neste processo de ajuste foi novamente utilizada a função 2.23 sem ponto fixo de junção, ou seja, os oito parâmetros da função foram ajustados conjuntamente. O resultado apresentado na tabela 4.12 corresponde ao ajuste efetuado utilizando a função descrita pela equação (2.23), onde o número de parâmetros ajustados é 8. O Qui-Quadrado reduzido obtido foi 1.22. A probabilidade de exceder este valor é de 0,25, indicando um bom ajuste. Os resíduos são apresentados na figura 4.10. Esta figura indica não haver nenhuma tendenciosidade no ajuste, apresentando portanto um resultado satisfatório.

Tabela 4-12 Parâmetros estimados, desvios padrões (entre parênteses) e respectivas matrizes de covariância (triângulo superior, incluindo a diagonal principal) e correlação (triângulo inferior). Função Degrau (2).

Parâmetro	Valor	U_{a_0}	C_{b_0}	b_1	a_2	b_2	c_2	a_4	a_5
U_{b_0}	1,491(41)	0,001678	0,001617	0,000435	-0,000634	-0,000408	-0,000469	-0,471193	-0,489759
C_{b_0}	-6,212(41)	0,972	0,001649	0,000432	-0,000650	-0,000406	-0,000351	-0,476151	-0,490303
b_1	-1,045(15)	0,687	0,688	0,000239	-0,000068	-0,000195	-0,000231	-0,131877	-0,172814
a_2	-0,398(19)	-0,816	-0,001	-0,234	0,000360	0,000087	0,000026	0,184668	0,158440
b_2	0,064(13)	-0,766	-0,769	-0,970	0,353	0,000169	0,000184	0,120217	0,152412
c_2	-0,186(26)	-0,441	-0,333	-0,576	0,052	0,546	0,000672	0,109286	0,151518
a_4	284(12)	-0,971	-0,990	-0,721	0,822	0,781	0,356	140,35500	144,89100
a_5	1290(13)	-0,937	-0,947	-0,877	0,655	0,920	0,458	0,9589215	162,66300
χ^2/v				1,22					

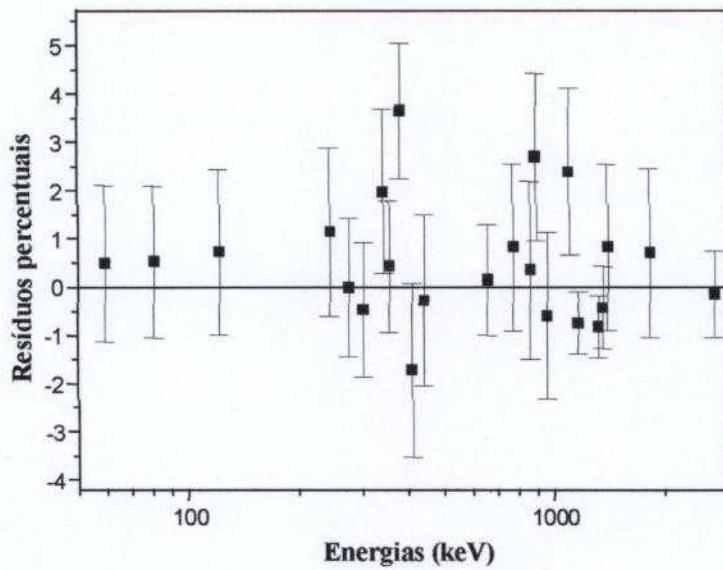


Figura 4-10 Resíduos percentuais entre os valores experimentais e ajustados para a curva de eficiência em função da energia gama. As barras de erros correspondem ao desvio padrão no valor experimental. Contagem de fundo pela Função degrau (2).

4.3 Representação Gráfica da Curva de Eficiência Ajustada

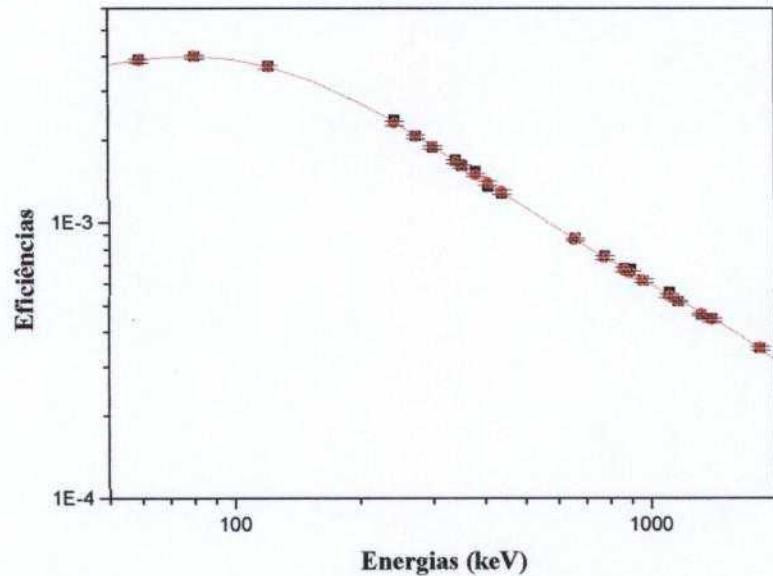


Figura 4-11 Curva obtida pelo ajuste descrito no item (4.2.1.3). Os pontos representam os valores das eficiências de pico experimentais, com as respectivas incertezas. A curva contínua representa o ajuste efetuado por mínimos quadrados.

4.4 Atividade de ^{24}Na calculada por meio dos parâmetros de ajuste

A diferença entre os parâmetros independentes C_{ao} e U_{ao} é igual ao logaritmo da atividade da fonte de ^{24}Na não-calibrada, uma vez que este resultado corresponde à razão entre as eficiências absoluta e relativa para a energia de referência E_o . Desta maneira, foi possível determinar esta atividade para os diversos ajustes apresentados nas seções anteriores. Os resultados obtidos estão na tabela 4.13.

Tabela 4-13 Atividade da fonte de ^{24}Na calculada para os diferentes métodos de ajuste

Ajuste	Atividade (Bq)
Polinomial (Integração numérica)	2205(18)
Polinomial (Degrau (1))	2201(15)
Polinomial (Degrau (2))	2219(21)
Monte Carlo (Integração numérica)	2202(18)
Monte Carlo (Degrau (1))	2197(15)
Monte Carlo (Degrau (2))	2217(21)
Função Polinomial Segmentada (Integração numérica – ponto fixo)	2207(23)
Função Polinomial Segmentada (Degrau (2)- ponto fixo)	2214(25)
Função Polinomial Segmentada sem ponto fixo(Integração numérica)	2210(80)
Função Polinomial Segmentada sem ponto fixo(Degrau (2))	2214(91)

Verifica-se que todos os resultados concordam entre si dentro da incerteza estimada. Os resultados para a função polinomial segmentada sem ponto fixo apresentaram incertezas elevadas possivelmente em razão do número elevado de parâmetros (oito parâmetros).

5 Conclusões

Foram estudadas três metodologias para a determinação da curva de eficiência em função da energia de um espectrômetro de HPGe. Este espectrômetro foi calibrado experimentalmente em um amplo intervalo de energia, desde 59 até 2754 keV. Além disso, foram desenvolvidos três métodos diferentes para a determinação da área sob o pico de absorção total. Finalmente, foi possível incluir uma metodologia que permite a combinação de fontes radioativas calibradas com não-calibradas para a determinação da curva de eficiência. Como subproduto, foi possível também determinar a atividade da fonte não-calibrada.

No processo de ajuste de uma curva de eficiência em função da energia descrito no presente trabalho, foram estudados: Ajuste polinomial simples, Polinomial com auxílio do método Monte Carlo e ajuste de funções não-lineares, pelo processo de Gauss-Marquardt. Quase todos os resultados, se mostraram satisfatórios, quando o cálculo das áreas sob o pico de absorção total foram efetuados, utilizando-se integração numérica e Função Degrau (2). A exceção é a função não-linear utilizando integração numérica para o cálculo da área.

Para os ajustes efetuados utilizando-se a função Degrau(1), os resultados foram insatisfatórios, em razão do valor elevado do Qui-quadrado, não sendo, portanto, recomendada esta metodologia para o cálculo da área.

Verificou-se que é possível efetuar ajustes de curvas de eficiência em função da energia com o auxílio do método de Monte Carlo, já que apresentaram valores de Qui-Quadrado bastantes satisfatórios. Entretanto, em baixa energia, os resultados experimentais de eficiência de pico divergiram dos valores calculados por Monte Carlo. Isto indica a necessidade de um código mais elaborado, tal como MCNP^[31] ou

GEANT^[32], para levar em conta processos de coleção de carga incompleta ou outros efeitos internos ao detetor, não considerados no código utilizado.

No caso, que corresponde a um função polinomial segmentada, foi possível estabelecer o ajuste da curva de eficiência, considerando três regiões distintas: em baixa, intermediária e alta energia. Os resultados obtidos mostraram-se bastantes satisfatórios, quando a área sob o pico de absorção total é calculada pela Função Degrau (2).

Diante dos resultados obtidos e apresentados no presente trabalho, a recomendação para o ajuste da eficiência em função da energia para o intervalo considerado, é que seja feito uso da função polinomial juntamente com o cálculo da área determinada pela Função Degrau (2).

Os resultados obtidos na determinação da atividade da fonte radioativa não-calibrada de ^{24}Na , mostraram-se também consistentes, pois as atividades calculadas por meio dos parâmetros de ajuste, para todas as funções ajustadas, concordaram entre si, dentro da incerteza estimada.

Com relação às propostas futuras, podemos mencionar a necessidade de se realiza um estudo mais detalhado da função Degrau (2), onde os parâmetros K_p e S possam ser considerados parâmetros de ajuste, juntamente com os demais. Além disso, seria interessante utilizar um código de Monte Carlo mais elaborado, de modo que a eficiência de pico seja a variável a ser ajustada e não a razão entre eficiência de pico e total. Isto possibilitaria o ajuste com poucos pontos experimentais, mantendo uma boa exatidão no valor interpolado.

Outra possibilidade é a de efetuar ajustes num intervalo maior de energia com o auxílio das funções propostas neste trabalho de modo a atender outra aplicações de espectrometria gama, onde a faixa de energia se extenda abaixo de 59 keV ou acima de 3 MeV.

6 Apêndice

Neste apêndice são apresentados os principais programas desenvolvidos no presente trabalho, para efetuar os ajustes das funções propostas. Estes programas foram escritos em linguagem Q-Basic e processados em ambiente DOS.

6.1 Programa ALMIX - Ajuste linear polinomial com “Mixing”

```

CLS
CLEAR ., 10000
DEFDBL A-T
DIM e(27), EFI(27, 1), cat(27), car(27), cig(27), ctm(27), cdme(27), SERR(27)
DIM ac(27, 27), aci(27, 27), a(800), b(27, 27), pro(27, 27), dx(27, 10), dxt(10, 27)
DIM dro(10, 27), dro1(10, 10), at(10, 10), dro2(10, 10), dro3(10, 10), ta(100)
DIM tb(10, 10), droi3(10, 10), dro4(10, 10), dro5(10, 10), dro6(10, 27), dro7(10, 27)
DIM eefi(27), eeifi(27), ee(30, 10), eee(30), DES(30, 1), dest(1, 30)
DIM dro9(1, 30), qui(1, 1), efit(30, 1)
inp$ = "c:\qb\vamat110.txt"
covar$ = "c:\qb\vacov11.txt"
out$ = "c:\qb\marei2.out"
OPEN "i", #1, inp$
OPEN "i", #2, covar$
OPEN "o", #3, out$
INPUT #1, descr$
INPUT #1, eb
PRINT #3, "energia de referencia:"; eb
INPUT #1, n
PRINT #3, "numero de pontos:"; n
INPUT #1, ycali
INPUT #1, yuncali
INPUT #1, c
PRINT #3, "eficiencias c/ fontes calibradas"; ycali
PRINT #3, "eficiencias c/ fontes nÃ£o calibradas"; yuncali
PRINT #3,
FOR i = 1 TO n
    INPUT #1, e(i), EFI(i, 1), cat(i), car(i), cig(i), ctm(i), cdme(i), SERR(i), efit(i, 1)
    PRINT #3, USING " ##.####^###"; e(i), efi(i, 1), cat(i), car(i), cig(i), ctm(i), cdme(i), serr(i)
NEXT i
sr = 0
FOR i = 1 TO n
    sr = sr + EFI(i, 1)
NEXT i
PRINT #3, "m,dia das eficiencias"; sr / n

REM
REM { obtendo a matriz de covariância dos dados de entrada }
REM
FOR i = 1 TO n
    FOR J = 1 TO n

```

```

    INPUT #2, ac(i, J)
    NEXT J
NEXT i
FOR i = 1 TO n
    PRINT #3,
    FOR j = 1 TO n
        PRINT #3, USING " ##.#####^### "; ac(i, j);
    NEXT j
NEXT i
REM
REM
CLOSE 1
CLOSE 2
FOR i = 1 TO n
    EFI(i, 1) = EFI(i, 1) / efit(i, 1)
NEXT i
REM
REM
REM
REM { invertendo a matriz de erros dos dados de entrada }
REM
n1 = n
k3 = 0
FOR l = 1 TO n
    FOR jj = 1 TO n
        xxx = ac(l, jj)
        k3 = k3 + 1
        a(k3) = xxx
        b(jj, l) = xxx
    NEXT jj
NEXT l
GOSUB 98
d1 = d
PRINT #3,
PRINT #3, "determinante da matriz original="; d1
PRINT #3,
IF d = 0 THEN STOP
FOR j2 = 1 TO n1
    FOR l = 1 TO n1
        n2 = 0
        FOR j1 = 1 TO n1
            FOR ll = 1 TO n1
                IF jl = j2 THEN 83
                IF ll = l THEN 83
                n2 = n2 + 1
                a(n2) = b(ll, j1)
83     NEXT ll
        NEXT j1
        n = n1 - 1
        GOSUB 98
        aci(l, j2) = (d / d1) * (-1) ^ (l + j2)
    NEXT l
NEXT j2
PRINT #3, " covariancia dos dados de entrada "
FOR jj = 1 TO n1
    PRINT #3,
    FOR l = 1 TO jj
        PRINT #3, USING " ##.#####^### "; aci(jj, l),

```

```

        NEXT I
        NEXT jj
        PRINT #3,
        GOTO 136
98   REM
    d = 1; j3 = -n
    FOR jj = 1 TO n
        j4 = jj + 1; j3 = j3 + n + 1; G1 = j3 - jj
        GOSUB 108
        d = d * b1 * (-1) ^ SGN((G3 - jj)); IF d = 0 THEN RETURN
        GOSUB 114
        GOSUB 123
    NEXT jj
    RETURN
108  REM { subrotina para procura do pivo }
    b1 = 0
    FOR KK = jj TO n; G2 = G1 + KK
        IF ABS(b1) >= ABS(a(G2)) THEN 113
        b1 = a(G2); G3 = KK
113  NEXT KK; RETURN
114  REM { subrotina para dividir pelo pivo e trocar de lugar }
    G4 = jj + n * (jj - 1); G1 = G3 - jj
    FOR KK = jj TO n
        G4 = G4 + n
        G5 = G4 + G1
        s5 = a(G4); a(G4) = a(G5); a(G5) = s5
        a(G4) = a(G4) / b1
    NEXT KK
    RETURN
123  REM { subrotina para eliminacao da variavel }
    IF jj = n THEN RETURN
    p = n * (jj - 1)
    FOR X = j4 TO n; x2 = p + X; G1 = jj - X
        FOR x1 = j4 TO n; x3 = n * (x1 - 1) + X; j5 = x3 + G1
            a(x3) = a(x3) - a(x2) * a(j5)
        NEXT x1
    NEXT X
    RETURN
136  REM { fim da rotina }
    n = n + 1
REM
REM
REM { determinando a matriz planejamento }
REM
    FOR i = 1 TO n
        IF i <= ycali THEN
            dx(i, 1) = 0
        ELSE
            dx(i, 1) = 1
        END IF
    NEXT i
REM
REM
    FOR i = 1 TO n
        IF i <= ycali THEN
            dx(i, 2) = 1
        ELSE
            dx(i, 2) = 0
        END IF

```

```

NEXT i
REM
REM
FOR J = 3 TO c
FOR i = 1 TO n
dx(i, J) = LOG(e(i) / eb) ^ (J - 2)
NEXT i
NEXT J
REM
REM
FOR i = 1 TO n
PRINT #3,
FOR j = 1 TO c
PRINT #3, USING " ##.####^###"; dx(i, j);
NEXT j
NEXT i
PRINT #3,
REM
REM { determinando a transposta da matriz planejamento }
REM
FOR i = 1 TO c
PRINT #3,
FOR J = 1 TO n
dxt(i, J) = dx(J, i)
PRINT #3, USING " ##.####^### "; dxt(i, j);
NEXT J
NEXT i
PRINT #3,
REM
REM { dro: produto de dxt por aci }
REM
FOR i = 1 TO c
FOR w = 1 TO n
dro(i, w) = 0
NEXT w
NEXT i
REM
FOR i = 1 TO c
FOR w = 1 TO n
FOR J = 1 TO n
dro(i, w) = dro(i, w) + dxt(i, J) * aci(J, w)
NEXT J
NEXT w
NEXT i
REM
REM { dro1: produto de dro por dx }
REM
FOR i = 1 TO c
FOR w = 1 TO c
dro1(i, w) = 0
NEXT w
NEXT i
REM
FOR i = 1 TO c
FOR w = 1 TO c
FOR J = 1 TO n
dro1(i, w) = dro1(i, w) + dro(i, J) * dx(J, w)
NEXT J
NEXT w

```

```

NEXT i
REM
REM { invertendo a matriz dro1 }
REM
tn1 = c
tk3 = 0
FOR l = 1 TO c
  FOR jj = 1 TO c
    txxx = dro1(l, jj)
    tk3 = tk3 + 1
    ta(tk3) = txxx
    tb(jj, l) = txxx
  NEXT jj
NEXT l
GOSUB 295
td1 = td
PRINT #3,
PRINT #3, "det.da matriz de covariancia dos parametros="; td1
PRINT #3,
IF td = 0 THEN STOP
FOR tj2 = 1 TO tn1
  FOR l = 1 TO tn1
    tn2 = 0
    FOR tj1 = 1 TO tn1
      FOR tl1 = 1 TO tn1
        IF tj1 = tj2 THEN 280
        IF tl1 = l THEN 280
        tn2 = tn2 + 1
        ta(tn2) = tb(tl1, tj1)
    280  NEXT tl1: NEXT tj1
    c = tn1 - 1
    GOSUB 295
    droi1(l, tj2) = (td / td1) * (-1) ^ (l + tj2)
  NEXT l: NEXT tj2
  PRINT #3, " MATRIZ INVERSA DE dro1 "
  FOR jj = 1 TO tn1
    PRINT #3,
    FOR l = 1 TO jj
      PRINT #3, USING " ##.#####^##"; droi1(jj, l),
    NEXT l
  NEXT jj
  PRINT #3,
  PRINT #3,
  GOTO 325
295  REM
  td = l: tj3 = -c
  FOR jj = 1 TO c
    tj4 = jj + 1: tj3 = tj3 + c + 1: tg1 = tj3 - jj
  GOSUB 305
  td = td * tb1 * (-1) ^ SGN((tg3 - jj)): IF td = 0 THEN RETURN
  GOSUB 311
  GOSUB 317
  NEXT jj
  RETURN
305  REM  SUBROTINA PARA PROCURA DO PIVO
  tb1 = 0
  FOR tkk = jj TO c: tg2 = tg1 + tkk
    IF ABS(tb1) >= ABS(ta(tg2)) THEN 310
    tb1 = ta(tg2): tg3 = tkk

```

```

310  NEXT tkk; RETURN
311  REM   SUBROTINA PARA DIVIDIR PELO PIVO E TROCAR DE LUGAR
      tg4 = jj + c * (jj - 2); tg1 = tg3 - jj
      FOR tkk = jj TO c: tg4 = tg4 + c: TG5 = tg4 + tg1
      TS5 = ta(tg4): ta(tg4) = ta(TG5): ta(TG5) = TS5
      ta(tg4) = ta(tg4) / tg1: NEXT tkk
      RETURN
317  REM   SUBROTINA PARA ELIMINACAO DA VARIABEL
      IF jj = c THEN RETURN
      TP = c * (jj - 1)
      FOR tx = tj4 TO c: tx2 = TP + tx: tg1 = jj - tx
      FOR tx1 = tj4 TO c: tx3 = c * (tx1 - 1) + tx: tj5 = tx3 + tg1
      ta(tx3) = ta(tx3) - ta(tx2) * ta(tj5)
      NEXT tx1
      NEXT tx: RETURN
325  c = c + 1
REM
      FOR i = 1 TO c
          FOR J = 1 TO c
              dro5(i, J) = 0
          NEXT J
      NEXT i
      FOR i = 1 TO c
          FOR J = 1 TO c
              dro5(i, J) = droi1(i, J)
          NEXT J
      NEXT i
      PRINT #3, "*****Matriz de Covariancia dos Parametros*****"
      FOR i = 1 TO c
          PRINT #3,
          FOR J = 1 TO i
              PRINT #3, USING " ##.#####^###"; dro5(i, J);
          NEXT J
      NEXT i
      PRINT #3,
      PRINT #3,
      PRINT #3,
      REM
      REM { calculando os coeficientes de ajuste }
      REM
      REM { dro6: produto de dro5 por dxt }
      REM
          FOR i = 1 TO c
              FOR w = 1 TO n
                  dro6(i, w) = 0
              NEXT w
          NEXT i
      REM
          FOR i = 1 TO c
              FOR w = 1 TO n
                  FOR J = 1 TO c
                      dro6(i, w) = dro6(i, w) + dro5(i, J) * dxt(J, w)
                  NEXT J
              NEXT w
          NEXT i
      REM
      REM { dro7: produto de dro6 por aci }
      REM
          FOR i = 1 TO c
              FOR w = 1 TO n

```

```

        dro7(i, w) = 0
        NEXT w
        NEXT i
REM
FOR i = 1 TO c
FOR w = 1 TO n
FOR J = 1 TO n
    dro7(i, w) = dro7(i, w) + dro6(i, J) * aci(J, w)
NEXT J
NEXT w
NEXT i
REM
REM { dro8: produto de dro7 por log(efi) }
REM
FOR i = 1 TO c
FOR w = 1 TO 1
    dro8(i, w) = 0
NEXT w
NEXT i
REM
FOR i = 1 TO c
FOR w = 1 TO 1
FOR J = 1 TO n
    dro8(i, w) = dro8(i, w) + dro7(i, J) * LOG(EFI(J, w))
NEXT J
NEXT w
NEXT i
REM
PRINT #3, "Parametros de ajuste"
PRINT #3,
FOR i = 1 TO c
    PRINT #3, USING " ##.####^###"; dro8(i, 1)
NEXT i
PRINT #3,
PRINT #3,
REM { fim do calculo dos parametros }
REM
REM { Calculando as eficiencias }
REM
FOR i = 1 TO n
    eefi(i) = 0
NEXT i
FOR i = 1 TO ycali
    FOR J = 2 TO c
        eefi(i) = eefi(i) + dro8(J, 1) * LOG(e(i) / eb) ^ (J - 2)
    NEXT J
NEXT i
FOR i = (ycali + 1) TO n
    eefi(i) = 0
NEXT i
FOR i = (ycali + 1) TO n
    FOR J = 3 TO c
        eefi(i) = eefi(i) + dro8(J, 1) * LOG(e(i) / eb) ^ (J - 2)
    NEXT J
NEXT i
FOR i = (ycali + 1) TO n
    eefi(i) = eefi(i) + dro8(1, 1)
NEXT i
FOR i = 1 TO n

```

```

' PRINT #3, EXP(eefi(i))
' NEXT i
REM
REM      calculando os erros nas eficiencias calculadas
REM
REM      Calculando o produto entre as matrizes dx por dro5
REM
FOR i = 1 TO ycali
  FOR w = 1 TO c
    ee(i, w) = 0
  NEXT w
NEXT i
FOR i = 1 TO ycali
  FOR w = 1 TO c
    FOR J = 1 TO c
      ee(i, w) = ee(i, w) + dx(i, J) * dro5(J, w)
    NEXT J
  NEXT w
NEXT i
REM      Calculando o produto "especial" das matrizes ee por dxt
REM
FOR i = 1 TO ycali
  eee(i) = 0
NEXT i
FOR i = 1 TO ycali
  FOR w = 1 TO c
    eee(i) = eee(i) + ee(i, w) * dxt(w, i)
  NEXT w
NEXT i
PRINT #3,
PRINT #3,
REM
REM      Calculando o qui-quadrado
REM
REM
FOR i = 1 TO n
  DES(i, 1) = 0
NEXT i
FOR i = 1 TO n
  DES(i, 1) = (EFI(i, 1) - EXP(eefi(i)))
NEXT i
PRINT #3, " energias  eficiencias  erros  efic. exper.  resid."
PRINT #3,
FOR J = 1 TO n
  PRINT #3, USING " ##.####^##"; e(J), EXP(eefi(J)), SQR(eee(J)), EFI(J, 1), DES(J, 1), 100 *
DES(J, 1) / EFI(J, 1), 100 * SERR(J)
NEXT J
PRINT #3,
qui = 0
FOR i = 1 TO n
  qui = qui + (DES(i, 1)) ^ 2 / (SERR(i) * EFI(i, 1)) ^ 2
NEXT i
PRINT #3, "qui quadrado reduzido"
PRINT #3,
PRINT #3, USING " ##.####^##"; qui / (n - c)
CLOSE 3
STOP

```

6.2 Programa MARMIX: Ajuste Gauss Marquardt, com “Mixing”

```

CLS
CLEAR , , 10000
DEFDBL A-T
DIM e(27), efi(27, 1), cat(27), car(27), cig(27), ctm(27), cdme(27), serr(27)
DIM ac(27, 27), aci(27, 27), a(800), b(27, 27), pro(27, 27), dx(27, 8), dxt(8, 27)
DIM dro(10, 27), dro1(10, 10), at(10, 10), dro2(10, 10), dro3(10, 10), ta(100)
DIM tb(10, 10), droi3(10, 10), dro4(10, 10), dro5(10, 10), dro6(10, 27), dro7(10, 27)
DIM eefi(27), eeefi(27), ee(30, 10), eee(30), aly(27), aef(27, 1)
DIM delta1(27, 1), deltat1(1, 27), des(30, 1), cimo(10, 30), qui(30)
DIM dro66(10, 30), dro77(10, 30)
inp$ = "c:\qb\energia.txt"
covar$ = "c:\qb\covarian.txt"
out$ = "c:\qb\maresf.out"
OPEN "i", #1, inp$
OPEN "i", #2, covar$
OPEN "o", #3, out$
INPUT #1, descr$
INPUT #1, n
PRINT #3, "numero de pontos:"; n
INPUT #1, ycali
INPUT #1, yuncali
INPUT #1, c
PRINT #3, "eficiencias c/ fontes calibradas"; ycali
PRINT #3, "eficiencias c/ fontes nÆo calibradas"; yuncali
PRINT #3,
FOR i = 1 TO n
    INPUT #1, e(i), efi(i, 1), cat(i), car(i), cig(i), ctm(i), cdme(i), serr(i)
    PRINT #3, USING " ##.####^### "; e(i), efi(i, 1), cat(i), car(i), cig(i), ctm(i), cdme(i), serr(i)
NEXT i
REM
REM { obtendo a matriz de covariancia dos dados de entrada }
REM
FOR i = 1 TO n
    FOR j = 1 TO n
        INPUT #2, ac(i, j)
    NEXT j
NEXT i
FOR i = 1 TO n
    PRINT #3,
    FOR j = 1 TO n
        PRINT #3, USING " ##.####^### "; ac(i, j);
    NEXT j
NEXT i
REM
REM
CLOSE 1
CLOSE 2
lambda = .001
REM
REM
REM parametros iniciais
REM
pa(1) = Ua1; pa(2) = Ca1 : pa(3) = b1 : pa(4) = a2 : pa(5) = b2 : pa(6) = c2 : pa(7) = a4 : pa(8) = a5
REM { invertendo a matriz de erros dos dados de entrada }
REM

```

```

n1 = n
k3 = 0
FOR l = 1 TO n
  FOR jj = 1 TO n
    xxx = ac(l, jj)
    k3 = k3 + 1
    a(k3) = xxx
    b(jj, l) = xxx
  NEXT jj
NEXT l
GOSUB 98
d1 = d
PRINT #3.
PRINT #3, "determinante da matriz original="; d1
PRINT #3,
IF d = 0 THEN STOP
FOR j2 = 1 TO n1
  FOR l = 1 TO n1
    n2 = 0
    FOR j1 = 1 TO n1
      FOR l1 = 1 TO n1
        IF j1 = j2 THEN 83
        IF l1 = l THEN 83
        n2 = n2 + 1
        a(n2) = b(l1, j1)
      NEXT l1
    NEXT j1
    n = n1 - 1
    GOSUB 98
    aci(l, j2) = (d / d1) * (-1) ^ (l + j2)
  NEXT l
NEXT j2
PRINT #3, " covariancia dos dados de entrada "
FOR jj = 1 TO n1
  PRINT #3,
  FOR l = 1 TO jj
    PRINT #3, USING "#.#^^^^"; aci(jj, l),
  NEXT l
NEXT jj
PRINT #3.
GOTO 136
98  REM
d = 1; j3 = -n
FOR jj = 1 TO n
  j4 = jj + 1; j3 = j3 + n + 1; G1 = j3 - jj
  GOSUB 108
  d = d * b1 * (-1) ^ SGN((G3 - jj)); IF d = 0 THEN RETURN
  GOSUB 114
  GOSUB 123
NEXT jj
RETURN
108 REM { subrotina para procura do pivo }
b1 = 0
FOR KK = jj TO n; G2 = G1 + KK
  IF ABS(b1) >= ABS(a(G2)) THEN 113
  b1 = a(G2); G3 = KK
113 NEXT KK; RETURN
114 REM { subrotina para dividir pelo pivo e trocar de lugar }
G4 = jj + n * (jj - 2); G1 = G3 - jj

```

```

FOR KK = jj TO n
  G4 = G4 + n
  G5 = G4 + G1
  s5 = a(G4); a(G4) = a(G5); a(G5) = s5
  a(G4) = a(G4) / b1
NEXT KK
RETURN

123  REM { subrotina para eliminacao da variavel }
IF jj = n THEN RETURN
p = n * (jj - 1)
FOR X = j4 TO n: x2 = p + X: G1 = jj - X
  FOR x1 = j4 TO n: x3 = n * (x1 - 1) + X: j5 = x3 + G1
    a(x3) = a(x3) - a(x2) * a(j5)
  NEXT x1
NEXT X
RETURN

136  REM { fim da rotina }
n = n + 1
PRINT #3, "parametros iniciais"
FOR i = 1 TO c
  PRINT #3, "p("; i; ")="; pa(i)
NEXT i
PRINT #3,
REM
FOR nhist = 1 TO 10
REM
  PRINT #3, "*****iteracao("; nhist; ")*****"
  PRINT #3, "*****"
  PRINT #3, "*****"
REM
REM   calculando as eficiencias
REM
  FOR i = 1 TO n
    aly(i) = 0
  NEXT i
  FOR i = 1 TO ycali
    IF e(i) <= pa(7) THEN
      aly(i) = ((LOG(e(i) / pa(7))) ^ 2) * pa(4) + LOG(e(i) / pa(7)) * pa(3) + pa(2)
    END IF
    IF (e(i) <= pa(8)) AND (e(i) > pa(7)) THEN
      aly(i) = ((LOG(e(i) / pa(7))) ^ 2) * pa(5) + LOG(e(i) / pa(7)) * pa(3) + pa(2)
    END IF
    IF e(i) > pa(8) THEN
      aly(i) = ((LOG(e(i) / pa(8))) ^ 2) * pa(6) + LOG(e(i) / pa(8)) * (pa(3) + 2 * pa(5) * LOG(pa(8) / pa(7))) + (pa(2) + pa(3) * LOG(pa(8) / pa(7)) + pa(5) * (LOG(pa(8) / pa(7))) ^ 2)
    END IF
  NEXT i
  FOR i = (ycali + 1) TO n
    IF e(i) <= pa(7) THEN
      aly(i) = ((LOG(e(i) / pa(7))) ^ 2) * pa(4) + LOG(e(i) / pa(7)) * pa(3) + pa(1)
    END IF
    IF (e(i) <= pa(8)) AND (e(i) > pa(7)) THEN
      aly(i) = ((LOG(e(i) / pa(7))) ^ 2) * pa(5) + LOG(e(i) / pa(7)) * pa(3) + pa(1)
    END IF
    IF e(i) > pa(8) THEN
      aly(i) = ((LOG(e(i) / pa(8))) ^ 2) * pa(6) + LOG(e(i) / pa(8)) * (pa(3) + 2 * pa(5) * LOG(pa(8) / pa(7))) + (pa(1) + pa(3) * LOG(pa(8) / pa(7)) + pa(5) * (LOG(pa(8) / pa(7))) ^ 2)
    END IF
  NEXT i

```

```

REM
REM   fim do calculo das eficiencias
REM
FOR i = 1 TO n
  aef(i, 1) = LOG(efi(i, 1))
NEXT i
REM
REM   delta1: (efic exper.)-(efic calc) = (aef-aly)
REM
FOR i = 1 TO n
  delta1(i, 1) = 0
NEXT i
FOR i = 1 TO n
  delta1(i, 1) = aef(i, 1) - aly(i)
NEXT i
REM
REM   determinando a transposta de delta1
REM
FOR i = 1 TO n
  deltat1(1, i) = 0
NEXT i
FOR i = 1 TO n
  deltat1(1, i) = delta1(i, 1)
NEXT i
REM
REM
REM  { determinando a matriz planejamento }
REM
FOR i = 1 TO n
  IF i <= ycali THEN
    dx(i, 1) = 0
  ELSE
    dx(i, 1) = 1
  END IF
NEXT i
REM
REM
FOR i = 1 TO n
  IF i <= ycali THEN
    dx(i, 2) = 1
  ELSE
    dx(i, 2) = 0
  END IF
NEXT i
REM
REM
FOR i = 1 TO n
  dx(i, 3) = LOG(e(i) / pa(7))
NEXT i
FOR i = 1 TO n
  IF e(i) <= pa(7) THEN
    dx(i, 4) = LOG(e(i) / pa(7)) ^ 2
  END IF
NEXT i
FOR i = 1 TO n
  IF e(i) <= pa(7) THEN
    dx(i, 7) = -(2 * pa(4) * LOG(e(i) / pa(7)) + pa(3)) / pa(7)
  END IF
  IF (e(i) > pa(7) AND e(i) <= pa(8)) THEN

```

```

dx(i, 7) = -(2 * pa(5) * LOG(e(i) / pa(7)) + pa(3)) / pa(7)
END IF
IF e(i) > pa(8) THEN
  dx(i, 7) = 0
END IF
NEXT i
FOR i = 1 TO n
  IF (e(i) > pa(7) AND e(i) <= pa(8)) THEN
    dx(i, 5) = LOG(e(i) / pa(7)) ^ 2
  END IF
NEXT i
FOR i = 1 TO n
  IF e(i) > pa(8) THEN
    dx(i, 6) = LOG(e(i) / pa(8)) ^ 2
  END IF
NEXT i
FOR i = 1 TO n
  IF e(i) > pa(8) THEN
    dx(i, 8) = -2 * (pa(6) / pa(8)) * LOG(e(i) / pa(8)) - (pa(2) + 2 * pa(5) * LOG(pa(8) / pa(7))) / pa(8)
  END IF
NEXT i
PRINT #3,
PRINT #3,
PRINT #3, "*****matrix"
planejamento*****"
FOR i = 1 TO n
  PRINT #3,
  FOR j = 1 TO c
    PRINT #3, USING " ##.####^##"; dx(i, j),
  NEXT j
NEXT i
PRINT #3,
PRINT #3,
PRINT #3, "*****transposta da matriz de"
planejamento*****"
FOR i = 1 TO c
  PRINT #3,
  FOR j = 1 TO n
    dxt(i, j) = dx(j, i)
    PRINT #3, USING " ##.####^##"; dxt(i, j),
  NEXT j
NEXT i
PRINT #3,
PRINT #3,
REM
REM { dro: produto de dxt por aci }
REM
FOR i = 1 TO c
  FOR w = 1 TO n
    dro(i, w) = 0
  NEXT w
NEXT i
REM
FOR i = 1 TO c
  FOR w = 1 TO n
    FOR j = 1 TO n
      dro(i, w) = dro(i, w) + dxt(i, j) * aci(j, w)
    NEXT j
  NEXT w

```

```

NEXT i
REM
REM { dro1: produto de dro por dx }
REM
FOR i = 1 TO c
  FOR w = 1 TO c
    dro1(i, w) = 0
  NEXT w
NEXT i
REM
FOR i = 1 TO c
  FOR w = 1 TO c
    FOR j = 1 TO n
      dro1(i, w) = dro1(i, w) + dro(i, j) * dx(j, w)
    NEXT j
  NEXT w
NEXT i
REM
REM { preparando a transformacao bilinear }
REM
FOR i = 1 TO c
  FOR j = 1 TO c
    IF i = j THEN at(i, j) = (1 / SQR(dro1(i, j)))
    IF i <> j THEN at(i, j) = 0
  NEXT j
NEXT i
REM
REM { dro2: produto de at por dro1 }
REM
FOR i = 1 TO c
  FOR w = 1 TO c
    dro2(i, w) = 0
  NEXT w
NEXT i
REM
FOR i = 1 TO c
  FOR w = 1 TO c
    FOR j = 1 TO c
      dro2(i, w) = dro2(i, w) + at(i, j) * dro1(j, w)
    NEXT j
  NEXT w
NEXT i
REM
REM { dro3: produto de dro2 por at }
REM
FOR i = 1 TO c
  FOR w = 1 TO c
    dro3(i, w) = 0
  NEXT w
NEXT i
REM
FOR i = 1 TO c
  FOR w = 1 TO c
    FOR j = 1 TO c
      dro3(i, w) = dro3(i, w) + dro2(i, j) * at(j, w)
    NEXT j
  NEXT w
NEXT i

```

```

REM
REM { Fim da Transformacao Bilinear }
REM
REM determinando lambdaI
REM
FOR i = 1 TO c
  FOR w = 1 TO c
    lambdai(i, j) = 0
  NEXT w
NEXT i
FOR i = 1 TO c
  FOR j = 1 TO c
    IF i = j THEN lambdai(i, j) = lambda
    IF i <> j THEN lambdai(i, j) = 0
  NEXT j
NEXT i
REM
REM
REM { dro10: soma das matrizes dro3 e lambdai }
REM
FOR i = 1 TO c
  FOR j = 1 TO c
    dro10(i, j) = 0
  NEXT j
NEXT i
FOR i = 1 TO c
  FOR j = 1 TO c
    dro10(i, j) = dro3(i, j) + lambdai(i, j)
  NEXT j
NEXT i
REM   fim da soma
REM
REM   imprimindo a soma
REM
PRINT #3, "soma de dro3 e lambdai"
FOR i = 1 TO c
  PRINT #3,
  FOR j = 1 TO c
    PRINT #3, USING "##.#####^###"; dro10(i, j),
  NEXT j
  PRINT #3,
  PRINT #3,
REM { invertendo a matriz dro10 }
REM
tn1 = c
tk3 = 0
FOR l = 1 TO c
  FOR jj = 1 TO c
    txxx = dro10(l, jj)
    tk3 = tk3 + 1
    ta(tk3) = txxx
    tb(jj, l) = txxx
  NEXT jj
  NEXT l
  GOSUB 295
  td1 = td
  PRINT #3,
  PRINT #3, "det.da matriz de covariancia dos parametros="; td1

```

```

PRINT #3,
IF td = 0 THEN STOP
FOR tj2 = 1 TO tn1
FOR l = 1 TO tn1
tn2 = 0
FOR tj1 = 1 TO tn1
FOR tl1 = 1 TO tn1
IF tj1 = tj2 THEN 280
IF tl1 = l THEN 280
tn2 = tn2 + 1
ta(tn2) = tb(tl1, tj1)
280 NEXT tl1: NEXT tj1
c = tn1 - 1
GOSUB 295
droi10(l, tj2) = (td / td1) * (-1) ^ (l + tj2)
NEXT l: NEXT tj2
PRINT #3, " MATRIZ INVERSA DE dro10 "
FOR jj = 1 TO tn1
PRINT #3,
FOR l = 1 TO jj
PRINT #3, USING " ##.####^###"; droi10(jj, l),
NEXT l
NEXT jj
PRINT #3,
PRINT #3,
GOTO 325
295 REM
td = 1: tj3 = -c
FOR jj = 1 TO c
tj4 = jj + 1: tj3 = tj3 + c + 1: tg1 = tj3 - jj
GOSUB 305
td = td * tb1 * (-1) ^ SGN((tg3 - jj)): IF td = 0 THEN RETURN
GOSUB 311
GOSUB 317
NEXT jj
RETURN
305 REM SUBROTIINA PARA PROCURA DO PIVO
tb1 = 0
FOR tkk = jj TO c: tg2 = tg1 + tkk
IF ABS(tb1) >= ABS(ta(tg2)) THEN 310
tb1 = ta(tg2): tg3 = tkk
310 NEXT tkk: RETURN
311 REM SUBROTIINA PARA DIVIDIR PELO PIVO E TROCAR DE LUGAR
tg4 = jj + c * (jj - 1): tg1 = tg3 - jj
FOR tkk = jj TO c: tg4 = tg4 + c: TG5 = tg4 + tg1
TS5 = ta(tg4): ta(tg4) = ta(TG5): ta(TG5) = TS5
ta(tg4) = ta(tg4) / tb1: NEXT tkk
RETURN
317 REM SUBROTIINA PARA ELIMINACAO DA VARIABEL
IF jj = c THEN RETURN
TP = c * (jj - 1)
FOR tx = tj4 TO c: tx2 = TP + tx: tg1 = jj - tx
FOR tx1 = tj4 TO c: tx3 = c * (tx1 - 1) + tx: tj5 = tx3 + tg1
ta(tx3) = ta(tx3) - ta(tx2) * ta(tj5)
NEXT tx1
NEXT tx: RETURN
325 c = c + 1
REM
REM { dro4: produto de at por droi10 }

```

```

REM
FOR i = 1 TO c
  FOR w = 1 TO c
    dro4(i, w) = 0
  NEXT w
NEXT i
REM
FOR i = 1 TO c
  FOR w = 1 TO c
    FOR j = 1 TO c
      dro4(i, w) = dro4(i, w) + at(i, j) * droi10(j, w)
    NEXT j
  NEXT w
NEXT i
REM
REM { dro5: produto de dro4 por at }
REM
FOR i = 1 TO c
  FOR w = 1 TO c
    dro5(i, w) = 0
  NEXT w
NEXT i
REM
FOR i = 1 TO c
  FOR w = 1 TO c
    FOR j = 1 TO c
      dro5(i, w) = dro5(i, w) + dro4(i, j) * at(j, w)
    NEXT j
  NEXT w
NEXT i
REM
PRINT #3, "*****Matriz de Covariancia dos Parametros com lambda*****"
FOR i = 1 TO c
  PRINT #3,
  FOR j = 1 TO i
    PRINT #3, USING " ##.#####^##"; dro5(i, j);
  NEXT j
NEXT i
PRINT #3,
PRINT #3,
REM
REM { invertendo a matriz dro3 }
REM
tn1 = c
tk3 = 0
FOR l = 1 TO c
  FOR jj = 1 TO c
    txxx = dro3(l, jj)
    tk3 = tk3 + 1
    ta(tk3) = txxx
    tb(jj, l) = txxx
  NEXT jj
NEXT l
GOSUB 295
td1 = td
PRINT #3,
PRINT #3, "det.da matriz de covariancia dos parametros="; td1
PRINT #3,
IF td = 0 THEN STOP

```

```

FOR tj2 = 1 TO tn1
FOR l = 1 TO tn1
tn2 = 0
FOR tj1 = 1 TO tn1
FOR tl1 = 1 TO tn1
IF tj1 = tj2 THEN 1280
IF tl1 = l THEN 1280
tn2 = tn2 + 1
ta(tn2) = tb(tl1, tj1)
1280 NEXT tl1: NEXT tj1
c = tn1 - 1
GOSUB 1295
droi3(l, tj2) = (td / td1) * (-1) ^ (l + tj2)
NEXT l: NEXT tj2
PRINT #3, " Inversa de dro3 "
FOR jj = 1 TO tn1
PRINT #3,
FOR l = 1 TO jj
PRINT #3, USING " ##.####^###"; droi3(jj, l),
NEXT l
NEXT jj
PRINT #3,
PRINT #3,
GOTO 1325
1295 REM
td = l; tj3 = -c
FOR jj = 1 TO c
tj4 = jj + 1; tj3 = tj3 + c + 1; tg1 = tj3 - jj
GOSUB 1305
td = td * tb1 * (-1) ^ SGN((tg3 - jj)); IF td = 0 THEN RETURN
GOSUB 1311
GOSUB 1317
NEXT jj
RETURN
1305 REM SUBROTINA PARA PROCURA DO PIVO
tb1 = 0
FOR tkk = jj TO c: tg2 = tg1 + tkk
IF ABS(tb1) >= ABS(ta(tg2)) THEN 1310
tb1 = ta(tg2); tg3 = tkk
1310 NEXT tkk: RETURN
1311 REM SUBROTINA PARA DIVIDIR PELO PIVO E TROCAR DE LUGAR
tg4 = jj + c * (jj - 1); tg1 = tg3 - jj
FOR tkk = jj TO c: tg4 = tg4 + c; TG5 = tg4 + tg1
TS5 = ta(tg4); ta(tg4) = ta(TG5); ta(TG5) = TS5
ta(tg4) = ta(tg4) / tb1: NEXT tkk
RETURN
1317 REM SUBROTINA PARA ELIMINACAO DA VARIABEL
IF jj = c THEN RETURN
TP = c * (jj - 1)
FOR tx = tj4 TO c: tx2 = TP + tx: tg1 = jj - tx
FOR tx1 = tj4 TO c: tx3 = c * (tx1 - 1) + tx: tg5 = tx3 + tg1
ta(tx3) = ta(tx3) - ta(tx2) * ta(tg5)
NEXT tx1
NEXT tx: RETURN
1325 c = c + 1
REM
REM { dro4: produto de at por droi3 }
REM
FOR i = 1 TO c

```

```

FOR w = 1 TO c
  dro44(i, w) = 0
NEXT w
NEXT i
REM
FOR i = 1 TO c
  FOR w = 1 TO c
    FOR j = 1 TO c
      dro44(i, w) = dro44(i, w) + at(i, j) * droi3(j, w)
    NEXT j
  NEXT w
NEXT i
REM
REM { dro55: produto de dro44 por at }
REM
FOR i = 1 TO c
  FOR w = 1 TO c
    dro55(i, w) = 0
  NEXT w
NEXT i
REM
FOR i = 1 TO c
  FOR w = 1 TO c
    FOR j = 1 TO c
      dro55(i, w) = dro55(i, w) + dro44(i, j) * at(j, w)
    NEXT j
  NEXT w
NEXT i
REM
PRINT #3, "*****Matriz de Covariancia dos Parametros*****"
FOR i = 1 TO c
  PRINT #3,
  FOR j = 1 TO i
    PRINT #3, USING " ##.#####^##"; dro55(i, j);
  NEXT j
NEXT i
PRINT #3,
PRINT #3,
REM
REM dando inicio ao calculo do qui quadrado
REM
REM
FOR i = 1 TO n
  des(i, 1) = 0
NEXT i
FOR i = 1 TO n
  des(i, 1) = (efi(i, 1) - EXP(al(y(i))))^2
NEXT i
PRINT #3, " energias eficiencias erros efic. exper. resid."
PRINT #3,
FOR j = 1 TO n
  PRINT #3, USING " ##.#####^##"; e(j), EXP(al(y(j))), SQR(eee(j)), efi(j, 1), des(j, 1)
NEXT j
PRINT #3,
qui(nhist) = 0
FOR i = 1 TO n
  qui(nhist) = qui(nhist) + (des(i, 1))^2 / (err(i) * efi(i, 1))^2
NEXT i

```

```

PRINT #3, "qui quadrado reduzido"
PRINT #3,
PRINT #3, USING " ##.#####^###"; qui(nhist) / (n - c)
PRINT #3,
IF ABS(qui(nhist) - qui(nhist - 1)) <= .001 THEN GOTO 1010
REM
REM
REM dando inicio ao calculo dos acrescimos
REM
REM { dro66:produto da matriz dro55 por dxt }
REM
FOR i = 1 TO c
  FOR w = 1 TO n
    dro66(i, w) = 0
    NEXT w
  NEXT i
REM produto
FOR i = 1 TO c
  FOR w = 1 TO n
    FOR j = 1 TO c
      dro66(i, w) = dro66(i, w) + dro55(i, j) * dxt(j, w)
    NEXT j
    NEXT w
  NEXT i
REM
REM fim do produto
REM
REM { dro77: produto de dro66 por aci }
REM
FOR i = 1 TO c
  FOR w = 1 TO n
    dro77(i, w) = 0
    NEXT w
  NEXT i
REM produto
FOR i = 1 TO c
  FOR w = 1 TO n
    FOR j = 1 TO n
      dro77(i, w) = dro77(i, w) + dro66(i, j) * aci(j, w)
    NEXT j
    NEXT w
  NEXT i
REM
REM { acrescimos: produto de dro77 por delta1 }
REM
FOR i = 1 TO c
  w = 1
  acres(i, 1) = 0
NEXT i
FOR i = 1 TO c
  FOR j = 1 TO n
    acres(i, 1) = acres(i, 1) + dro77(i, j) * delta1(j, 1)
  NEXT j
NEXT i
REM fim do calculo para determinar os acrescimos
PRINT #3, "acrescimos"
PRINT #3,
REM
FOR i = 1 TO c

```

```

PRINT #3, "acrescimo("; i; ")="; USING " ##.#####^###"; acres(i, 1)
NEXT i
PRINT #3,
PRINT #3,
FOR i = 1 TO c
  cimo(i, nhist) = acres(i, 1)
NEXT i
REM
REM
REM    calculando os erros nas eficiencias calculadas
REM
REM    calculando o produto entre as matrizes dx por dro55
REM
FOR i = 1 TO n
  FOR w = 1 TO c
    ee(i, w) = 0
  NEXT w
NEXT i
FOR i = 1 TO n
  FOR w = 1 TO c
    FOR j = 1 TO c
      ee(i, w) = ee(i, w) + dx(i, j) * dro55(j, w)
    NEXT j
  NEXT w
NEXT i
REM
REM    calculando oproduto "especial" das matrizes ee por dxt
REM
FOR i = 1 TO n
  eee(i) = 0
NEXT i
FOR i = 1 TO n
  FOR w = 1 TO c
    eee(i) = eee(i) + ee(i, w) * dxt(w, i)
  NEXT w
NEXT i
PRINT #3, "erros nas eficiencias calculadas"
PRINT #3,
FOR j = 1 TO n
  PRINT #3, USING "##.#####^###"; SQR(eee(j))
NEXT j
PRINT #3,
PRINT #3,
REM
REM    determinando novos parametros
REM
IF nhist = 1 THEN
  FOR i = 1 TO c
    pa(i) = pa(i) + cimo(i, nhist)
  NEXT i
  PRINT #3, "parametros apos a primeira iteracao"
  PRINT #3,
  FOR i = 1 TO c
    PRINT #3, USING "##.#####^###"; pa(i)
  NEXT i
  GOTO 369
ELSE
  xt = 0
  xt = (qui(nhist - 1) - qui(nhist)) / (n - c)

```

```

PRINT #3, "diferenca entre os qui quadrados"
PRINT #3,
PRINT #3, xt
PRINT #3,
IF xt >= 0 THEN
    lambda = lambda / 10
    PRINT #3, "lambda"; lambda
    PRINT #3,
    PRINT #3, "qui quadrado anterior maior que o atual"
    PRINT #3,
    PRINT #3, "parametros atuais"
    PRINT #3,
    FOR i = 1 TO c
        pa(i) = pa(i) + cimo(i, nhist)
        PRINT #3, USING "##.#####^###"; pa(i)
    NEXT i
    PRINT #3,
ELSE
    PRINT #3, " o qui quadrado esta subindo"
    PRINT #3,
    lambda = lambda * 10
    PRINT #3, "lambda"; lambda
    PRINT #3,
    FOR i = 1 TO c
        pa(i) = pa(i) - cimo(i, nhist - 1)
    NEXT i
    PRINT #3, " parametros atuais"
    PRINT #3,
    FOR i = 1 TO c
        PRINT #3, "parametro("; i, ")="; USING " ##.#####^### "; pa(i)
    NEXT i
END IF
END IF
PRINT #3,
PRINT #3,
FOR i = 1 TO c
    acres(i, 1) = 0
NEXT i
369    NEXT nhist
1010   CLOSE 3
STOP

```

7 Referências Bibliográficas

1. KNOLL, G.F. **Radiation Detection and Measurement**. 2nd Edition, John Wiley & Sons, (1989).
2. SEYMOUR, R.S; ANDREACOM, M.S; PIERCE, J. Evaluation of energy efficiency fitting functions for HPGe detectors. **Journ. of Radioan. and Nucl. Chemistry**, Vol. 123, No. 2, p.529, (1988).
3. ZIJP, W.L.; POOLE, A. N.; NOTHENIUS, H.J.; DEBERTIN, K. International comparison of Interpolation Procedures for the Efficiency of Germanium Gamma-ray Spectrometers. 5th ASTM EURATOM Symposium on Reactor Dosimetry, Geesthacht, F.R. Germany, Sept. 24-28, (1984).
4. VENTURINI, L; VANIN, V.R. HPGe. Detector Efficiency Calibration for Extended Sources in the 50-1400 kev Energy Range. **Appl. Radiat. Isot.**, Vol.44. No. 7, p. 999, (1993).
5. GERALDO, L.P.; SMITH, D.L. Covariance analysis and fitting of germanium gamma-ray detector efficiency calibration data. **Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res.** A290, 499, (1990).
6. WINKLER ,G. On the Role of Covariances for Uncertainty Estimates in Radioactivity Measurements. **Appl. Radiat. Isot.** Vol. 49, No.9-11, p.1153, (1998).
7. MANNHART, W. A small guide to generating covariances of experimental data. **Report PTB-FMRB-84**, (1983).
8. DIAS, M. S.; RENNER, C. Si(Li) Efficiency Curve for X-Ray Parallel Beam. **Nucl. Instrum. and Methods**, Vol. 193:91, (1982).
9. KOSKINAS, M.F.; DIAS, M. S. Coincidence System for Radionuclide Standardization using Surface Barrier Detectors. **Nuclear Instrum. and Methods in Phys. Research**, A280:327-331, (1989).
10. KOSKINAS, M.F.; DIAS, M. S. Measurement of the Gamma-Ray Probability per Decay of ^{31}Si . **Applied Radiat. Isot.** 44, 1209-1211 (1993).
11. DIAS, M. S; KOSKINAS, M.F. Activity determination of ^{75}Se Radioactive Solution by Absolute Method. **Phys. Med. Biol.** 39a, 798 (1994).
12. DIAS, M.S; KOSKINAS, M F. Accidental Summing Correction in ^{125}I Activity Determination by the Sum-Peak Method. **Applied Radiat. Isot.** 46(9), 945-948 (1995).

13. FONSECA, K. A; KOSKINAS ,M. F. E DIAS, M. S. Covariance methodology applied to uncertainties in ^{126}I disintegration rate measurements. *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. A* 369, 437-440 (1996).
14. FONSECA, K.A. **Absolute measurements of the activity and gamma-ray probability per decay of I-126.** Dissertação de Mestrado, IPEN/Universidade de São Paulo, (1997).
15. ATTIE, M.R.P., KOSKINAS, M.F. DIAS, M.S. AND FONSECA, K.A. Disintegration rate measurements of Ga-67.. *Applied Radiat. Isot.*, (1998) .
16. FONSECA, K.A., KOSKINAS, M.F. AND DIAS, M.S. Measurement of the gamma-ray probability per decay of I-126. *Applied Radiat. Isot.* , (1998).
17. RATEL, G. Activity concentration of a solution of ^{133}Ba : results on an international comparison. *Nucl. Instrum. and Methods in Phys. Research - A* 316, 318 (1992).
18. RATEL, G. International comparison of activity measurements of a solution of ^{109}Cd ., *Nucl. Instrum. and Methods in Phys. Research - A* 345, 289 (1994).
19. RATEL, G. Activity concentration of a solution of ^{125}I : results on an international comparison. *Nucl. Instrum. and Methods in Phys. Research - A* 366, 183 (1995).
20. RATEL, G. Measurement of the activity concentration of a solution of ^{75}Se . *Nucl. Instrum. and Methods in Phys. Research - A* 339, 408 (1994).
21. Bevington, P.R.; Robinson, D.K. **Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences** , 2nd Edition, McGraw-Hill (1992).
22. DIAS M.S. Programas de Ajuste Polinomial LINFIT e LOGFIT. Laboratório de Metrologia Nuclear, IPEN-CNEN/SP, **Relatório Interno** (1999).
23. KOKTA, L. Determination of Peak Area. *Nucl.Instrum. Methods*,112.p.245 – 251, 1973.
24. DIAS, M.S. Programa Alpino for Versão 1.0. **Manual do Usuário**, 29/01/2001
25. SMITH, D.L. Covariance Matrices and Applications to the Field of Nuclear Data. Idaho Falls, Argone National Lab. 1981(ANL/NPM – 62)
26. GERALDO, L.P. Least Square Methods and Covariance Matrix Applied to the Relative Efficiency Calibration of a Ge(Li) Detector. São Paulo: 1989 (**IPEN – Pub 243**).
27. TAKEDA, M.N. **Determinação da Correção para Efeito Soma em Cascata para Espectrômetro de HPGe pelo Método de Monte Carlo.** Dissertação de Mestrado, IPEN/Universidade de São Paulo,2001.
28. EVANS,R. **The Atomic Nucleus.** New York, McGraw-Hill,1955.

29. **NUCLEAR DATA TABLES.** section A, v.7, 1969/1970.
30. IAEA. **X-Ray and Gama ray Standards for Detector Calibration.** Vienna, 1991(IAEA-TEC-DOC-619)
31. **Programa MCNP**, Los Alamos National Laboratory, Tuesday, 16-Oct-2001
32. **Programa Geant 4**, <http://www.info.cern.ch/geant4>, 2002
33. TRAMONTANO, R.; VANIN, V. R. Mixing activity – calibrated and uncalibrated gamma – ray sources in efficiency calibration. **Appl. Radioat. Iso.**, Vol.51, pg 323 (1999).
34. BUSSAB, W.O.; MORETTIN, P. A. **Estatística Básica.** 5º edição, Saraiva (2002).
35. CASHELL, E. D., EVERETT, C. J.A. **Practical Manual on the Monte Carlo Method for Random walk problems.** New York, Pergamon, (1959)
36. DIAS, M. S. Comunicação Pessoal, 2001
37. CLÁUDIO, D.M.; MARINS, J. M. **Cálculo Numérico Computacional.** 3^ª edição, Atlas 2000
38. VANIN, V. R. , GOUFFON, P. **Tópicos Avançados em Tratamento Estatístico de Dados em Física Experimental.** , LAL-IFUSP,1996(Edição preliminar).
39. DIAS,M.S.; TAKEDA, M.N.; KOSKINAS, M.F. Cascade summing corrections for HPGe spectrometers by the Monte Carlo method. **Appl. Radioat. Iso.**, Vol.56, pgs 105-109 (2002).
40. MANNHART, W. Comunicação pessoal,1990.
41. SIMÕES, D.; KOSKINAS, M.F.; DIAS,M.S. Measurement of the gamma-ray probability per decay of ^{42}K . **Appl. Radioat. Iso.**, Vol.54, pgs 443-446 (2001).



M22580



Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares
Diretoria de Ensino & Informação Científica e Tecnológica
Av. Prof. Lineu Prestes, 2242 Cidade Universitária CEP: 05508-000
Fone/Fax(0XX11) 3816 - 9148
SÃO PAULO - São Paulo - Brasil
<http://www.ipen.br>

O Ipen é uma autarquia vinculada à Secretaria de Ciência, Tecnologia e Desenvolvimento Econômico do Estado de São Paulo, gerida técnica, administrativa e financeiramente pela Comissão Nacional de Energia Nuclear, orgão do Ministério da Ciência e Tecnologia, e associada à Universidade de São Paulo.