INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES
SECRETARIA DA INDÚSTRIA, COMÉRCIO, CIÊNCIA E TECNOLOGIA
AUTARQUIA ASSOCIADA À UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

SIMULAÇÃO DO ESPECTRO DE DEPOSIÇÃO DE ENERGIA DE RAIOS GAMA EM DETETORES DE NaI UTILIZANDO O MÉTODO DE MONTE CARLO

Wilson José Vieira

Dissertação apresentada ao Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares como parte dos requisitos para obtenção do Grau de "Mestre na Área de Concentração em Reatores Nucleares de Potência e Tecnologia do Combustível Nuclear".

Orientador: Dr. José Rubens Maiorino

São Paulo
1982

INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES
SECRETARIA DA INDÚSTRIA, COMÉRCIO, CIÊNCIA E TECNOLOGIA
AUTARQUIA ASSOCIADA À UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

SIMULAÇÃO DO ESPECTRO DE DEPOSIÇÃO DE ENERGIA DE RAIOS GAMA EM DETETORES DE NaI UTILIZANDO O MÉTODO DE MONTE CARLO

Wilson José Vieira

Dissertação apresentada ao Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares como parte dos requisitos para obtenção do Grau de "Mestre na Área de Concentração em Reatores Nucleares de Potência e Tecnologia do Combustível Nuclear".

Orientador: Dr. José Rubens Maiorino

SÃO PAULO
1982

AOS MEUS PAIS

AGRADECIMENTOS

Agradeço as pessoas e instituições que, direta ou indiretamente, colaboraram na execução deste trabalho.

Em particular agradeço:

- Prof.Dr. José Rubens Maiorino, pela segura orientação,
- Colegas do Centro de Engenharia Nuclear, pelo apoio prestado,
- Corpo de professores do IPEN, pela importante contribuição a minha formação,
- Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, pelo apoio material e de pessoal,
- Comissão Nacional de Energia Nuclear, pelo suporte financeiro.

ÍNDICE

SIMULAÇÃO DO ESPECTRO DE DEPOSIÇÃO DE ENERGIA DE RAIOS GAMA EM DETETORES DE NaI UTILIZANDO O MÉTODO DE MONTE CARLO

WILSON JOSÉ VIEIRA

RESUMO

Neste trabalho, visando o conhecimento e a aplicação prática do método de Monte Carlo, desenvolveu-se um programa de computador para o cálculo de eficiências e o levantamento do espectro de deposição de energia para raios gama em detetores de NaI .

Inicialmente faz-se uma revisão dos trabalhos publicados na literatura e considerações teóricas sobre detetores de NaI e os métodos de Monte Carlo. Uma descrição detalhada dos métodos aqui utilizados é fornecida.

Os resultados obtidos são comparados com resultados calculados e experimentais publicados na literatura.

GAMMA RAY ENERGY LOSS SPECTRA SIMULATION IN NaI DETECTORS WITH THE MONTE CARLO METHOD

WILSON JOSÉ VIEIRA

A B S T R A C T

In this work, with the aim of studying and applying the Monte Carlo method, a computer code was developed to calculate the pulse height spectra and detector efficiencies for gamma rays incident on NaI (Tℓ) crystals.

The basic detection processes in NaI (Tℓ) detectors are given together with an outline of Monte Carlo methods and a general review of relevant published works. A detailed description of the application of Monte Carlo methods to γ - ray detection in NaI (Tℓ) detectors is given.

Comparisons are made with published, calculated and experimental, data.

1. INTRODUÇÃO

1-1. HISTÓRICO

O detetor de cintilação é um instrumento bastante versátil e de grande aplicação na física moderna. Em sua forma original, onde as cintilações eram observadas visualmente com o auxílio de microscópios, foram feitas descobertas tais como o núcleo atômico, observando a deflexão de partículas que incidiam sobre alvos-finos e, a identificação de partículas alfa. Utilizando a fotomultiplicadora, novos materiais cintiladores e os descobrimentos da física moderna, desenvolveram-se novas técnicas experimentais utilizando o detetor de cintilação, tais como: tempos de resolução da ordem de mili-micro segundos, espectrometria gama e beta com atividades da ordem de mili-microcuries, deteção eficiente de raios gama, raios X e neutrons, espectrometria de partículas pesadas, observação do tempo de vida de mésons, pósitrons e isômeros nucleares etc. Também o detetor de cintilação readquiriu o lugar abdicado por seu ancestral, como um dos instrumentos mais importantes utilizados na pesquisa em física nuclear /30/.

Medidas de detecção da radiação nuclear são necessárias em toda a ciência e tecnologia nucleares, por isso novos métodos e equipamentos estão continuamente sendo desenvolvidos. É importante notar que a precisão das medidas nucleares garantem a confiabilidade dos inúmeros trabalhos que são feitos com base nestes dados, como por exemplo os trabalhos em neutrônica.

Para a utilização de detetores de cintilação de NaI em espectrometria gama, tem-se levantado espectros experimentais para fontes usuais como referência /7,14/. Embora exista um número considerável de dados experimentais, cálculos teóricos são importantes para auxiliar na montagem de sistemas de deteção experimentais, para análise de espectros complexos, e para suplementação de dados em regiões de energia onde não e-xistam fontes monoenergéticas.

Existem vários trabalhos na literatura que utilizam procedimentos computacionais para o levantamento do espectro de deposição de energia e para o cálculo de eficiências de deteção para fótons incidindo sobre cintiladores. Estes trabalhos utilizam o método de Monte Carlo e comumente são empregados para evitar o procedimento experimental, ou auxiliar na interpretação dos resultados experimentais.

1-2. OBJETIVO

O problema da determinação da resposta de um detetor de cintilação para raios gama é basicamente a descrição do transporte desta radiação através do detetor. O raio gama proveniente de uma fonte entra no detetor, difunde-se através dele e, ou é absorvido no detetor ou escapa deste através de uma de suas superfícies. Para a determinação da resposta do detetor é necessário calcular a energia total depositada no cristal, e portanto não deve ser levada em consideração apenas a radiação primária (fonte), mas também a deposição de energia devido as radiações secundárias, as quais são criadas direta ou indiretamente pela interação da radiação primária dentro do detetor, como por exemplo os fótons espalhados, os fótons provenientes da reação de aniquilamento, radiação de freamento etc.

Descrever esse processo através da solução da equação de transporte, ou mais corretamente, das equações de transporte acopladas (desde que as radiações secundárias estão incluídas) utilizando técnicas numéricas convencionais é ainda economicamente impraticável nos computadores digitais, e desta forma a única maneira prática de se obter uma solução para este complicado problema de transporte é com a utilização de Métodos de Monte Carlo.

O método de Monte Carlo é a simulação de um problema físico, ou matemático, através da técnica da amostragem estatística. Em resumo, este consiste na amostragem aleatória de eventos distribuídos de acordo com uma distribuição de probabilidades, a qual usualmente representa uma situação física e, através de técnicas estatísticas convenientes, estima-se as respostas requeridas /21/.

Neste trabalho são utilizadas várias técnicas de Monte Carlo, tais como: a técnica da rejeição, a amostragem por importância, a técnica da roleta russa etc, para o cálculo de eficiências e o espectro de deposição de energia em cristais de NaI , devido a fontes de raios gama com energias discretas. Este trabalho oferece uma grande versatilidade quanto aos tipos de fontes, podendo ser utilizadas fontes tipo disco paralelo com raio maior ou menor que o raio de detetor, fontes tipo feixe paralelo com qualquer diâmetro do feixe e fontes puntuais localizadas em qualquer ponto do hemisfério superior da base do detetor. Fontes que possuem várias energias discretas e também com diferentes intensidades das linhas, também podem ser utilizadas (vide Apêndice C).

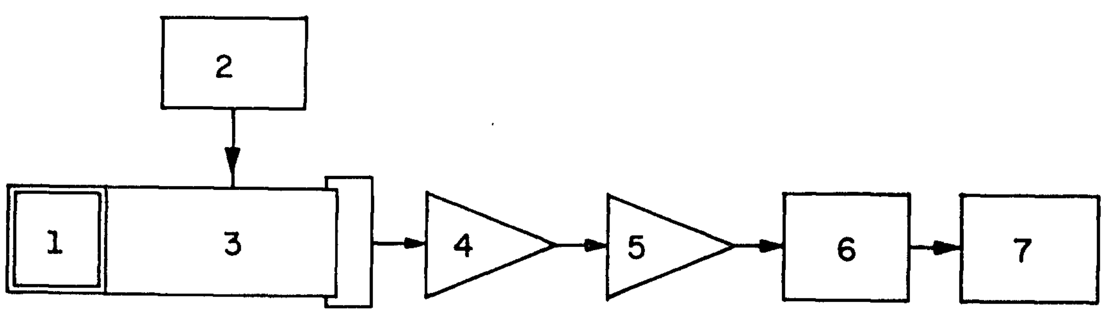
Uma descrição dos princípios físicos do detetor de NaI , bem como as características dos sistemas de deteção são dadas no Capítulo 2, juntamente com as condições teóricas para interpretação dos espectros. No Capítulo 3 apresenta-se uma revisão de alguns dos principais trabalhos publicados na literatura enfatizando as características principais de cada um. No Capítulo 4 faz-se uma introdução ao método de Monte Carlo e uma revisão teórica de algumas das técnicas comumente utilizadas. No Capítulo 5 ilustra-se detalhadamente os processos de cálculo utilizados neste trabalho, para o cálculo de eficiências e para o levantamento de espectros. Os resultados obtidos e comparações com os resultados publicados na literatura são fornecidos no Capítulo 6.

Também são fornecidos vários Apêndices onde são discutidos tópicos específicos como o alargamento do espectro (Apêndice A) e a amostragem da fórmula de Klein-Nishina (Apêndice B). A descrição e a listagem do programa de computador desenvolvido, são apresentadas nos Apêndices C e E respectivamente. No Apêndice D estão ilustrados alguns problemas amostra.

2. DETETORES DE NaI E ESPECTROS

Alguns materiais, quando excitados por uma radiação ionizante, reemitem parte da energia absorvida na forma de luz com pequena duração, ou cintilação. Este fenômeno é chamado luminescência, sendo que esta luz pode ser convertida em um pulso de corrente mensurável utilizando materiais fotosensíveis e amplificadores eletrônicos, que fornecerão uma resposta proporcional a energia depositada no material pela radiação ionizante.

Os componentes básicos de um contador de cintilação são mostrados esquematicamente na Figura 2-1. O cristal (1) está montado no topo de uma fotomultiplicadora (3), que é operada por uma fonte de alta voltagem (2) (AV) regulável. Os pulsos elétricos provenientes da fotomultiplicadora são amplificados e passam por um contador, no caso de uma contagem bruta, ou por um analizador de altura de pulso, para medir energias depositadas. A altura do pulso dada pela voltagem de saída é proporcional a energia depositada pela radiação dentro do cristal.



1. Cristal de NaI (Tℓ)
2. Fonte de alta voltagem
3. Fotomultiplicadora
4. Pré-amplificador
5. Amplificador linear
6. Analizador de altura de pulso
7. Contador

Figura 2-1. Esquema simplificado de um contador de cintilação.

Denomina-se como um detetor de cintilação, a combinação do cristal mais a fotomultiplicadora. A montagem de um detetor de cintilação, mais uma fonte de alta voltagem, mais um amplificador, e mais um contador denomina-se um contador de cintilação. Se o sistema inclui um analizador de altura de pulso e portanto é capaz de fazer medidas de energia, é então chamado um espectrômetro.

Apenas uma parte da energia depositada no cristal é convertida em luz, o resto transforma-se em calor. A fração de energia absorvida que é emitida como luz é chamada eficiência luminosa. A emissão de luz decai exponencialmente com uma constante de decaimento relacionada com a vida média de um estado excitado no cristal. É importante notar que o iodeto de sódio é utilizado para detecção de raios gama devido a sua alta densidade (3.67 g/cm^3), isto se deve principalmente devido a presença do iodo (elemento de alto número atômico).

Cristais de iodeto de sódio usados como cintiladores contém tálio (0,1% mol por mol), sendo a luminescência do cristal devido a presença do tálio. O NaI (Tℓ) tem alta eficiência luminosa, maior que a de qualquer outro cintilador sólido, porém seu tempo de decaimento é grande (0,3 μseg) comparado com cintiladores orgânicos ou plásticos. Este cristal é bastante higroscópico, e portanto deve ser selado em uma cápsula metálica com uma janela de pyrex ou quartzo transparentes, para permitir a passagem da luz para a fotomultiplicadora. O cristal é opticamente selado na janela através de um meio viscoso transparente tal como o óleo de silicone de alta viscosidade, ou geléia de petróleo. O mesmo material é usado para acoplar opticamente a janela com a fotomultiplicadora. Este acoplamento óptico previne a perda de luz nas interfaces. A parte superior e os lados do cristal são cobertos com uma camada de MgO ou $A\ell_2O_3$, que são refletores difusos e eficientes.

O cristal de NaI (Tℓ) é fabricado geralmente na forma de um cilindro circular reto. Cilindros de NaI montados como descrito acima estão disponíveis comercialmente em vários tamanhos, sendo os mais comuns com as dimensões: 3"×3", 4"×4", e 2"×2".

Um detetor ideal para espectrometria seria aquele que produzisse apenas uma resposta proporcional a energia da fonte. Tal fato só seria possível se toda a energia do fóton primário fosse depositada dentro do detetor. Na prática apenas uma fração dos raios gama são totalmente absorvidos, sendo que parte de suas energias iniciais escapam do detetor na forma de fótons de menor energia. Portanto a interpretação do espectro requer o conhecimento das interações dos raios gama com a matéria.

As principais interações de raios gama com a matéria são: o efeito fotoelétrico, o efeito Compton e o efeito de formação de pares. Estas interações produzem elétrons energéticos que perdem energia dentro do cristal dando origem às cintilações. Desta forma a energia absorvida no detetor devido a um fóton proveniente da fonte será igual a diferença entre a energia inicial do fóton primário e as energias das radiações secundárias que escapam do cristal.

É interessante notar que a resposta de um cintilador para fótons monoenergéticos não é única, mesmo no caso de um detetor hipotético completamente absorvedor. Esta condição de não unicidade, que é o resultado de incertezas na intensidade da luz produzida, da transmissão da luz para a fotomultiplicadora e na conversão da luz em pulsos elétricos pela fotomultiplicadora, fazem com que as contagens para uma energia discreta sejam distribuídas sobre uma faixa de canais vizinhos /7/. Este espalhamento pode ser aproximado por uma dependência gaussiana (ver Apêndice A).

Um espectro típico levantado com um espectrômetro de NaI (Tℓ) está representado na Figura 2-2. O eixo vertical representa o número de fótons que depositaram a quantidade de energia correspondente a um dado canal, representado no eixo horizontal, onde, a cada canal está associado um pequeno intervalo de energia (ΔE). O pico "0.662 MeV", é chamado fotopico, representando a energia do raio gama emitida pelo radioisótopo. Contagens no fotopico significam que toda a energia do raio gama da fonte foi absorvida dentro do cristal, ou por uma única interação pelo efeito fotoelétrico, ou por um ou mais espalhamentos Compton seguidos da absorção pelo efeito fotoelétrico, ou através do efeito de formação de pares seguido da absorção total dos fótons de aniquilamento do pósitron.

Associada com o fotopico está a distribuição Compton contínua, representando eventos nos quais o fóton espalhado tenha escapado do cristal. A distribuição Compton termina na borda Compton, que representa a energia máxima que um raio gama da fonte pode perder em uma única interação Compton, sendo esta separada do fotopico por um vale profundo.

A cauda da distribuição Compton que se estende para o fotopico, é produzida por espalhamentos Compton múltiplos seguidos da fuga do fóton secundário. Experimentalmente, existe também contribuições devido a coincidências randômicas (raios gama de diferentes desintegrações, mas quase instantâneas, fazendo com que seus pulsos se somem).

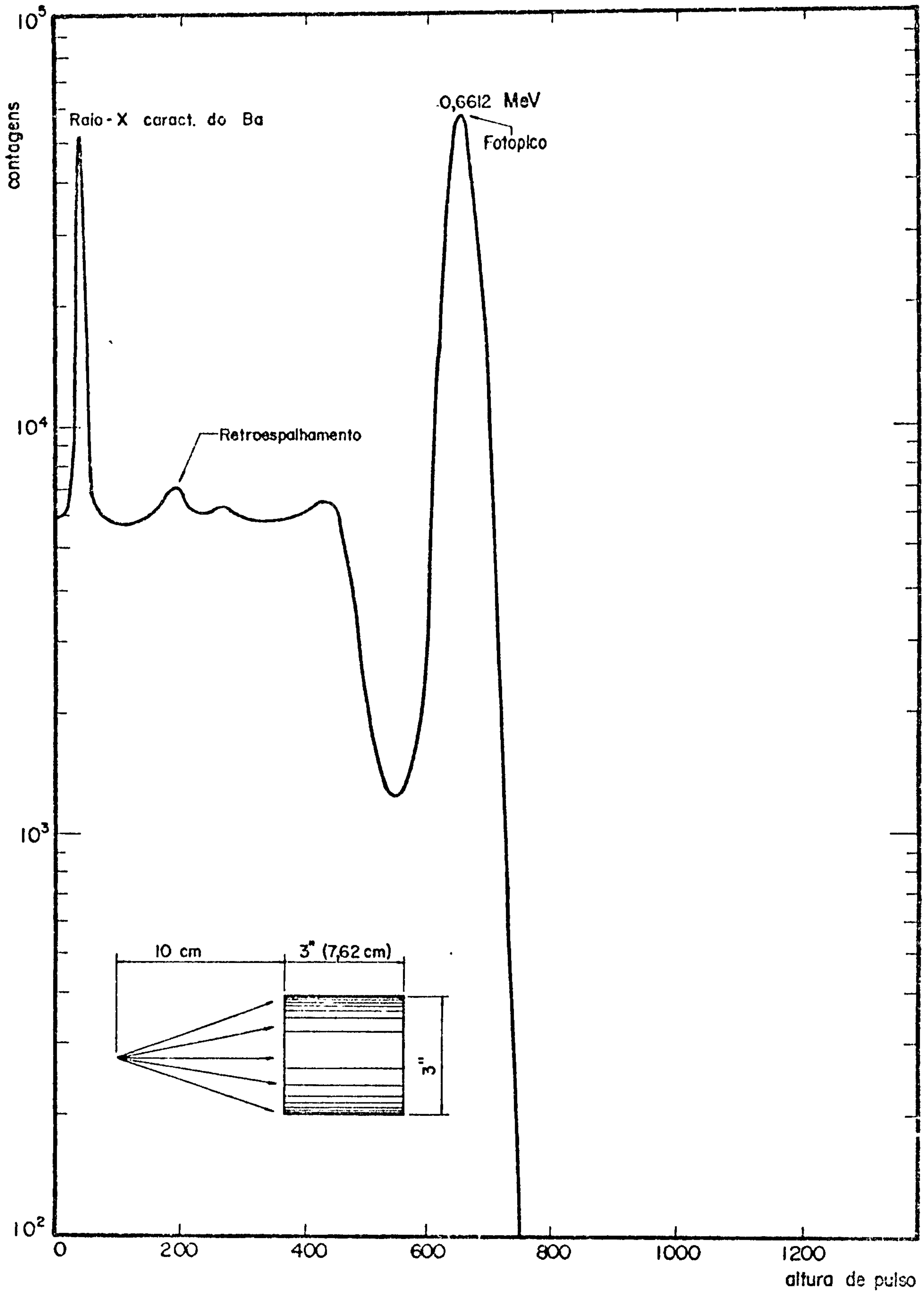


Figura 2-2. Espectro experimental para o ^{137}Cs, 3"×3" (10 cm), levantado por Heath /14/.

Nos trabalhos experimentais existe uma distribuição de pulsos superposta na distribuição Compton resultante de raios gama não provenientes da fonte, ou seja, raios gama que são espalhados nos materiais adjacentes antes de atingir o cristal. Entretanto, os efeitos da radiação de fundo são geralmente observados apenas nas regiões de pequeno número de contagens e na região de baixa energia. Pode-se notar na Figura 2-2, a presença do pico de retroespalhamento, e um maior número de contagens na região de baixa energia devido aos efeitos da radiação de fundo.

Para energias maiores que 1.02 MeV podem aparecer os picos de escape nos canais de energia $E\gamma - m_0c^2$ e $E\gamma - 2m_0c^2$, onde $m_0c^2 = 0.511$ MeV . Na Figura 2-3, o pico em 1.63 MeV é produzido pelo escape de um dos dois fótons de aniquilamento, o pico em 1.12 MeV é produzido pelo escape de ambos os fótons de aniquilamento. Os picos de escape estão superpostos na distribuição Compton e são mais proeminentes em cristais pequenos devido a maior probabilidade de fuga dos fótons de aniquilamento.

É interessante notar que, para fótons primários de baixa energia, é observável o pico de escape do raio-X característico do iodo (0.028 MeV) originário do efeito fotoelétrico. Entretanto, para energias maiores que 0.15 MeV , a probabilidade de escape do raio-X diminui e também este pico de escape desaparece no fotopico devido a resolução do sistema (ver Apêndice A). Neste trabalho não é considerada a produção do raio-X característico do iodo, desta maneira, não deve ser utilizado para fontes com energias menores que 0.15 MeV .

Existem outros fatores que causam distorções no espectro de deposição de energia de um cintilador. Por exemplo a

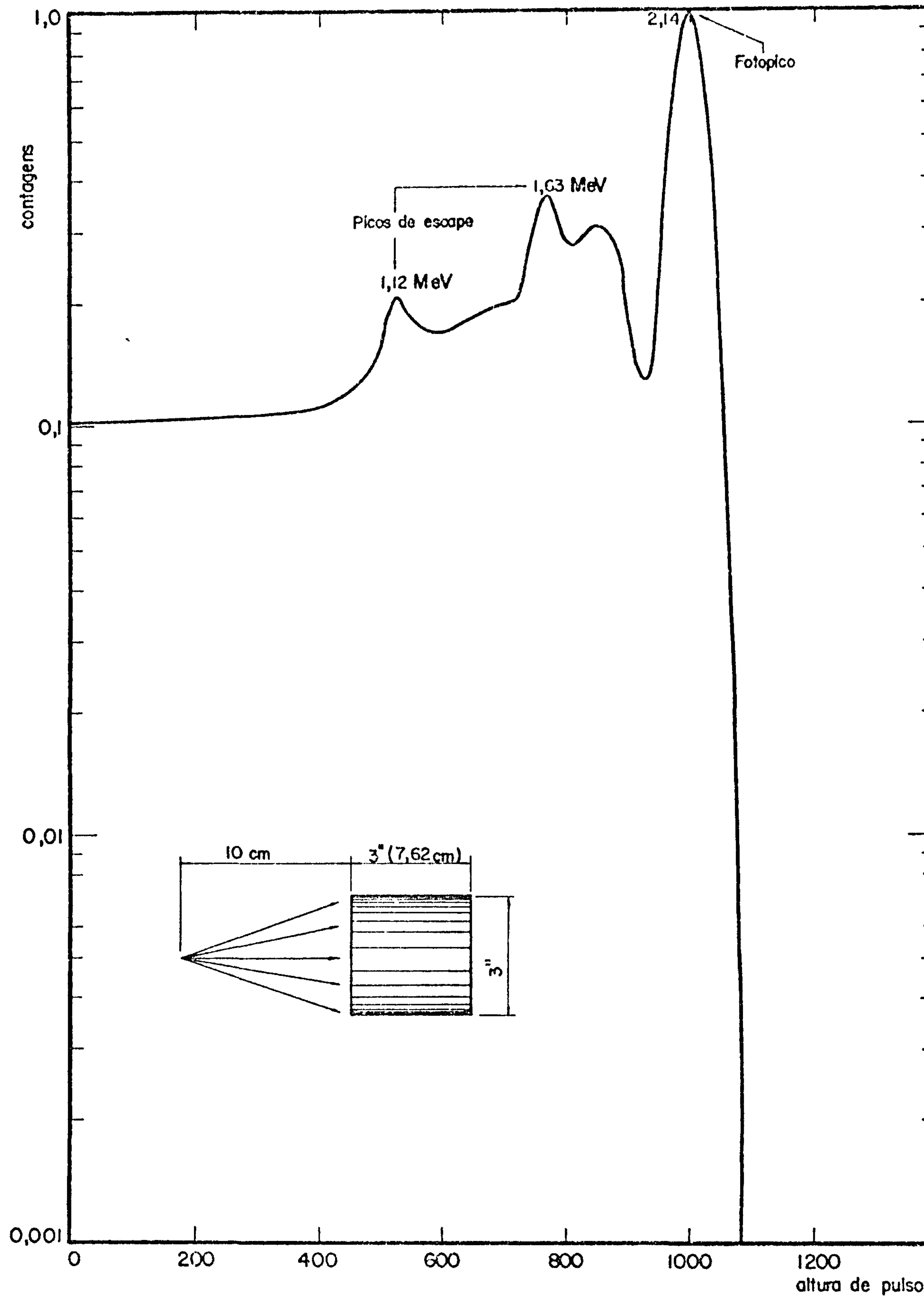


Figura 2-3. Espectro calculado para a energia de fonte igual a 2.14 MeV , 3"×3" (10 cm), levantado por Zerby e Moran /43/.

perda de energia devido ao escape de fótons secundários emitidos na desaceleração de elétrons (bremsstrahlung) e também pelo escape destes mesmos elétrons. Porém como a energia máxima recomendada para utilização deste trabalho é de aproximadamente 3 MeV , estes efeitos podem ser considerados negligíveis para energias menores que este limite e portanto não foram considerados durante os cálculos efetuados.

3. REVISÃO DA LITERATURA

A utilização extensiva de detetores de cintilação de NaI (Tℓ), tem motivado vários trabalhos teóricos e experimentais para o cálculo de eficiências de detecção e levantamento de espectros de deposição de energia, para vários tamanhos de cristais de NaI (Tℓ), e para vários tipos de energias de fontes. Neste Capítulo faz-se uma descrição suscinta destes trabalhos colocando em evidência apenas as características principais de cada um.

Inicialmente, vale ressaltar o conceito da razão pico/total como um importante parâmetro nos cálculos mencionados acima. A razão pico/total é a fração dos raios gama que interagindo dentro do detetor são totalmente absorvidos, dividida pela fração dos raios gama que, penetrando no detetor, sofrem pelo menos uma interação. Quanto maior a razão pico/total maior a eficiência de detecção do sistema, e portanto, facilitando a interpretação do espectro. Entretanto, os cálculos teóricos geralmente apresentam razões pico/total maiores que as medidas experimentalmente, devido ao fato destes cálculos não levarem em consideração as interações na embalagem do cristal (geralmente Aℓ + $A\ell O_3$), o retroespalhamento no vidro da fotomultiplicadora e a radiação de fundo. Alguns autores tais como: E. Nardi /29/, J.D. Marshall /23/ e J.J. Steyn, R. Huang e D.W. Harris /36/, introduziram modificações em seus trabalhos para diminuir esta discrepância.

A Tabela 1 descreve as características dos principais trabalhos publicados na literatura. Os trabalhos de Miller e Snow /26/, e Zerby e Moran /44/ devem ser enfatizados no senti do que de certa forma foram os pioneiros e também porque os trabalhos que foram feitos até o presente são basicamente a introdução de aproximações ou refinamentos mais ou menos acurados nestes dois importantes trabalhos anteriores.

No trabalho de Miller e Snow /26/ as principais aproximações feitas foram: a) o elétron move-se em linha reta (não consideram o espalhamento múltiplo), b) no caso do elétron escapar do cristal a radiação de freamento é calculada para um elétron com energia igual a energia absorvida, c) utilizaram o espectro da radiação de freamento no NaI calculado por Zerby e Moran /42/, que consideraram as colisões radiativas como uma perturbação no transporte de elétrons.

Zerby e Moran /44/ utilizaram técnicas de Monte Carlo mais sofisticadas, mas não consideraram o transporte de elétrons e pósitrons, o que significa que estes são desacelerados e parados no ponto de sua criação.

Weitkamp /38/ desenvolveu um programa de Monte Carlo mais rápido para o cálculo de eficiências, e embora tenha incluído o efeito de formação de pares não considerou perdas de energia devido a radiação de freamento e escape de elétrons.

Franzen, Bianchini e Mafra /10/ e Hehl /15/, seguindo o modelo dado por Miller e Snow /26/, consideraram o efeito de formação de pares e a fuga de elétrons. É interessante notar que estes são dois dos primeiros trabalhos realizados no Brasil e, particularmente no IPEN, para o cálculo de eficiências e o levantamento de espectros de radiação gama em detetores de NaI .

No trabalho de Snyder /33/ o transporte de elétrons é tratado de uma forma diferente, ou seja, distâncias percorridas e pontos de emissão da radiação de freamento são estimados

TABELA 1.* Características Principais de Trabalhos Publicados na Literatura

Autores	Faixa de Energia (MeV)	Tipos de Fonte	Notas
Miller e Snow /26/	0,01 - 15	FP/F1/FD1	EDE/EB/TE/EFF
Zerby e Moran /44/	0,01 - 10	F1	EDE/EFF/EB
Weitkamp /38/	0,2 - 10	F1	EFF
Snyder /33/	0,01 - 10	F1/FP	EFF/EB/TE
Giannini et al /12/	0,015 - 20	FP/FL/FE	EFF/EDE/TE/EB
Berger e Seltzer /3/	0,1 - 20	FP	EDE
Martin et al /24/	0,5 - 20	RC	EDE/EB/TE
Steyn et al /36/	0,279 - 3	F1/FP	EDE/EFF/EM
Nakamura /28/	0,192 - 3	F1/FC	EDE/EFF
Nardi /29/		F1	EDE/EFF
Beam et al /2/	0,2 - 1	F3	EFF
Este trabalho	0,2 - 3	F3/FP/FD2	EFF/EDE

Siglas:

1 - Tipos de Fonte

- F1 = fonte puntual no eixo do cristal,
- F2 = fonte puntual acima do plano do topo do cristal,
- F3 = fonte puntual acima do plano da base do cristal,
- FP = feixe paralelo,
- FE = fonte elipsoidal,
- FD1 = fonte em forma de disco com raio menor ou igual ao raio do cristal,
- FD2 = FD1 + raio do disco maior que o raio do cristal,
- FC = fonte cilíndrica no eixo do detetor,
- RC = raios cósmicos.

2 - Notas

- EFF = eficiências,
- EDE = espectros de deposição de energia,
- TE = considerações sobre o transporte de elétrons,
- EB = considerações sobre a radiação de freamento,
- EM = considerações sobre a embalagem do cristal e a radiação de fundo.

* Com base nos originais, esta tabela foi elaborada com o intuito de dar relevância aos autores quanto aos seus objetivos principais, não significando que esta possui uma descrição completa dos trabalhos mencionados.

estatisticamente com funções distribuição de probabilidades adequadas. Este método produz resultados com uma concordância excelente quando comparados com resultados experimentais. Porém, este trabalho não reproduz espectros de deposição de energia bem detalhados dado que foi feito originariamente com o intuito de calcular eficiências.

Giannini, Oliva e Ramorino /12/ fizeram melhoramentos no tratamento da radiação de freamento através da simulação das perdas de energia do elétron nas colisões radiativas. Para a simulação deste efeito eles dividiram a trajetória do elétron em duas partes, uma primeira onde o elétron move-se em linha reta e uma segunda onde o elétron difunde-se em uma direção aleatória.

Steyn, Huang e Harris /36/ simularam o encapsulamento do cristal e o retroespalhamento no vidro da fotomultiplicadora. Este trabalho confirmou a importância destes dois efeitos nos cálculos de eficiências e levantamento de espectros.

Seltzer e Berger /3/, Martin et al /24/ introduziram modelos para a simulação do espalhamento múltiplo de elétrons. Nardi /29/, simulou a presença do alumínio no topo do cristal e o retroespalhamento no vidro da fotomultiplicadora. Marshall /23/ considerou geometrias complexas e a presença de outros materiais em volta do cristal, mas poucos detalhes são fornecidos. Beam et al /2/, utilizaram redução total da variância e simulação de várias posições de fontes puntuais para energias menores que 1 MeV em um programa de computador, essencialmente o mesmo que o de Zerby e Moran /44/, para o cálculo somente de eficiências.

Neste trabalho utiliza-se técnicas de Monte Carlo utilizadas por Zerby /41/ e Beam et al /2/, na confecção de um programa de computador para o cálculo de eficiências e levantamento do espectro de deposição de energia para fontes de raios gama monoenergéticas com energias discretas menores que 3 MeV. Esta limitação deve-se ao fato de não ter sido considerado o transporte de elétrons e principalmente por não ter sido introduzido a simulação da radiação de freamento (bremsstrahlung). A utilização de técnicas de redução da variância e a versatilidade de aplicação quanto aos tipos de fonte e dimensões do cristal que podem ser utilizados, fazem com que este trabalho seja bastante rápido podendo ser aplicado facilmente e extensivamente para a simulação de várias condições de detecção.

Um pequeno histórico sobre o método de Monte Carlo bem como uma breve revisão dos trabalhos experimentais publicados na literatura, são fornecidos nos Capítulos 4 e 6 respectivamente.

4. O MÉTODO DE MONTE CARLO

4-1. INTRODUÇÃO

Os modernos computadores digitais tornaram possível a simulação de complicados problemas matemáticos utilizando métodos de Monte Carlo. Embora este método seja tipicamente usado para simular processos aleatórios ou randômicos, é também frequentemente aplicado em problemas que não tem uma interpretação probabilística imediata. Por isto tem-se tornado um método de cálculo muito útil em todas as principais áreas científicas.

O termo Monte Carlo apareceu na literatura pela primeira vez na obra de Metropolis e Ulam /25/ em 1949. Este método foi desenvolvido originariamente por von Neumann, Fermi e Ulam que também foram os principais responsáveis pela grande utilização do método de Monte Carlo na física e engenharia modernas. Estes pesquisadores e seus colaboradores fizeram com que estas técnicas pudessem ser utilizadas por físicos e engenheiros sem a necessidade de fundamentos sofisticados da teoria estatística. Desde então verificou-se uma rápida difusão deste método particularmente no campo da física e engenharia nucleares.

O método de Monte Carlo é uma técnica de análise numérica que utiliza a amostragem estatística para a solução de problemas físicos, ou matemáticos. Um modelo estocástico é amostrado de distribuições de probabilidade apropriadas que representam o sistema sendo simulado e estimando-se as respostas requeridas por intermédio de médias estatísticas. Particularmente, no tratamento do problema do transporte de partículas através de meios materiais, os métodos probabilísticos utilizados podem necessitar de uma análise estatística bastante rigorosa para justificá-los plenamente /4/. Entretanto o método de Monte Carlo é bastante intuitivo e geralmente requer apenas conhecimentos básicos da teoria de probabilidades. Portanto, neste trabalho faz-se apenas uma breve revisão de alguns conceitos de probabilidade e estatística.

Como exemplo de uma aplicação do método de Monte Carlo, seja a simulação da emissão e o transporte da radiação através de meios materiais. Estes fenômenos podem ser considerados probabilísticos, ou seja, na emissão de radiação por uma fonte deve-se conhecer a probabilidade da radiação ser emitida com um determinado ângulo e energia, e o processo de transporte envolve o conceito de secção de choque que é a probabilidade de que a radiação interaja de uma determinada maneira. Na aplicação do método de Monte Carlo na solução deste processo de transporte, simula-se desde o processo de "nascimento" da radiação, a trajetória percorrida por esta radiação, até a sua "morte" por absorção ou fuga do sistema. Esquematicamente pode-se colocar a solução deste problema no diagrama representado pela Figura 4-1.

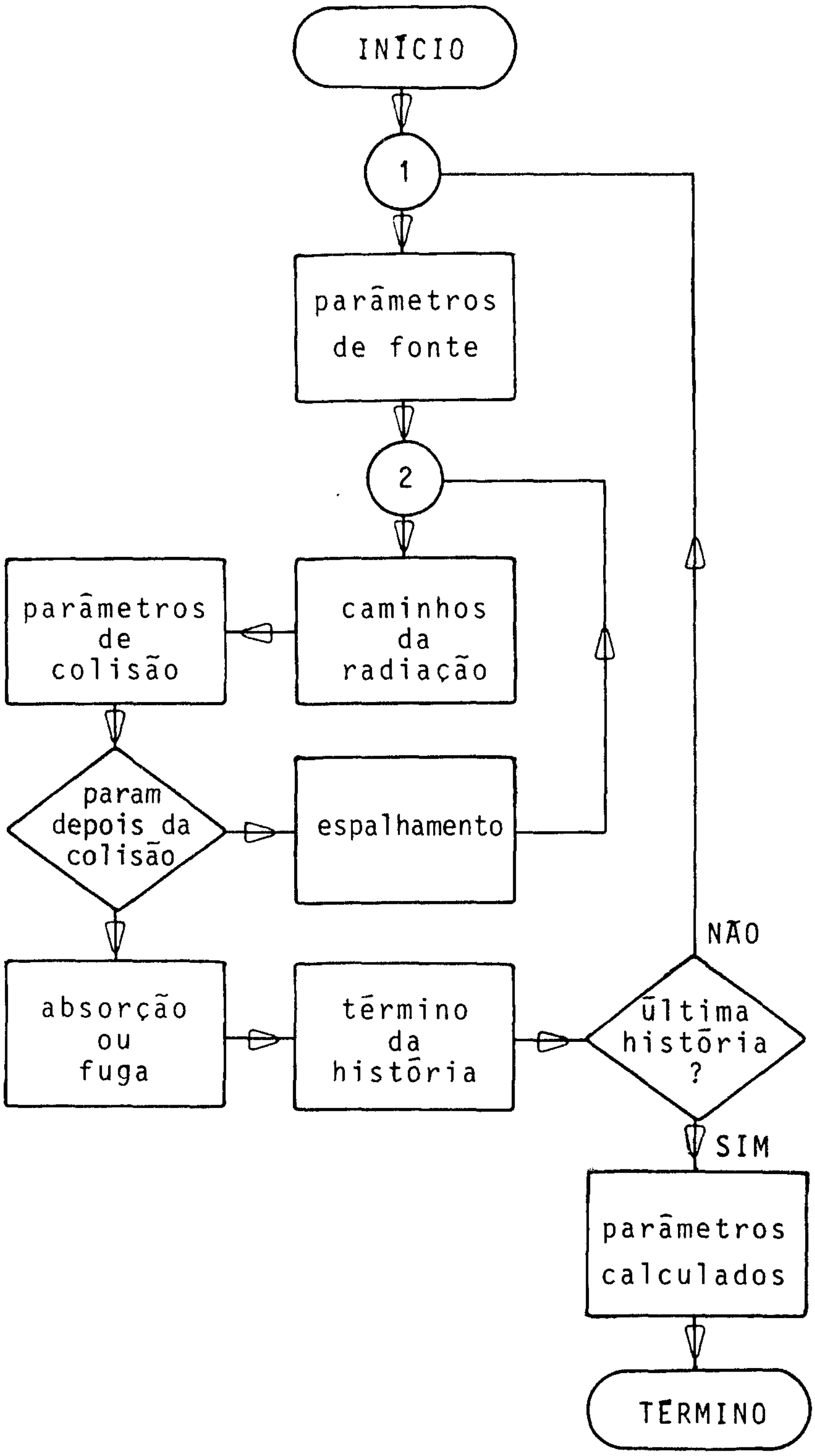


Figura 4-1. Diagrama de blocos de uma aplicação do método de Monte Carlo em processos de transporte.

4-2. NOÇÕES DE PROBABILIDADE E ESTATÍSTICA

Seja um fenômeno (experimento) que forneça m diferentes respostas. Por exemplo, na interação da radiação gama com a matéria existem "praticamente" apenas três possibilidades, ou seja: o efeito fotoelétrico (1), o efeito Compton (2) e o efeito de formação de pares (3). Considerando-se N interações de raios gama obtém-se N_1 interações do tipo 1, N_2 interações do tipo 2 e N_3 interações do tipo 3. Define-se a probabilidade do evento E_i ocorrer como:

$$p(E_i) = \frac{N_i}{N} \quad ; \quad i = 1, 2, \ldots, m . \tag{4.1}$$

Obviamente

$$0 \leq p(E_i) \leq 1 , \tag{4.2}$$

e

$$p(E_1) + p(E_2) + \ldots + p(E_m) = 1 \tag{4.3}$$

Denomina-se espaço amostral ou espaço de eventos ao conjunto de todas as respostas possíveis para um determinado fenômeno. Um espaço amostral pode ser discreto ou contínuo, e finito ou infinito. Como por exemplo o resultado de um jogo de dados possui um espaço amostral discreto e finito, e a emissão de uma partícula com um determinado ângulo zenital, um espaço amostral contínuo e infinito, isto porque pode-se obter qualquer resposta entre o 0 e π.

Uma regra ou uma função, que associa a cada evento de um espaço amostral um número real é chamada variável aleatória (vide Figura 4-2).

Associada com qualquer variável aleatória existe uma função distribuição de probabilidade (f.d.p), que é definida

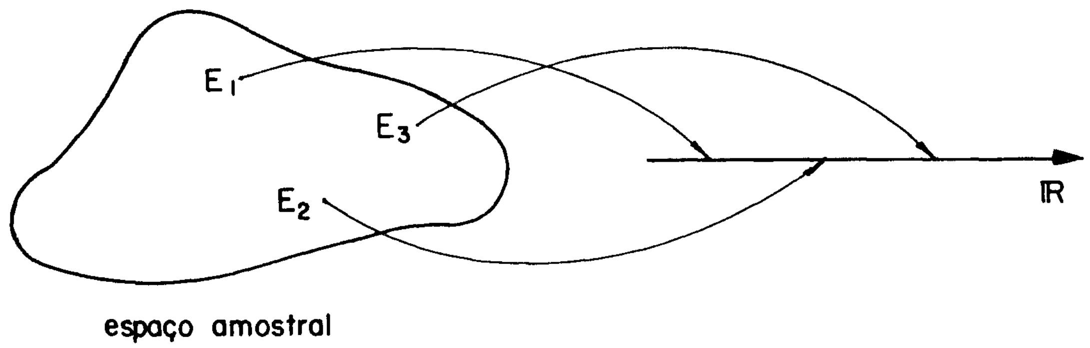


Figura 4-2. Representação de variável aleatória.

como a probabilidade com a qual uma variável aleatória assuma determinado valor. Assim por exemplo, uma distribuição de probabilidade associada com um espaço amostral discreto, é aquela resultante de um jogo de dados (Figura 4-3).

É possível notar que a função distribuição de probabilidade descreve a frequência relativa com que a variável aleatória assume o valor x . Para uma f.d.p. contínua, a probabilidade da variável aleatória X assumir valores entre x e x + dx é dada por:

$$p(x < X < x + dx) = p(x) = f(x)\,dx \,, \qquad (4.4)$$

e no caso do espaço amostral ser discreto a f.d.p. é definida como

x	1	2	3	4	5	6
p(x)	1/6	1/6	1/6	1/6	1/6	1/6

Figura 4-3. Distribuição de probabilidade (p(X = x)) para a variável aleatória (X) representando o espaço amostral de um jogo de dados.

$$p(x_{i-1} < X < x_i) = p(x) = f(x_i) , \qquad (4.5)$$

com as seguintes propriedades:

f.d.p. contínua
$$\begin{cases} f(x) \geq 0 & (4.6) \\ \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\, dx = 1 & (4.7) \end{cases}$$

f.d.p. discreta
$$\begin{cases} f(x_i) \geq 0 & (4.8) \\ \sum_{i=1}^{n} f(x_i) = 1 & (4.9) \end{cases}$$

Define-se função distribuição cumulativa, f.d.c., como sendo a função $F(x)$, associada com a probabilidade que a variável aleatória (X) tenha um valor menor que x, i.é, para o caso contínuo

$$F(x) = P(X \leq x) = \int_{-\infty}^{x} f(x)\, dx , \qquad (4.10)$$

e
$$F(x_k) = P(X \leq x_k) = \sum_{i=1}^{k} f(x_i) , \qquad (4.11)$$

para o caso discreto. Destas equações pode-se verificar que:

$$\lim_{x \to \infty} F(x) = 1 , \qquad (4.12)$$

$$\lim_{x \to -\infty} F(x) = 0 , \qquad (4.13)$$

$$P(a < x < b) = F(b) - F(a) \qquad (4.14)$$

e
$$\sum_{i=1}^{n} f(x_i) = 1 . \qquad (4.15)$$

A uma variável aleatória está associado o conceito de valor esperado. Se $f(x)$ é a f.d.p. de X, o valor esperado de X é definido como:

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} x \, f(x) \, dx \,, \tag{4.16}$$

para o caso contínuo, e

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} x_i \, f(x_i) \,, \tag{4.17}$$

para o caso discreto. Pode-se notar facilmente que estas fórmulas representam a generalização do conceito comum de esperança matemática ou média. O método de Monte Carlo é essencialmente o cálculo de tais médias e suas respectivas variâncias, as quais são definidas como:

$$s^2 = \int_{-\infty}^{\infty} (x - \bar{x})^2 \, f(x) \, dx \tag{4.18}$$

e

$$s^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (x_i - \bar{x})^2 \, f(x_i) \,. \tag{4.19}$$

Variância de uma variável aleatória é definida como a média dos quadrados dos desvios da variável aleatória de sua esperança matemática. Desvio ou erro padrão é definido como raiz quadrada da variância.

4-3. NÚMEROS ALEATÓRIOS

A solução de problemas pelo método de Monte Carlo é realizada, como será visto posteriormente, através do uso de números denominados *aleatórios ou randômicos* que são *números* entre 0 e 1 os quais representam amostragens independentes da função distribuição uniforme, i.é,

$$f(x) = \begin{cases} 1, & 0 \leq x \leq 1, \\ 0 & \text{de outra forma.} \end{cases} \tag{4.20}$$

Números aleatórios podem ser obtidos utilizando tabelas construídas através de procedimentos experimentais, como por exemplo, uma roleta de números. Entretanto para a utilização de tabelas é necessário uma grande área de memória para armazenamentos destes números, o que constitui uma grande desvantagem. Portanto são comumente utilizadas fórmulas de recorrência que fornecem números chamados pseudo-aleatórios visto que estes números são gerados deterministicamente.

Os principais métodos de geração de números aleatórios em computadores digitais estão baseados na seguinte observação: sejam dois números x e y possuindo muitos dígitos, os dígitos centrais do produto xy comportam-se independentemente como funções dos dígitos de x e y. Dentro desta idéia von Neumann estipulou a técnica do quadrado central, que consiste em elevar ao quadrado um determinado número e extrair um número apropriado de dígitos do meio deste quadrado, e repetir este processo.

A idéia deste algoritmo é que, embora a sequência de números gerada é completamente determinística uma vez que o pri meiro número é especificado, estes números comportam-se estatisticamente como se fossem amostrados aleatoriamente. Isto é, são suficientemente uniformes e não correlacionados permitindo que a sua utilização não incorra em grandes erros.

Estas sequências de números são chamadas pseudo-aleatórias devido ao seu caráter determinístico e possuem a grande vantagem que é a de poderem ser repetidas desde o início e assim possibilitar uma repetição do processo computacional da simulação.

Em 1949 Lehmer /32/ propôs uma variação do método do quadrado central chamado de método da congruência multiplicativo, que possui a forma

$$x_i = a\, x_{i-1} \pmod{m} , \qquad (4.21)$$

onde x_0 é um inteiro positivo, a é um inteiro positivo, e o módulo, m, é um inteiro positivo maior que a e x, que na prática é o maior número inteiro que o computador pode representar (para facilidade do algoritmo). Uma boa escolha para x_0, a e m garante um grande período para a sequência e a sua estabilidade quanto a testes de aleatoriedade. Esta escolha é feita por meio de considerações numéricas que fogem ao escopo deste trabalho /35/. No Apêndice C é fornecido um diagrama de blocos para geração de números aleatórios segundo este método.

MacLaren e Marsaglia /20/, apresentaram um método que combina dois geradores usando o método congruencial. Este novo método segundo os testes de aleatoriedade feitos em /20/, é o mais satisfatório.

4-4. MÉTODOS DE AMOSTRAGEM

Para a solução de problemas pelo método de Monte Carlo é necessário fazer amostragens de distribuições de probabilidades adequadas. Quantidades aleatórias distribuídas uniformemente podem ser utilizadas para a simulação de eventos que obedecem praticamente a qualquer lei de distribuição /32/. A relação entre números aleatórios com uma dada distribuição de probabilidade e números aleatórios distribuídos uniformemente entre (0,1), está baseada no seguinte teorema: se a quantidade aleatória η possui uma função distribuição de probabilidade f(x) , então a distribuição da quantidade aleatória

$$\xi = \int_{-\infty}^{\eta} f(x)\, dx \, , \tag{4.22}$$

é uniforme no intervalo (0,1). Portanto esta relação determina η como função somente de ξ, com frequência $f(x)\,dx$ no intervalo $(x , x + dx)$. Este princípio, constitui-se na base do método de Monte Carlo, sendo que a sua demonstração pode ser encontrada na referência /32/.

Nesta seção dá-se relevância apenas a alguns dos métodos comumente utilizados para efetuar, a partir de uma distribuição uniforme, transformações que forneçam as distribuições de probabilidades desejadas.

4-4.1 O Método Direto

Este método é a aplicação direta do princípio básico das técnicas de amostragem do método de Monte Carlo, isto é, quando a função distribuição cumulativa $\xi = F(x)$ da distribuição de probabilidade pedida possui uma função inversa explí cita, simplesmente pode-se amostrar um evento, definido por x, do espaço amostral correspondente a f.d.p., através de $x = F^{-1}(\xi)$. Obviamente a eficiência da aplicação deste método depende da facilidade da computação de $F^{-1}(\xi)$, onde ξ é um número aleatório distribuído uniformemente entre 0 e 1.

Uma aplicação do princípio básico de Monte Carlo pode ser a amostragem da distância entre colisões de uma partícula (L). A probabilidade da partícula sofrer uma colisão entre ℓ e $\ell + d\ell$ é dada por:

$$f(\ell)\, d\ell = e^{-\Sigma_t \ell}\, \Sigma_t\, d\ell , \tag{4.23}$$

onde Σ_t é a seção de choque macroscópica total do meio. Seja,

$$\xi = F(\ell) = \int_0^L e^{-\Sigma_t \ell}\, \Sigma_t\, d\ell = 1 - e^{-\Sigma_t \ell} , \tag{4.24}$$

temos então:

$$L = -\frac{1}{\Sigma_t} \ln(1 - \xi) = F^{-1}(\xi) , \tag{4.25}$$

Mas desde que $(1 - \xi)$ tem a mesma distribuição que ξ, obtém-se:

$$L = -\frac{1}{\Sigma_t} \ln \xi . \tag{4.26}$$

Outro exemplo é a amostragem da direção de emissão de uma partícula por uma fonte com uma distribuição isotrópica. Isto significa que cada elemento de ângulo sólido recebe a mesma contribuição, $d\Omega/4\pi$. Esta distribuição em coordenadas esféricas pode ser escrita como:

$$p(\Omega)\, d\Omega = \frac{d\Omega}{4\pi} = \frac{\operatorname{sen}\theta\, d\theta}{2} \cdot \frac{d\phi}{2\pi} \tag{4.27}$$

Pode-se notar que θ e ϕ são variáveis aleatórias independentes, por isso podem ser amostradas separadamente. Seja,

$$\xi_1 = \frac{1}{2} \int_{-1}^{\mu} d\mu \; ; \quad (\mu = \cos\theta) \; , \tag{4.28}$$

$$\xi_2 = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{\phi} d\phi \tag{4.29}$$

portanto

$$\xi_1 = \frac{1}{2} (\mu + 1) \; , \tag{4.30}$$

$$\xi_2 = \frac{\phi}{2\pi} \; , \tag{4.31}$$

invertendo, obtém-se

$$\theta = \arccos (2\xi_1 - 1) \; , \tag{4.32}$$

e

$$\phi = 2\pi \, \xi_2 \; , \tag{4.33}$$

onde ξ_1 e ξ_2 são números aleatórios uniformemente distribuídos entre 0 e 1. Portanto θ e ϕ denotam uma direção para a emissão de uma partícula segundo uma emissão isotrópica.

Nos exemplos acima a f.d.c. pode ser facilmente invertida, entretanto em muitas aplicações a equação (4.22) nem sempre é possível de ser invertida analiticamente. Um método iterativo, como por exemplo o método de Newton-Raphson /19/, pode ser usado para inverter $\xi = F(x)$.

Uma outra técnica que utiliza o princípio básico diretamente, e também bastante usada, é a interpolação linear, nesta técnica divide-se o intervalo (a,b) em pontos discretos e armazenando valores acurados de $F(x_i)$ nos pontos da subdivisão. Se i é o primeiro índice para o qual $\xi - F(x_i)$ é negativo, então

$$X = x_i - \frac{F(x_i) - \xi}{F(x_i) - F(x_{i-1})}\,(x_i - x_{i-1}) \qquad (4.34)$$

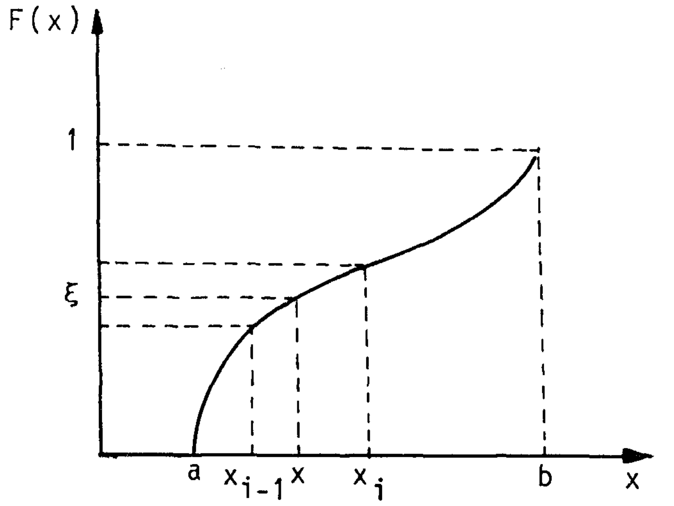


Figura 4-4.
Amostragem por interpolação linear.

4-4.2 A Técnica da Rejeição

Foi mencionado anteriormente que a computação de $F^{-1}(\xi)$ pode ser difícil. Neste caso um método alternativo para a amostragem de uma função distribuição $f(x)$, é a técnica da rejeição.

Esta técnica consiste em retirar um valor aleatória da função distribuição de probabilidade (f.d.p.) e sujeitá-lo a um teste, para determinar se este valor pode ser aceito como amostra. A técnica da rejeição é devida a von Neumann /18/ e pode ser descrita nos seguintes passos:

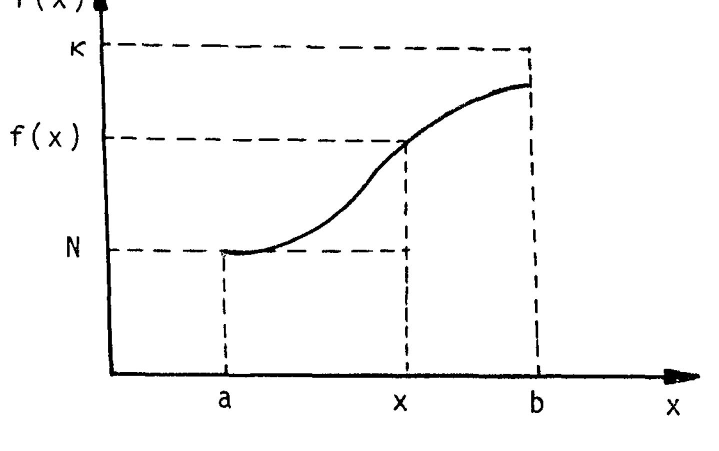


Figura 4-5.
Ilustração da técnica da rejeição.

1. Escolhe-se um valor κ o qual excede todos os valores de $f(x)$ dentro da região (a,b).

2. Obtêm-se dois números aleatórios ξ_1 e ξ_2 uniformemente distribuídos entre 0 e 1 que são usados para encontrar:

$$f(x) \; ; \quad \text{para} \quad x = a + \xi_1(b - a) \; , \qquad (4.35)$$

e $$N = \xi_2 \kappa \, . \qquad (4.36)$$

3. Se $f(x) \geq N$, o valor x é aceito como amostra, caso contrário o processo é repetido até satisfazer esta inequação.

A eficiência da técnica da rejeição é definida como a razão do número de amostragens aceitas pelo número total de amostragens, isto é, a razão da área sob a curva pela área total do retângulo (Fig. 4-5). Portanto

$$\text{eficiência} = \frac{\int_a^b f(x)\,dx}{\kappa(b-a)} = \frac{1}{\kappa(b-a)} \qquad (4.37)$$

Embora a técnica da rejeição seja geralmente conveniente para se amostrar eventos, esta pode tornar-se ineficiente em termos de computação, se a eficiência é pequena. Portanto o valor de κ deve ser o menor possível que exceda $f(x)$ na região considerada, ou seja, o máximo de $f(x)$.

4-4.3 Amostragem por Importância

No tratamento dos problemas de Monte Carlo é importante notar a diferença entre tais problemas e o problema usual de estimativas estatísticas. No problema de estimativa estatística comum, tanto a distribuição de probabilidade como os parâmetros a serem estimados são fixos, ou seja, dada uma amostra de n valores da distribuição, a melhor (ou de mínima variância) estimativa para o parâmetro é calculada /31/.

Nos cálculos por Monte Carlo, apenas a resposta é realmente fixa, dado que as soluções de um determinado problema físico ou matemático devem ser aproximadamente iguais independe do método de cálculo utilizado. Portanto o problema é fazer a amostragem de uma distribuição que forneça uma variância mínima para esta resposta, garantindo desta maneira a sua validade.

Como uma simulação geralmente requer uma grande quantidade de cálculo, geralmente é necessário utilizar técnicas de amostragem que forneçam o resultado desejado com maior rapidez. Tais técnicas são chamadas técnicas de redução da variância e dentre elas está a amostragem por importância.

A amostragem por importância consiste em forçar a seleção de um maior número de pontos nas partes mais importantes do problema. Por exemplo, em um problema de transporte, a amostragem das trajetórias que mais contribuem para o cálculo do parâmetro sendo estimado. Esta distorção se faz introduzindo uma nova função distribuição e os valores obtidos devem ser alterados utilizando um fator peso.

Seja a função distribuição de probabilidade $p(x)$ definida em (a,b). O valor médio de uma função $f(x)$ quando x é amostrado de $p(x)$ é:

$$\overline{X} = \int_a^b f(x)\, p(x)\, dx \qquad (4.38)$$

Entretanto é possível amostrar valores de $f(x)$ através de uma outra função distribuição $p'(x)$, ou seja, se para cada pon to x_i escolhido for computado um peso $w(x_i) = p(x_i)/p'(x_i)$ e se o resultado da amostragem for calculado na forma $w(x_i)\,f(x_i)$, o valor médio de $f'(x) = f(x)\,w(x) = f(x)\,p(x)/p'(x)$, será:

$$\overline{X}' = \int_a^b f'(x)\,p'(x)\,dx = \int_a^b f(x)\,p(x)\,dx = \overline{X}\,, \qquad (4.39)$$

portanto o valor médio de $f(x)$ é igual ao de $f'(x)$. Porém o mesmo não acontece para as variâncias, dado que:

$$\overline{X}^2 = \int_a^b f^2(x)\,p(x)\,dx\,, \qquad (4.40)$$

$$\overline{X}'^2 = \int_a^b f'^2(x)\,p'(x)\,dx = \int_a^b \frac{p(x)}{p'(x)}\,f^2(x)\,p(x)\,dx \qquad (4.41)$$

comparando as variâncias de $f(x)$ e $f'(x)$

$$s^2 = X^2 - (\overline{X})^2\,, \qquad (4.42)$$

$$s'^2 = X'^2 - (\overline{X}')^2\,, \qquad (4.43)$$

é possível notar que se $p'(x)$ for escolhida de modo que represente a parte do intervalo que mais contribua no cálculo da função, ou seja, que $p(x)/p(x') < 1$ neste intervalo, isto implica que a variância será reduzida.

4-4.4 Roleta Russa e Fracionamento

Estas são duas das mais conhecidas técnicas de Monte Carlo para redução da variância. São aplicadas em regiões consideradas não importantes (roleta russa) e importantes (fracionamento).

Considerando o problema do transporte de partículas, suponha que partículas com peso w entraram em uma região considerada não importante (regiões de pequena variância, mas que não contribuem significativamente no cálculo de determinado parâmetro em especial), portanto é conveniente diminuir o número de partículas seguidas dentro desta região. Aplicando roleta russa, esta técnica faz com que a partícula sobreviva com uma probabilidade q, e w/q é considerado como amostra sendo seu peso aumentado pelo fator q. Portanto, partículas poderiam ser mortas com probabilidade $(1-q)$. Desta maneira a roleta russa é considerada um caso especial da amostragem por importância no qual a probabilidade do término da história é aumentada nas regiões não importantes e diminuída nas regiões significativas.

O fracionamento é uma técnica complementar utilizada nas regiões importantes. Esta técnica consiste em considerar n partículas iguais a uma determinada partícula que conseguiu chegar a uma região importante, isto faz com que cada partícula que chegue a esta região produza n ramificações independentes, cada uma começando com um peso igual a $1/n$ vezes o peso da partícula original.

A roleta russa e o fracionamento são as técnicas de redução da variância mais utilizadas. Geralmente economizam tempo de computação e fornecem grandes reduções da variância, particularmente quando as regiões importantes são facilmente identificáveis, como por exemplo nos cálculos de blindagens. O desenvolvimento teórico destas duas técnicas pode ser encontrado em Shreider /15/.

4-4.5 Outras Técnicas de Amostragem

Existe uma grande variedade de outras técnicas de amostragem, como por exemplo, o método das variáveis antitéticas, a amostragem estratificada, o método da transformada exponencial, o método da superposição, etc. Entretanto uma descrição mais detalhada destas técnicas fugiria ao escopo deste trabalho.

4-5. ANÁLISE DOS RESULTADOS

A validade dos resultados obtidos com a aplicação do método de Monte Carlo depende em grande parte de dois teoremas bastante intuitivos que serão apenas mencionados, portanto sem a devida demonstração.

Teorema 1. A Lei dos Grandes Números

Esta lei estipula que a precisão de uma estimativa é melhor quanto maior for o número de amostragens. Como aplicação desta lei em um cálculo por Monte Carlo, seja x_1, x_2, ..., x_n valores amostrados da variável aleatória X. A média da amostra será:

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i \qquad (4.44)$$

A lei dos grandes números estipula que a média da amostragem aproximará quase sempre da média da população ou média real, como um limite para n tendendo a infinito. Uma demonstração para este teorema pode ser encontrada em Carter e Cashwell /21/.

Entretanto, para se estabelecer um limite aceitável para o erro estatístico da média da amostra, é necessário a aplicação do teorema do limite central. Além disso, este importante teorema permite utilizar a distribuição normal para representar variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas sem considerar a forma da distribuição de probabilidade.

Teorema 2. Teorema do Limite Central

Seja $x_1, x_2, x_3, \ldots$ uma sequência de variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas com médias m e desvios padrões σ comuns. Então a seguinte média:

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i , \tag{4.45}$$

possui uma distribuição normal com média m e desvio padrão $\sigma/\sqrt{n}$, i.é:

$$\lim_{n \to \infty} p \left\{ \frac{\bar{x} - m}{\sigma/\sqrt{n}} < x \right\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{x} e^{-t^2/2} \, dt , \tag{4.46}$$

isto é, quando $n \to \infty$ o erro na avaliação de $\bar{x}$ depende apenas de n e σ.

Uma demonstração para este teorema pode ser encontrada em Spanier e Gelbard /15/.

5. CÁLCULO DE EFICIÊNCIAS E LEVANTAMENTO DO ESPECTRO

5-1. IDEALIZAÇÕES E APROXIMAÇÕES PARA A CONSTRUÇÃO DO MODELO DE SIMULAÇÃO

A primeira idealização que se faz para a modelagem do sistema fonte-detetor é a eliminação dos efeitos da radiação de fundo. Tal hipótese é justificada, desde que esta radiação é particular para cada experiência. Tal eliminação possibilita estimar a resposta real do detetor, além do que, a radiação de fundo pode ser calculada subtraindo os resultados calculados dos resultados experimentais. Esta eliminação se faz considerando que a fonte e o detetor estão suspensos em um vácuo infinito. A diferença entre os resultados calculados e os experimentais devido a esta aproximação, é significante apenas nas regiões de baixa energia e pequeno número de contagens no espectro, ou seja, regiões como o vale entre o fotopico e a cauda Compton ou em espectros devido a fontes de alta energia.

As interações mais importantes que governam o transporte de um fóton dentro da faixa de energia de utilização deste trabalho (0.15 < E < 3 MeV), são o efeito Compton, o efeito fotoelétrico e o efeito de formação de pares. A não utilização do espalhamento Rayleigh, que é também bastante provável na faixa de energia considerada, significa que fótons espalhados por este processo não sofrem mudança de direção e nem perda de energia. Estas aproximações são suficientemente válidas, na faixa de energia considerada neste trabalho, conforme já discutido por Zerby /41/.

No efeito Compton o fóton muda de direção e transmite parte de sua energia para o elétron. Este efeito é o mais provável para energias entre 0.2 e 6 MeV .

O efeito fotoelétrico é significante apenas para fótons de baixa energia, ou seja, a seção de choque aumenta com a diminuição da energia, conforme ilustrado na Figura 5-1. Nesta interação o fóton transmite toda a sua energia para o elétron que é ejetado do átomo com energia igual a energia do fóton menos a energia de ligação do elétron no átomo. Esta energia é considerada totalmente absorvida no detetor porque elétrons com baixa energia possuem pequena probabilidade de escape e de emissão de radiação de freamento. Esta aproximação também não introduz erros significativos, nos resultados, dentro da faixa de energia considerada como se discutirá posteriormente.

Para energias acima de 1.02 MeV o efeito de formação de pares pode ocorrer, sendo que neste processo o fóton desaparece e parte de sua energia é convertida na formação de um par elétron-pósitron, com energias cinéticas iguais a metade da energia residual do fóton de aniquilamento.

Os efeitos de polarização no espalhamento Compton foram ignorados. Entretanto, após alguns espalhamentos a radiação não é completamente despolarizada, e portanto a penetração do raio gama aumenta no cristal. Porém o erro proveniente desta aproximação pode ser considerado negligível /44/.

As partículas carregadas originárias das interações citadas acima têm um papel importante na determinação do espectro de deposição de energia porque podem acarretar fuga de energia do cristal através das radiações secundárias que produzem, por exemplo a radiação de freamento e, também através de suas próprias fugas do cristal. Porém, segundo os gráficos dos trabalhos de Zerby /42/ e Giannini et al /11/, a probabilidade de emissão de radiação de freamento por elétrons com energias

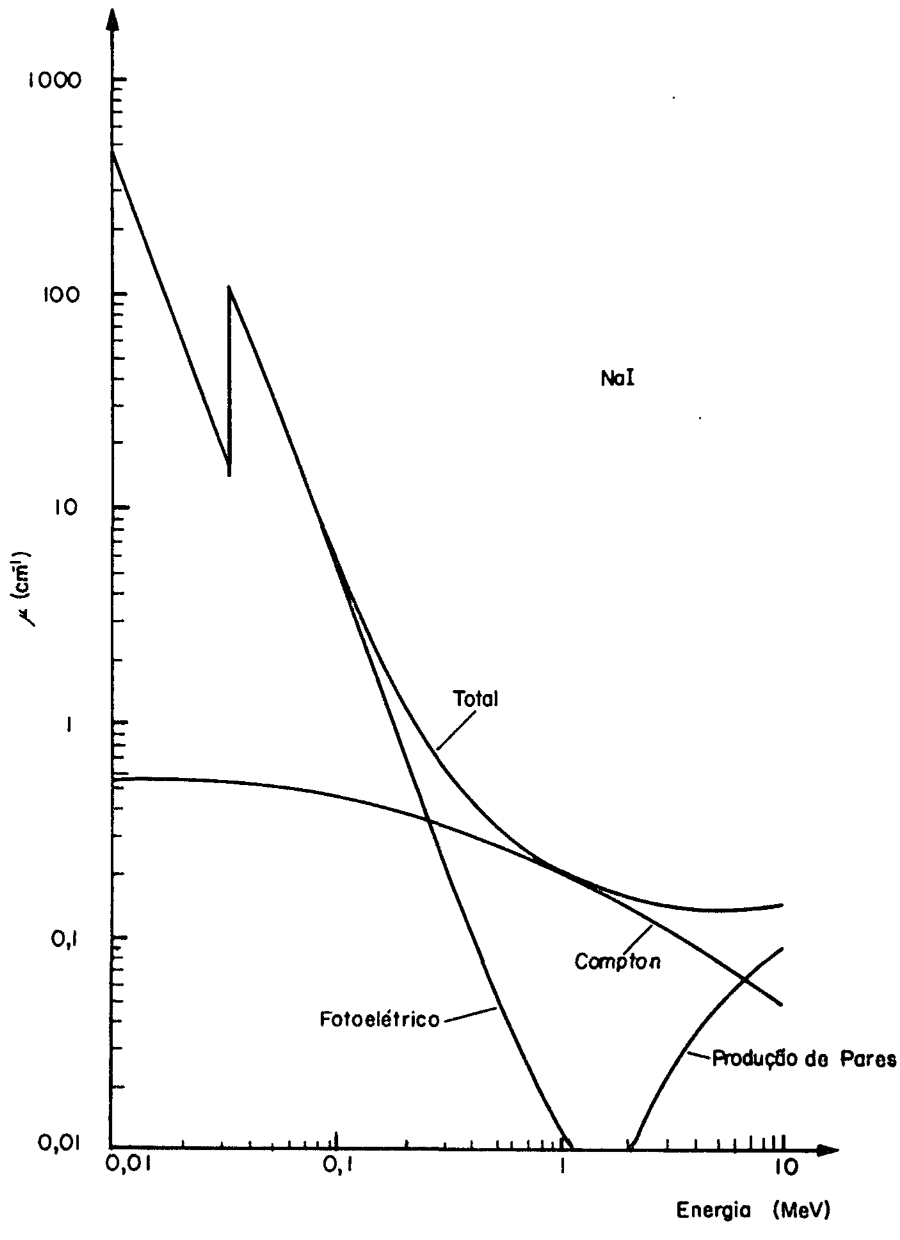


Figura 5-1. Secções de choque para o Iodedo de Sódio para raios gama /22/.

menores que 3 MeV , é desprezível. Desta maneira, neste trabalho considera-se que os elétrons perdem energia apenas por ionização e excitação, e também são considerados desacelerados e parados no ponto de sua produção. Tal hipótese pode ser justificada tendo em vista que o caminho residual percorrido por estas partículas, nas energias aqui consideradas, é muito pequeno quando comparado com as dimensões do cristal.

Assume-se também que os pósitrons criados nos processos de formação de pares são desacelerados e parados antes de sua aniquilação em uma colisão com um elétron. Esta hipótese é bastante acurada neste caso, desde que a probabilidade de aniquilamento para pósitrons com baixa energia é muito pequena /16/. Desta maneira os fótons de aniquilação são considerados emitidos do mesmo ponto de formação do pósitron, ambos com 0.511 MeV de energia com direção isotrópica e sentidos opostos.

Não se considera o encapsulamento do cristal e a presença de outros materiais no ambiente de detecção. Esta aproximação de acordo com Steyn et al /36/ e, a dificuldade da eliminação da radiação de fundo dos cálculos experimentais, de acordo com Zerby /41/, são as principais causas das pequenas discrepâncias entre os resultados teóricos e experimentais.

Foi mencionado anteriormente que a resposta do detetor foi aproximada por uma dependência gaussiana, sendo esta utilizada para o espalhamento do histograma na obtenção do espectro (ver Apêndice A).

5-2. CONSIDERAÇÕES GERAIS SOBRE O MODELO DE CÁLCULO

O tratamento por Monte Carlo consiste em seguir um certo número de fótons desde a emissão pela fonte até a sua absorção dentro do detetor, amostrando-se a emissão do fóton pela fonte, o caminho percorrido até a primeira interação e os fótons secundários produzidos, através das técnicas anteriormente descritas.

Por questão de eficiência do programa utiliza-se as seguintes reduções de variância:

1. O raio gama é obrigado a atingir o detetor.
2. O raio gama é obrigado a interagir dentro do detetor.
3. O raio gama é obrigado a "sobreviver" através do espalhamento Compton.

Para cada condição acima são calculados pesos apropriados utilizando princípios físicos e geométricos definidos adequadamente, como será demonstrado posteriormente. A história de um fóton é determinada a partir das seguintes decisões:

1. O raio gama entrou por cima ou pelo lado do detetor?
2. Qual a distância que o fóton viaja antes de interagir dentro do detetor?
3. Qual a nova energia e a nova direção do fóton depois de um espalhamento Compton?

As decisões (2) e (3) são repetidas até o peso corrente do fóton, ou sua energia, caírem abaixo dos valores estabelecidos (10^{-8} e 0.01 MeV respectivamente), desta maneira o fóton é considerado absorvido. Na Figura 5-2 é apresentado um fluxograma para este procedimento de cálculo.

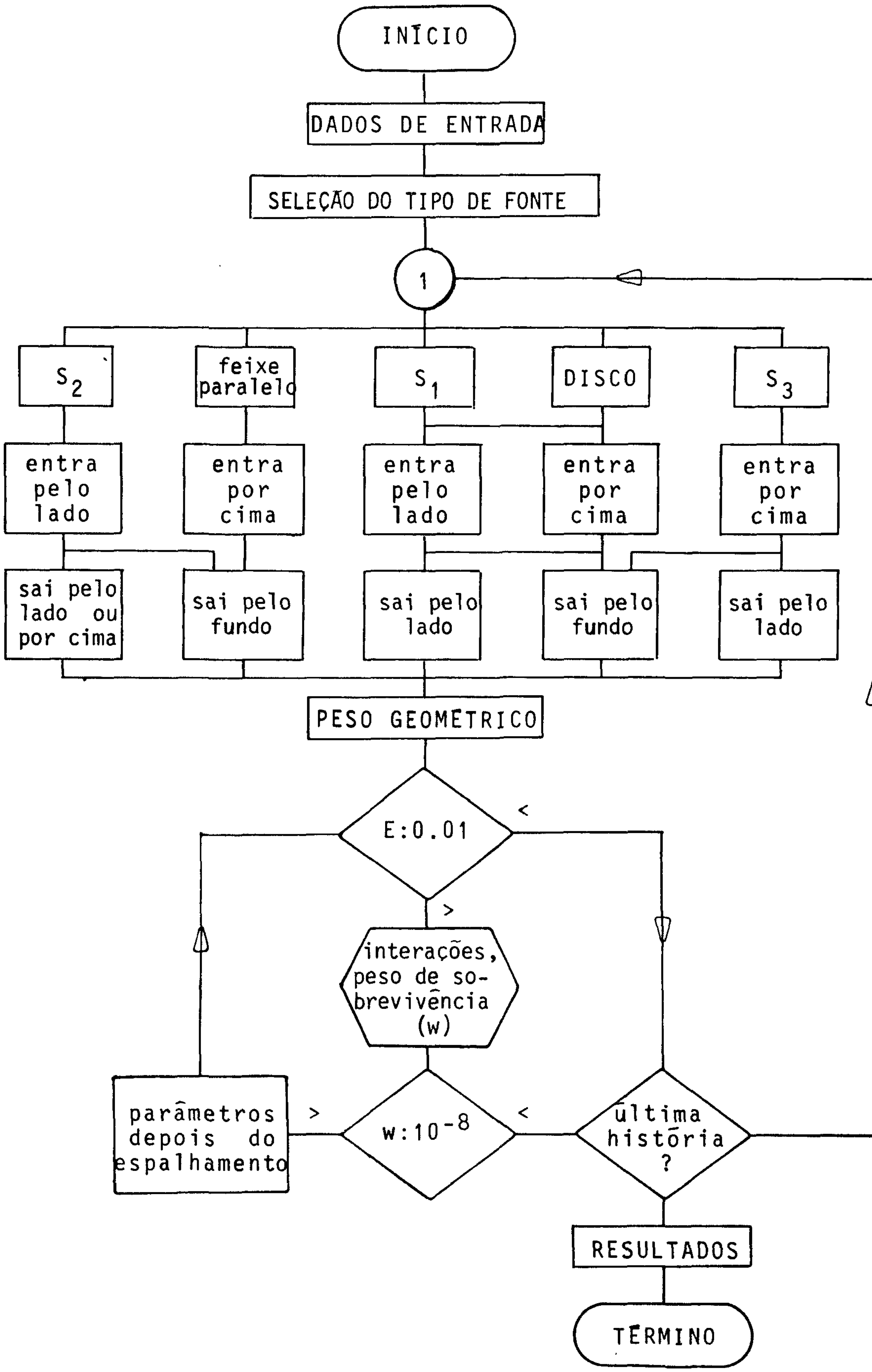


Figura 5-2. Fluxograma Simplificado do Programa de Monte Carlo.

Entretanto, como será visto posteriormente, tanto para o cálculo de eficiências quanto para o levantamento do espectro é necessário simular interações "fictícias" do efeito de formação de pares. Neste caso, é importante notar que, para os fótons originários da aniquilação do pósitron, não são utilizadas técnicas de redução da variância, ou seja, a estes fótons é permitido tanto fugir do cristal como ser absorvido dentro dele. Isto significa que a amostragem é feita considerando o peso corrente do fóton antes da formação de pares.

5-3. DETERMINAÇÃO DO ÂNGULO SÓLIDO

O conhecimento do ângulo sólido subentendido por um detetor e a fonte de radiação é necessário em vários problemas que envolvem a detecção de radiações nucleares. Porém a solução analítica, para este problema, só é possível para casos simples. As soluções normalmente utilizadas são por integrações numéricas, expansões em série ou aproximações geométricas para facilidade de integração. No entanto, a aplicação do método de Monte Carlo é bastante simples e eficiente na obtenção de soluções para este problema.

Considerando primeiramente fontes puntuais, tem-se que para cada fóton emitido pela fonte, deve-se conhecer a probabilidade deste atingir o detetor e as coordenadas do ponto pelo qual o fóton realmente entra no detetor. Os dois casos possíveis são:

1. Uma fonte puntual localizada em um ponto que permite que fótons entrem por cima ou pelo lado do detetor (Figura 5-3a) e,

2. Uma fonte puntual localizada dentro da região cilíndrica diretamente acima da fase circular do detetor (Figura 5-3b).

Considerando o caso 1 (Fig. 5-3a), pode-se definir o ângulo

$$\alpha_{max} = \operatorname{arc\,sen}(r/\rho) , \qquad (5.1)$$

onde r é o raio do detetor e ρ é a distância do centro do detetor a uma linha paralela ao eixo do detetor que contenha a fonte puntual. Utilizando redução da variância para a amostragem de ângulos α compreendidos somente no intervalo $(-\alpha_{max}, \alpha_{max})$, constrói-se uma função distribuição de probabilidade modificada que poderá ser amostrada da f.d.p. uniforme entre 0 e 1. Dessa maneira aplicando a equação (4.22), α pode ser amostrado por

$$\xi = \left[\int_{-\alpha_{max}}^{\alpha} d\alpha/2\pi \right] \Big/ \left[\int_{-\alpha_{max}}^{\alpha_{max}} d\alpha/2\pi \right] , \qquad (5.2)$$

onde ξ é um número aleatório uniformemente distribuído entre 0 e 1. Resolvendo a equação acima e invertendo a função obtém-se

$$\alpha = \alpha_{max} (2\xi - 1) ; \quad -\alpha_{max} \leq \alpha \leq \alpha_{max} \qquad (5.3)$$

O peso associado devido a esta amostragem modificada é dado por

$$w\alpha = \left[\int_{-\alpha_{max}}^{\alpha_{max}} d\alpha/2\pi \right] \Big/ \left[\int_{0}^{2\pi} d\alpha/2\pi \right] , \qquad (5.4)$$

ou seja,

$$w\alpha = \alpha_{max}/\pi . \qquad (5.5)$$

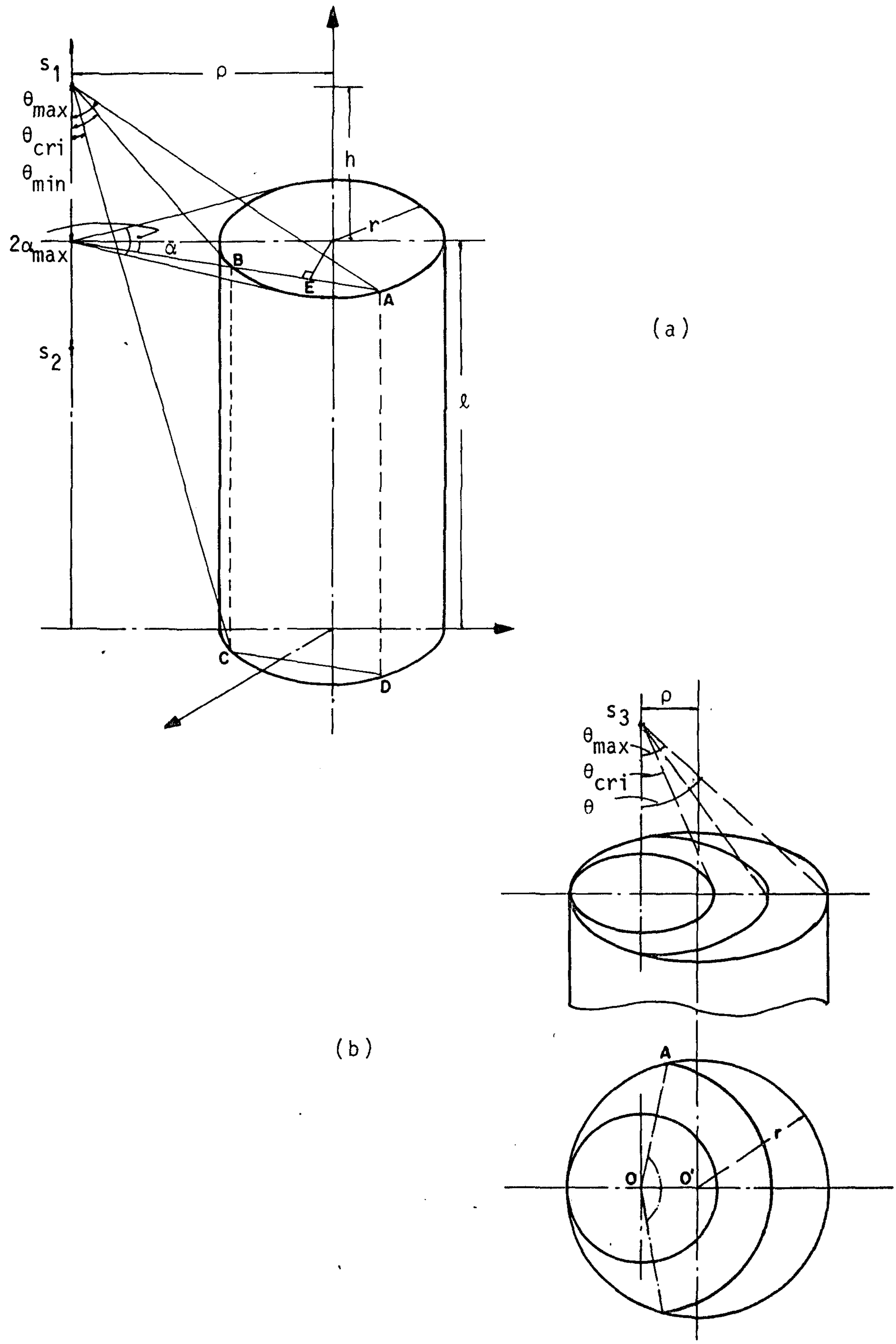


Figura 5-3. Casos possíveis para fontes puntuais.

Com o ângulo α conhecido, fica estabelecido o plano ABCD (vide Fig. 5-3a), por onde um fóton proveniente de fontes localizadas em s_1 ou s_2 devem passar. Para estabelecer a posição do fóton neste plano deve-se definir os ângulos θ_{max}, θ_{cri} e θ_{min}. Pela Figura 5-3a, pode-se calcular:

$$\overline{OB} = \rho \cos\alpha - (r^2 - \rho^2 \operatorname{sen}^2\alpha)^{1/2} , \quad (5.6)$$

e

$$\overline{OA} = \rho \cos\alpha + (r^2 - \rho^2 \operatorname{sen}^2\alpha)^{1/2} . \quad (5.7)$$

Quando a fonte estiver em s_1, ou seja, $h > 0$, então

$$\theta_{max} = \operatorname{arc\,tan}(OA/h) , \quad (5.8)$$

$$\theta_{cri} = \operatorname{arc\,tan}(OB/h) , \quad (5.9)$$

e

$$\theta_{min} = \operatorname{arc\,tan}(OB/(h + \ell)) . \quad (5.10)$$

Quando $h = 0$,

$$\theta_{max} = \pi/2 , \quad (5.11)$$

$$\theta_{cri} = \pi/2 , \quad (5.12)$$

e

$$\theta_{min} = \operatorname{arc\,tan}(OB/\ell) . \quad (5.13)$$

No caso de fontes localizadas em s_2, ou seja, $h < 0$,

$$\theta_{max} = \pi/2 + \operatorname{arc\,tan}(|h|/OB) , \quad (5.14)$$

$$\theta_{cri} = \theta_{max} , \quad (5.15)$$

e

$$\theta_{min} = \operatorname{arc\,tan}(OB/(\ell - |h|)) . \quad (5.16)$$

Da mesma forma em que foi amostrado o ângulo α, também é construída uma função distribuição modificada (amostra -

gem por importância) que é utilizada para a amostragem de um ângulo θ particular no intervalo $(\theta_{min}, \theta_{max})$, ou seja,

$$\xi = \int_{\theta_{min}}^{\theta} \frac{1}{2} \operatorname{sen}\theta \, d\theta \bigg/ \int_{\theta_{min}}^{\theta_{max}} \frac{1}{2} \operatorname{sen}\theta \, d\theta . \qquad (5.17)$$

Resolvendo a equação acima e invertendo a função, obtém-se então,

$$\theta = \arccos \left\{ \cos\theta_{min} - \xi \left[\cos\theta_{min} - \cos\theta_{max} \right] \right\}, \qquad (5.18)$$

o qual deve ser comparado com θ_{cri}, para saber se o fóton entrou por cima ou pelo lado do detetor. Da mesma forma calcula-se o peso associado

$$w\theta = \int_{\theta_{min}}^{\theta_{max}} \frac{1}{2} \operatorname{sen}\theta \, d\theta \bigg/ \int_{0}^{\pi} \frac{1}{2} \operatorname{sen}\theta \, d\theta , \qquad (5.19)$$

ou

$$w\theta = \frac{1}{2} \left(\cos\theta_{min} - \cos\theta_{max} \right) . \qquad (5.20)$$

Para fontes localizadas em s_3 (Fig. 5-3b), pode-se notar que θ_{max} permanece constante, e desta forma θ é calculado em primeiro lugar, e posteriormente calcula-se α utilizando o valor de θ. Neste caso, o ângulo θ_{cri} define o ângulo abaixo do qual o ângulo α poderá assumir valores entre 0 e 2π e, quando θ for maior que θ_{cri} a variação de α é limitada ao intervalo $(-\alpha_{max}, \alpha_{max})$. Desta forma, utilizando a Figura 5-3b pode-se deduzir

$$\theta_{max} = \operatorname{arc\,tan} \left[(r + \rho)/h \right] , \qquad (5.21)$$

$$\theta_{cri} = \operatorname{arc\,tan} \left[(r - \rho)/h \right] , \qquad (5.22)$$

e $\theta_{min} = 0.0 \, .$ (5.23)

Amostrando-se θ pela equação (5.18) e comparando com o ângulo θ_{cri} (Eq.5.22) tem-se duas possibilidades. Caso θ for menor, α varia entre 0 e 2π e não se utiliza amostragem por importância, ou seja,

$$\xi = \int_0^\alpha d\alpha/2\pi \, , \tag{5.24}$$

$$\xi = \frac{\alpha}{2\pi} \, , \tag{5.25}$$

então,

$$\alpha = 2\pi\,\xi \; ; \qquad 0 \le \alpha \le 2\pi \tag{5.26}$$

com $w\alpha = 1.0 \, .$ (5.27)

Quando θ for maior que θ_{cri}, α irá variar entre $-\alpha_{max}$ e α_{max} onde, pela Figura 5-3b,

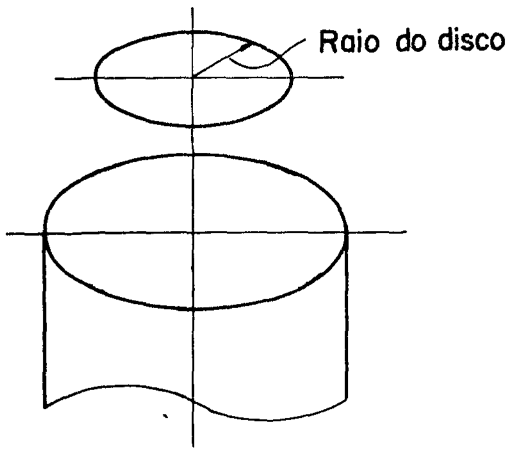
$$\alpha_{max} = \arccos\left[\left(\rho^2 + h^2\tan^2\theta - r^2\right) / 2h\,\rho\tan\theta\right] \, , \tag{5.28}$$

e portanto α poderá ser amostrado pela equação (5.2), que irá fornecer novamente

$$\alpha = \alpha_{max}\,(2\xi - 1) \, , \tag{5.29}$$

e $w\alpha = \alpha_{max}/\pi \, .$ (5.30)

Para a utilização de fontes tipo disco (Figura 5-4a), deve-se amostrar um ponto na superfície do disco e considerá-lo como uma fonte puntual conforme o procedimento anterior. Para isto constrói-se uma função distribuição de probabilidade que obviamente deverá satisfazer a condição



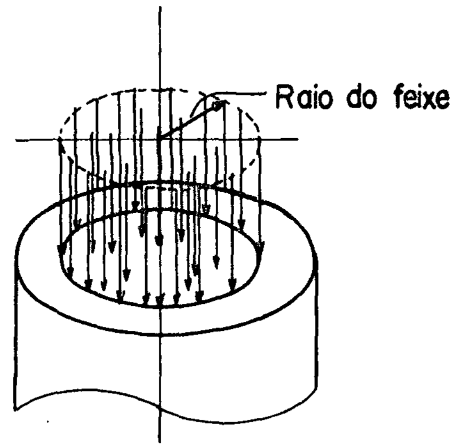


Figura 5-4. Fontes tipo disco e feixe paralelo.

$$\int_S f(s)\, ds = 1 , \tag{5.32}$$

ou seja,

$$f(s) = \frac{ds}{\pi R^2} , \tag{5.33}$$

onde $ds = \rho\, d\rho\, d\phi$ para $0 \le \rho \le R$ e $0 \le \phi \le 2\pi$. Entretanto, considerando a simetria geométrica, não será necessário o ângulo ϕ, portanto utilizando o método direto obtém-se

$$\xi = \int_0^{2\pi} \int_0^{\rho} \frac{\rho\, d\rho\, d\phi}{\pi R^2} , \tag{5.34}$$

ou

$$\xi = \frac{\rho^2}{R^2} , \tag{5.35}$$

invertendo-se tem-se

$$\rho = R\sqrt{\xi} , \qquad 0 \le \rho \le R . \tag{5.36}$$

Desta maneira continua-se o procedimento de cálculo para fonte puntual com ρ amostrado pela equação (5.36).

Considerando fonte do tipo feixe circular (Fig. 5-4b) paralelo incidindo perpendicularmente no topo do cristal, amostra-se um fóton, do feixe, utilizando a equação (5.36), com R igual ao raio do feixe. Obviamente, devido a simplicidade desta geometria, não é necessário utilizar amostragem por importância (w = 1), porém é importante notar que feixes com raios superiores ao raio do detetor devem ser amostrados com R igual ao raio do detetor, visto que de outra forma os fótons não atingem "realmente" o detetor.

De acordo com os parágrafos anteriores, o peso total associado a uma seleção dos ângulos α e θ será

$$w_i = w\alpha . w\theta \ , \tag{5.37}$$

onde w_i representa o ângulo sólido subentendido para a seleção particular "i" de α e θ. A estimativa do ângulo sólido Ω, é dada por

$$\Omega = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} w_i \ , \tag{5.38}$$

onde N é o número de histórias. O desvio padrão será dado por

$$\sigma_\Omega = \left[\frac{1}{N(N-1)} \left(\sum_{i=1}^{N} w_i^2 - N\Omega^2 \right) \right]^{1/2} . \tag{5.39}$$

5-4. CÁLCULO DOS COSSENOS DIRETORES INICIAIS

Para o cálculo dos cossenos diretores iniciais que denotam as coordenadas angulares do fóton, é necessário o conhecimento das coordenadas de entrada (x_e, y_e, z_e) e de saída (x_s, y_s, z_s) do fóton e da distância entre estes dois pontos. Recorrendo novamente às Figuras 5-3a e 5-3b pode-se notar que, se o fóton entrou pelo topo do detetor então

$$x_e = h \tan\theta \operatorname{sen}\alpha , \tag{5.40}$$

$$y_e = h \tan\theta \cos\alpha - \rho , \tag{5.41}$$

e

$$z_e = \ell . \tag{5.42}$$

e se o fóton entrou pelo lado do detetor

$$x_e = \overline{OB} \operatorname{sen}\alpha , \tag{5.43}$$

$$y_e = \overline{OB} \cos\alpha - \rho , \tag{5.44}$$

e

$$z_e = h + \ell - \overline{OB}/\tan\theta . \tag{5.45}$$

Analogamente, se o fóton "tende" a sair pelo fundo do detetor, as coordenadas de saída seriam:

$$x_s = (h+\ell) \tan\theta \operatorname{sen}\alpha , \tag{5.46}$$

$$y_s = (h+\ell) \tan\theta \cos\alpha - \rho , \tag{5.47}$$

$$z_s = 0.0 , \tag{5.48}$$

e, se o fóton tende a sair pelo lado

$$x_s = \overline{OA} \operatorname{sen}\alpha , \tag{5.49}$$

$$y_s = \overline{OA} \cos\alpha - \rho , \tag{5.50}$$

e $\qquad z_s = h + \ell - \overline{OA}\tan\theta\ .\qquad (5.51)$

Considerando também a possibilidade do fóton sair pelo topo do detetor então

$$x_s = |h| / \tan(\theta - \pi/2)\ \mathrm{sen}\alpha\ , \qquad (5.52)$$

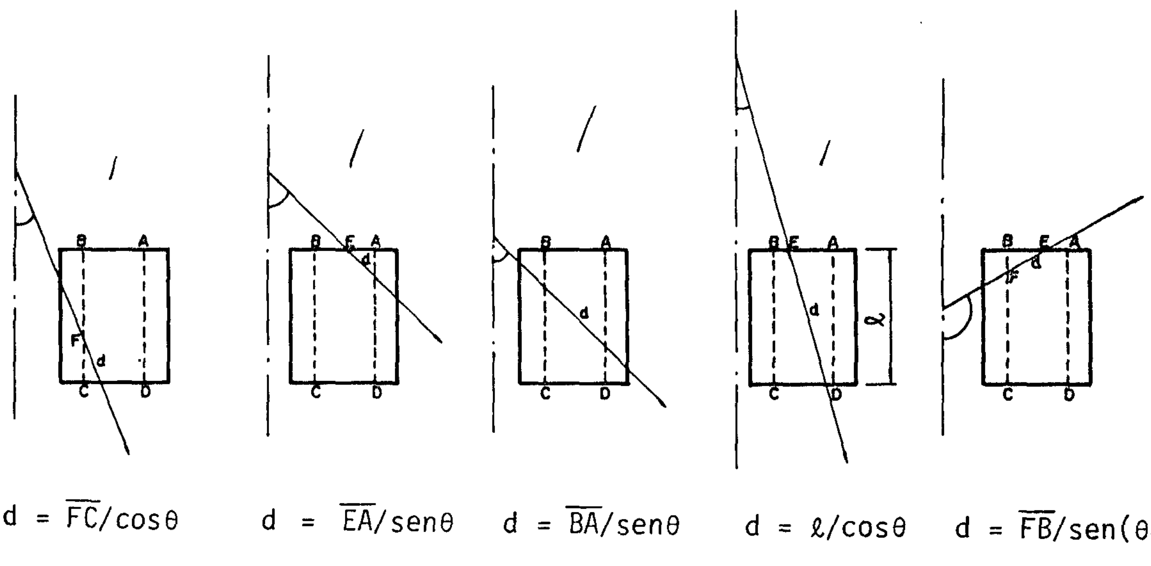
$$y_s = |h| / \tan(\theta - \pi/2)\ \cos\alpha - \rho\ , \qquad (5.53)$$

e $\qquad z_s = \ell\ .\qquad (5.54)$

Obviamente, para fontes tipo feixe paralelo, pode-se notar que $x_e = x_s = z_s = 0.0$, $y_e = y_s = \rho$ e $z_e = \ell$.

Portanto pôde-se notar que o fóton pode entrar por cima ou pelo lado do detetor e então poderia sair pelo fundo, pelo lado ou pelo topo do detetor. A Figura 5-5 ilustra estes cinco casos diferentes e as expressões para distância máxima que o fóton poderia percorrer dentro do detetor.

Determinados os pontos de entrada e saída e a distância máxima a percorrer no cristal, os cossenos diretores iniciais do fóton serão dados por:



$d = \overline{FC}/\cos\theta$ $\quad d = \overline{EA}/\mathrm{sen}\theta$ $\quad d = \overline{BA}/\mathrm{sen}\theta$ $\quad d = \ell/\cos\theta$ $\quad d = \overline{FB}/\mathrm{sen}(\theta-\pi)$

Figura 5-5. Possíveis trajetórias dos fótons e expressões para a distância máxima.

$$\cos\alpha = (x_s - x_e)/d , \tag{5.52}$$

$$\cos\beta = (y_s - y_e)/d , \tag{5.53}$$

e

$$\cos\gamma = (z_s - z_e)/d . \tag{5.54}$$

5-5. DETERMINAÇÃO DOS COEFICIENTES DE ATENUAÇÃO

As seções de choque macroscópicas, ou coeficientes de atenuação, para o efeito Compton e de formação de pares foram ajustadas por polinômios com coeficientes calculados por Avignone e Jeffreys /1/. A seção de choque para o efeito fotoelétrico também foi ajustada por polinômios utilizando o método dos mínimos quadrados com coeficientes calculados com base nos resultados da referência /37/. Os coeficientes destes polinômios estão ilustrados nas Tabelas 5-1, 5-2 e 5-3.

Estes coeficientes de atenuação para energias até 10 MeV, são fornecidos por uma subrotina de computador que executa o polinômio

$$\sigma = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^2 , \tag{5.55}$$

correspondente à energia corrente do fóton (x) , para cada um dos três efeitos.

TABELA 5-1. Coeficientes para o ajuste das seções de choque para o efeito fotoelétrico em cm^{-1}.

E (MeV)	a_o	a_1	a_2
0.01000	6.00×10^{2}	0.0	0.0
0.02000	1.9678×10^{3}	-1.9610×10^{5}	5.0792×10^{6}
0.03316	3.2876×10^{2}	-1.7647×10^{4}	2.4944×10^{5}
0.05000	5.9192×10^{2}	-2.1177×10^{4}	2.0146×10^{5}
0.08000	1.9245×10^{2}	-4.5083×10^{3}	2.7867×10^{4}
0.15000	4.8158×10^{1}	-6.6484×10^{2}	2.3685×10^{3}
0.30000	1.8023×10^{0}	-5.1592×10^{0}	-1.1034×10^{0}
0.50000	1.1126×10^{0}	-4.0767×10^{0}	3.9630×10^{0}
0.80000	0.3155×10^{0}	-0.7227×10^{0}	0.4434×10^{0}
1.50000	0.8093×10^{-1}	-0.1033×10^{0}	0.3570×10^{-1}
3.00000	0.1969×10^{-1}	-0.1206×10^{-1}	0.2060×10^{-2}
5.00000	0.6437×10^{-2}	-0.2012×10^{-2}	0.1850×10^{-3}
8.00000	0.2950×10^{-2}	-0.5380×10^{-3}	0.2997×10^{-4}

TABELA 5-2. Coeficientes para ajuste das seções de choque para efeito de produção de pares, em cm^{-1}.

E (MeV)	a_o	a_1	a_2
1.02200	0.0	0.0	0.0
1.28000	-2.15×10^{-4}	2.09×10^{-4}	0.0
3.00000	-1.33×10^{-2}	9.07×10^{-3}	1.07×10^{-3}
4.00000	-2.45×10^{-2}	1.84×10^{-2}	-8.00×10^{-4}
8.00000	-1.97×10^{-2}	1.66×10^{-2}	-6.33×10^{-4}
10.00000	3.12×10^{-2}	5.26×10^{-3}	0.0

TABELA 5-3. Coeficientes para ajuste das seções de choque para efeito Compton, em cm^{-1}.

E (MeV)	a_o	a_1	a_2	a_3
0.04000	6.30×10^{-1}	-2.46×10^{0}	9.94×10^{0}	0.0
0.15000	6.08×10^{-1}	-1.74×10^{0}	3.20×10^{0}	0.0
0.70000	5.10×10^{-1}	-7.31×10^{-1}	5.07×10^{-1}	0.0
3.50000	3.55×10^{-1}	-2.22×10^{-1}	7.72×10^{-2}	-1.02×10^{-2}
10.00000	1.67×10^{-1}	-2.60×10^{-2}	1.93×10^{-3}	-5.20×10^{-5}

5-6. DETERMINAÇÃO DA PROBABILIDADE DE INTERAÇÃO

Fótons que entram no detetor têm uma probabilidade de existência associada a um peso igual a 1,0 , ou seja, nesta fase de cálculos não é necessário considerar o fator geométrico. Este peso é reduzido após cada interação pela razão das seções de choque de espalhamento pela total, e pela probabilidade da interação ocorrer dentro do cristal. Uma história é considerada terminada apenas quando, ou o peso cair abaixo do valor préestipulado, 10^{-8}, ou a energia do fóton cair abaixo do valor também préestabelecido, 0.01 MeV . Estes valores indicam que um fóton com probabilidade de existência da ordem de 10^{-8}, pode ser considerado absorvido e, da mesma forma, fótons com energias menores que 0.01 MeV possuem uma probabilidade de absorção, através do efeito fotoelétrico, praticamente igual a 1 .

Para a amostragem de locais de interação, somente dentro do cristal (amostragem por importância), deve-se construir uma função distribuição modificada que poderá ser amostrada de acordo com a equação (4.22), isto é,

$$\xi = \int_0^{\ell} \sigma_t \, e^{-\sigma_t x} \, dx \Bigg/ \int_0^{d} \sigma_t \, e^{-\sigma_t x} \, dx \, , \qquad (5.56)$$

onde d é a distância que o fóton percorreria para fugir do cristal e σ_t é o coeficiente de atenuação linear total. Resolvendo esta equação e invertendo a função obtém-se

$$\ell = - \frac{1}{\sigma_t} \, \ell n \left[1 - \xi \left(1 - e^{-\sigma_t d} \right) \right] , \qquad (5.57)$$

onde ℓ representa a distância entre duas interações subsequentes. O peso associado com esta escolha será

$$w\ell = \int_0^d \sigma_t \, e^{-\sigma_t x} \Big/ \int_0^\infty \sigma_t \, e^{-\sigma_t x} \, dx \, , \tag{5.58}$$

ou

$$w\ell = 1 - e^{-\sigma_t d} \, . \tag{5.59}$$

Para forçar o fóton a sofrer somente colisões de espalhamento, também deve-se utilizar o mesmo raciocínio anterior, ou seja,

$$\xi = \int_0^{\sigma_c} \frac{dx}{\sigma_t} \Big/ \int_0^{\sigma_c} \frac{dx}{\sigma_t} = 1 \, , \tag{5.60}$$

onde σ_c é o coeficiente de atenuação linear para o espalhamento Compton. Portanto o fóton foi obrigado a espalhar com o peso associado

$$wc = \int_0^{\sigma_c} \frac{dx}{\sigma_t} \Big/ \int_0^{\sigma_t} \frac{dx}{\sigma_t} \tag{5.61}$$

ou

$$wc = \frac{\sigma_c}{\sigma_t} \tag{5.62}$$

5-7. DETERMINAÇÃO DA NOVA DIREÇÃO E ENERGIA APÓS O ESPALHAMENTO

Quando o fóton sofre uma interação Compton, a nova energia e a nova direção do fóton devem ser calculadas. Os locais das interações P_n e P_{n+1} são definidos por (x_n, y_n, z_n) e $(x_{n+1}, y_{n+1}, z_{n+1})$, onde n caracteriza a n-ésima interação. Portanto, as coordenadas da (n+1)-ésima interação são dadas por

$$x_{n+1} = \ell \cos\alpha + x_n \, , \tag{5.53}$$

$$y_{n+1} = \ell \cos\beta + y_n , \tag{5.64}$$

e
$$z_{n+1} = \ell \cos\gamma + z_n , \tag{5.65}$$

onde $\cos\alpha$, $\cos\beta$ e $\cos\gamma$ são os cossenos diretores da n-ésima interação. Obviamente para o cálculo das coordenadas do ponto da primeira interação são utilizadas as coordenadas do ponto de entrada do fóton dentro do detetor dadas pelas equações (5.40), (5.41) e (5.42), ou pelas equações (5.43), (5.44) e (5.45) e, da mesma forma os cossenos diretores iniciais dados pelas equações (5.52), (5.53) e (5.54).

A energia do fóton é reduzida de acordo com a seção de choque diferencial de Klein-Nishina que é amostrada de acordo com a técnica da rejeição (ver Apêndice B). O ângulo de espalhamento é calculado utilizando a lei do espalhamento Compton,

$$\cos\theta = 1 + 0.511/E_0 - 0.511/E_s , \tag{5.66}$$

onde E_0 é a energia do fóton antes do espalhamento e E_s a energia do fóton depois do espalhamento. O ângulo azimutal relativo a direção anterior é amostrado entre 0 e 2π , uma vez que o espalhamento Compton é azimutalmente simétrico, ou seja,

$$\phi = 2\pi\,\xi . \tag{5.67}$$

Portanto, os cossenos diretores do fóton emergente serão dados por

$$\cos\alpha' = \cos\alpha\cos\theta + (\cos\gamma\cos\alpha\,\mathrm{sen}\theta\cos\phi - \cos\beta\,\mathrm{sen}\theta\,\mathrm{sen}\phi)/(1-\cos^2\gamma)^{1/2}, \tag{5.68}$$

$$\cos\beta' = \cos\beta\cos\theta + (\cos\gamma\cos\beta\,\mathrm{sen}\theta\cos\phi + \cos\alpha\,\mathrm{sen}\theta\,\mathrm{sen}\theta)/(1-\cos^2\gamma)^{1/2}, \tag{5.69}$$

e $$\cos\gamma' = \cos\gamma\cos\theta - (1 - \cos^2\gamma)^{1/2} \operatorname{sen}\theta\cos\phi \ , \qquad (5.70)$$

e quando $(1 - \cos^2\gamma)$ aproxima-se de zero estas equações simplificam-se nas formas

$$\cos\alpha' = \operatorname{sen}\theta \cos\phi \ , \qquad (5.71)$$

$$\cos\beta' = \operatorname{sen}\theta \operatorname{sen}\phi \ , \qquad (5.72)$$

e $$\cos\gamma' = \cos\gamma \cos\phi \ . \qquad (5.73)$$

Calculada a nova direção, deve-se calcular a seguir a nova distância que o fóton pode percorrer dentro do cristal. Considerando o caso em que o fóton tende a sair pelo lado do detetor, esta distância pode ser encontrada resolvendo a equação para o círculo do cilindro circular reto acoplada com a equação da trajetória do fóton, isto é,

$$x_c^2 + y_c^2 = R^2 \ , \qquad (5.74)$$

e

$$d = \frac{x_c - x}{\cos\alpha} = \frac{y_c - y}{\cos\beta} = \frac{z_c - z}{\cos\gamma} \ , \qquad (5.75)$$

onde (x_c, y_c, z_c) são as coordenadas do ponto de saída lateral e (x,y,z) as coordenadas da última interação, R é o raio do detetor e d é a distância efetiva que se quer calcular. Fazendo

$$x_c = d \cos\alpha + x \ , \qquad (5.76)$$

$$y_c = d \cos\beta + y \ , \qquad (5.77)$$

e substituindo na equação (5.74) obtém-se

$$d^2(\cos^2\alpha + \cos^2\beta) + 2d(x \cos\alpha + y \cos\beta) + (x^2 + y^2 - R^2) = 0 \ , \qquad (5.78)$$

que é uma equação que pode ser solucionada para d. Esta equação possui uma raiz positiva que é a aceita, uma raiz negativa não aceita, e é indefinida quando $\cos\gamma = \pm 1$, o que é pouco provável. Para saber se o fóton saiu pelas laterais, ou não, deve-se calcular z_c e comparar com a altura do cristal, isto é

$$z_c = d \cos\gamma + z . \tag{5.79}$$

Se z_c não estiver nos limites do detetor, isto é, $0 \leq z_c \leq \ell$, então o fóton se dirige para a superfície superior ou para o fundo do detetor e, a distância efetiva neste caso será dada por

$$d = (\ell - z)/\cos\gamma , \tag{5.80}$$

ou

$$d = - z/\cos\gamma , \tag{5.81}$$

dependendo se a nova direção for positiva, ou seja, em direção ao topo, ou negativa (em direção ao fundo), respectivamente.

Com esta nova distância d repetem-se os cálculos anteriores até que o peso ou a energia do fóton caiam abaixo dos limites estabelecidos.

5-8. LEVANTAMENTO DO ESPECTRO

Pode-se notar, do item anterior, que desde que o fóton tenha entrado dentro do cristal, nunca lhe é permitido escapar ou ser absorvido. Por isso cada fóton carrega um peso que representa sua probabilidade de sobrevivência. Em cada colisão o fóton é obrigado a sofrer um espalhamento Compton, por isso seu peso corrente deve ser multiplicado pela probabilidade de espalhamento (σ_c/σ_t). Em seguida calcula-se a distância "d" para saída do fóton do detetor, e então amostra-se da fórmula do cálculo da distância entre colisões (Eq. 5.57), uma distância $\ell \leq d$. Portanto o peso corrente do fóton deve ser novamente multiplicado pelo fator $(1 - e^{-\sigma_t d})$ (Eq. 5.59), desde que não lhe é permitido escapar do detetor.

Através do procedimento acima é possível calcular contribuições para o espectro. Isto pode ser efetuado multiplicando o peso corrente do fóton antes de uma colisão pela sua probabilidade de escape $e^{-\sigma_t d}$, e então adiciona-se este produto no canal correspondente a energia total depositada no detetor até a última colisão que o fóton tenha sofrido. Neste caso, a energia depositada no cristal é igual a energia inicial do fóton menos a energia do fóton no instante da "fuga".

As contribuições adicionais necessárias para a determinação completa do espectro são obtidas fazendo com que cada colisão seja, primeiro, um efeito fotoelétrico, e depois um efeito de produção de pares (se a energia corrente do fóton é maior que 1.02 MeV), antes de obrigar a sobrevivência do fóton através do espalhamento Compton. Na simulação do efeito fotoelétrico, o peso do fóton, depois da colisão, é multiplicado pela probabilidade do fóton ter sofrido um efeito fotoelétrico nesta colisão (σ_f/σ_t), sendo este produto contado no canal correspondente a energia depositada. A energia depositada neste caso é a própria energia inicial do fóton. A contribuição proveniente do efeito de formação de pares é contada da mesma forma anterior, porém a perda de energia devido aos fótons de aniquilação deve ser calculada.

Para o cálculo da perda de energia devido ao efeito de formação de pares não são utilizadas técnicas de redução da variância, ou seja, para um dos fótons de aniquilamento são amostrados ângulos de emissão isotrópica utilizando as equações (4.31) e (4.32). Os cossenos diretores para um dos fótons de aniquilamento são calculados pelas equações (5.68), (5.69) e (5.70), e os cossenos diretores para o segundo fóton de aniquilamento são idênticos, porém de sinais contrários, dado que estes fótons são considerados emitidos com mesma direção e sentidos opostos. Em seguida, calculando-se a distância "d" para fuga do fóton, como visto anteriormente, amostra-se uma distância ℓ entre interações utilizando a equação (4.25), isto é,

$$\ell = -\frac{1}{\sigma_t} \ln \xi , \tag{5.82}$$

caso ℓ seja maior que d , isto significa que o fóton escapou do cristal e sua energia corrente é considerada perdida. Se o fóton interagiu dentro do cristal então amostra-se o tipo de interação através da distribuição de probabilidades

$$\xi = \int_0^x \frac{dx}{\sigma_t} , \tag{5.83}$$

ou
$$x = \xi\sigma_t , \tag{5.84}$$

esta distribuição pode ser interpretada, por exemplo, da seguinte forma: se $\xi \leq \sigma_f/\sigma_t$ isto implica que o fóton foi absorvido desde que

$$\frac{\sigma_f}{\sigma_t} + \frac{\sigma_c}{\sigma_t} = 1 , \tag{5.85}$$

caso contrário o fóton foi espalhado e então repete-se este procedimento de cálculo.

A energia absorvida neste caso é a energia inicial do fóton menos a energia perdida pelos dois fótons de aniquilamento. A quantidade que deve ser contada no canal correspondente a esta energia é o produto do peso corrente do fóton depois da colisão pela probabilidade da ocorrência do efeito de formação de pares (σ_p/σ_t).

5-9. CÁLCULO DAS EFICIÊNCIAS

A eficiência intrínseca é definida como a razão do número de gamas que interagiram pelo menos uma vez dentro do detetor pelo número total de gamas que entraram no detetor. Esta eficiência é calculada encontrando a média dos pesos de primeira interação dentro do detetor. Portanto

$$EI = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} w_{i1}\, w_i/\Omega \,, \qquad (5.86)$$

onde N é o número total de histórias, w_i é o peso geométrico e w_{i1} é o peso da primeira interação para cada história que é dado por $(1 - e^{-\sigma_t d})$. O desvio padrão de EI é dado por /2/

$$\sigma_{EI} = \left\{ \left[\frac{1}{N(N-1)} \right] \left(\sum_{i=1}^{N} w_i^2\, w_{i1}^2/\Omega^2 - N(EI)^2 \right) \right\}^{1/2} . \qquad (5.87)$$

A eficiência de fotopico é definida como a razão do número de gamas totalmente absorvidos no detetor pelo número total de gamas que entraram no detetor, e pode ser calculada somando os pesos para cada interação que resultariam na absorção total do fóton, ou seja,

$$EF = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} EF_i \; w_i/\Omega \; , \qquad (5.88)$$

onde EF_i é a probabilidade de absorção total para cada história e é calculada por /2/

$$EF_i = w_{i1} F_{i1} + \sum_{j=2}^{\nu} w_{ij} F_{ij} \prod_{j=2}^{\nu} w_{i(j-1)} c_{i(j-1)} + w_{i1} p_{i1} +$$

$$+ \sum_{j=\kappa}^{\eta} w_{ij} p_{ij} \prod_{j=2}^{\nu} w_{i(j-1)} c_{i(j-1)} \; , \qquad (5.89)$$

onde, i é o número de história, j o número da interação, e

F = razão das seções de choque fotoelétrica pela total,

c = razão das seções de choque Compton pela total,

p = razão das seções de choque de formação de pares pela total,

ν = número total de interações para i-ésima história,

κ = interações que no efeito de formação de pares o fóton perdeu toda sua energia para o cristal incluindo os fótons de aniquilamento,

η = número total das interações κ.

Analogamente o desvio padrão do EF é dado por /2/

$$\sigma_{EF} = \left[\frac{1}{N(N-1)} \left(\sum_{i=1}^{N} EF_i^{\,2} \; w_i^{\,2}/\Omega^2 - N(EF)^2 \right) \right]^{1/2} . \qquad (5.90)$$

A razão pico/total é um índice definido como

$$R = EI/EF \; , \qquad (5.91)$$

com desvio padrão

$$\sigma_R = \frac{EF}{EI} \left[\left(\frac{\sigma_{EF}}{EF} \right)^2 + \left(\frac{\sigma_{EI}}{EI} \right)^2 \right]^{1/2} . \qquad (5.92)$$

A eficiência intrínseca total da fonte que indica o número de fótons detectados por fóton emitido pela fonte, é dada por

$$EIG = \Omega \, EI \, , \tag{5.93}$$

com desvio padrão

$$\sigma_{EIG} = \left[\Omega^2 \, \sigma_\Omega^{\,2} + EI^2 \, \sigma_{EI}^2 \right]^{1/2} . \tag{5.94}$$

No Apêndice C é fornecido um diagrama de blocos do programa desenvolvido.

6. RESULTADOS E COMPARAÇÕES

Os resultados obtidos para eficiências intrīnseca total (EIT) possuem boa concordância com os resultados teóricos e experimentais publicados na literatura. Na Figura 6-1 estão representados os resultados obtidos para alguns casos particulares.

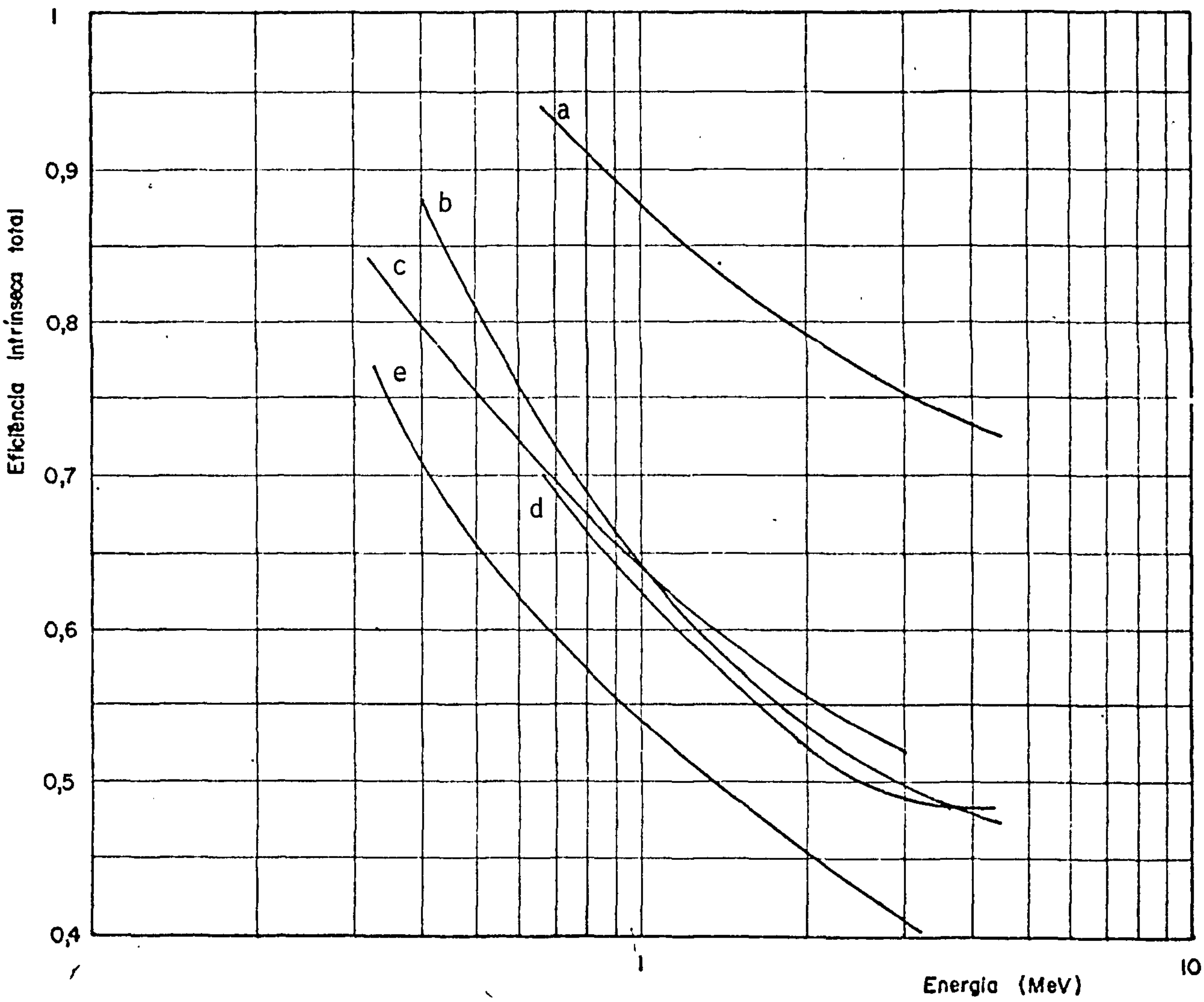


Figura 6-1. Eficiências intrīnseca total para as geometrias: a) feixe paralelo com 0.6 cm de diâmetro e cristal 5"×4"; b) feixe paralelo espalhado (diâmetro do feixe igual ao diâmetro do detetor) e cristal 2"×2"; c) fonte puntual a 15 cm do topo de um cristal 5"×4"; d) fonte puntual a 2.5 cm de um cristal 5"×5"; e) fonte puntual a 10 cm de um cristal 3"×3".

As eficiências de fotopico e as razões pico/total calculadas apresentam em geral valores maiores que os resultados teóricos e experimentais calculados na literatura. As discrepâncias existentes quanto aos dados experimentais podem ser justificadas principalmente devido ao fato de existirem dificuldades experimentais na avaliação precisa da radiação de fundo, no cálculo do fator de absorção no encapsulamento do cristal, bem como a dificuldade da avaliação dos efeitos causados pela presença de outros materiais no ambiente de deteção. As discrepâncias existentes quanto aos trabalhos teóricos são originadas devido a diferentes técnicas de cálculo utilizadas, aos diferentes valores dos coeficientes de atenuação e as aproximações e idealizações consideradas por cada autor em particular. A Tabela 6-1 descreve as principais características dos trabalhos experimentais utilizados para comparação /11/.

Em um trabalho experimental bastante extensivo Heath /14/ utilizou fontes puntuais para o levantamento de espectros e cálculo de eficiências para fontes de raios gama até 3.13 MeV. Os experimentos foram feitos em um ambiente de detecção especialmente preparado para minimizar os efeitos da radiação de fundo. As fontes foram preparadas também minimizando a quantidade de material presente no ambiente de deteção e, várias correções foram feitas no cálculo das eficiências. Desta maneira, os resultados obtidos por Heath estão entre os mais acurados publicados na literatura.

Os resultados obtidos por Jarczyk et al /17/ foram checados por três métodos experimentais independentes que são discutidos no referido trabalho /17/. Estes resultados fornecem uma boa comparação para fontes tipo feixe paralelo.

TABELA 6-1. Característica dos principais trabalhos experimentais publicados na literatura /12/.

A U T O R E S	Dimensões do cristal	Faixa de energia (MeV)	Tipos de fontes utilizadas	Incerteza nos resultados
Heath /14/	3"×3"	0.155 - 3.13	fonte puntual	——
Jarczyk et al /17/	2"×2" 3"×3" 5"×4"	0.661 - 10.83	feixe paralelo	8 - 12%
Green e Finn /13/	3"×3" 5"×4" 8"×4"	0.279 - 1.52	fonte puntual e fonte tipo disco	7%
Young et al /40/	5"×5"	0.432 - 9.17	fonte puntual	7%
Chinaglia e Malvano /6/	3"×3"	0.02 - 4.0	fonte puntual	2% E < 2.8 MeV

Green e Finn /13/ e Chinaglia e Malvano /6/ também fornecem bons resultados levando em consideração correções para o encapsulamento do cristal. Young et al /40/ fizeram medidas de razões pico/total porém não foram consideradas perdas de energia no encapsulamento do cristal.

6-1. COMPARAÇÃO DE EFICIÊNCIAS

Na Tabela 6-2 os resultados obtidos neste trabalho são comparados com os resultados de Zerby e Moran /43/, Miller e Snow /26/, Snyder /33/, Ramorino et al /11/ e Steyn et al /36/ e também com os dados experimentais de Heath /14/ e Chinaglia e Malvano /6/ para fontes puntuais a 10 cm do topo do cristal. É interessante notar a concordância dos resultados obtidos neste trabalho com os obtidos por Steyn et al quando não é considerado o encapsulamento do cristal.

A Tabela 6-3 mostra os resultados obtidos por este trabalho e compara-se com aqueles obtidos por Ramorino et al /11/ e Young et al /40/ para fontes puntuais a 2.5 cm do topo do cristal (5" × 5"). O incremento do erro em 4.43 MeV demonstra os efeitos da não consideração do transporte de elétrons e da radiação de freamento.

TABELA 6-2. Razão pico/total para um cristal de NaI (3"×3") com fonte puntual isotrópica a 10 cm do topo do cristal.

E (MeV)	ESTE TRABALHO	TEÓRICOS						EXPERIMENTAIS	
		Ref. 36 (a)	Ref. 36 (b)	Ref. 26	Ref. 43	Ref. 11	Ref. 33	Ref. 14	Ref. 6
0.323	0.845 ± 0.011	0.845	0.749	0.815	0.832	0.835	0.84	0.820	0.83
0.6616	0.574 ± 0.011	0.571	0.507	0.562	0.569	0.551	0.57	0.536	0.58
0.835	0.508 ± 0.011	0.500	0.449	—	—	—	—	0.474	—
1.275	0.413 ± 0.010	0.402	0.365	—	0.341	—	0.35	—	—
1.382	0.403 ± 0.010	—	—	0.392	0.326	—	—	0.357	—
1.78	0.345 ± 0.009	—	—	—	0.286	—	—	0.295	—
2.75	0.262 ± 0.008	0.268	0.251	0.254	0.196	0.229	0.22	0.225	0.21
3.13	0.250 ± 0.007	—	—	0.233	0.165	0.200	0.21	0.207	0.19

(a) considerando o encapsulamento do cristal

(b) não considerando o encapsulamento do cristal

TABELA 6-3. Razão pico/total para um cristal de NaI (5"×5") com fonte puntual isotrópica a 2.5 cm.

ENERGIA (MeV)	ESTE TRABALHO	Ref. /11/ (teórico)	Ref. /40/ (experimental)
0.661	0.674 ± 0.011	0.653	0.569
2.31	0.368 ± 0.01	0.377	0.338
4.43	0.333 ± 0.01	0.255	0.231

Na Tabela 6-4 compara-se os resultados obtidos com os resultados experimentais obtidos por Green e Finn /13/ e os resultados teóricos obtidos por Ramorino et al /11/ e Weitkamp /38/. Nesta tabela considera-se fonte puntual a 15 cm do topo de um detetor de NaI (5"×4"). Os dados fornecidos por Weitkamp /38/ são retirados da referência /11/.

TABELA 6-4. Eficiência de fotopico para um cristal de NaI (5"×4") com fonte puntual isotrópica a 15 cm.

E (MeV)	ESTE TRABALHO	Ref. /11/	Ref. /38/	Ref. /13/
0.323	0.743 ± 0.006	0.727	0.75	0.778
0.662	0.486 ± 0.007	0.472	0.53	0.454
1.079	0.369 ± 0.006	0.337	0.40	0.312
1.52	0.289 ± 0.006	0.265	0.29	0.260

Nas Tabelas 6-5 e 6-6 são comparados os resultados obtidos utilizando fonte tipo feixe paralelo. Os dados experimentais são fornecidos por Jarczyk et al /17/, e os teóricos fornecidos por Ramorino et al /11/ e Miller e Snow /27/. A Tabela 6-5 trata-se de um feixe paralelo espalhado (raio do feixe igual ao raio do cristal) e um detetor 2"×2". A Tabela 6-6 trata-se de um feixe paralelo com diâmetro de 0.6 cm e um detetor 5"×4".

TABELA 6-5. Eficiência de fotopico para um cristal de NaI (2"×2") com fonte tipo feixe paralelo espalhado.

E (MeV)	ESTE TRABALHO	Ref. /11/	Ref. /27/	Ref. /17/
0.661	0.363 ± 0.005	0.345	0.360	0.300
1.33	0.181 ± 0.003	0.171	0.182	0.155
2.68	0.098 ± 0.002	0.079	0.096	0.078
4.43	0.066 ± 0.002	0.040	0.052	0.036

TABELA 6-6. Razão pico/total para um cristal de NaI (5"×4") com fonte tipo feixe paralelo com 0.6 cm de diâmetro.

E (MeV)	ESTE TRABALHO	Ref. /11/	Ref. /27/	Ref. /17/
0.662	0.744 ± 0.006	0.805	0.819	0.74
1.33	0.609 ± 0.007	0.632	0.651	0.55
2.62	0.480 ± 0.006	0.474	0.510	0.41
4.43	0.429 ± 0.006	0.375	0.447	0.31

Na Tabela 6-7 compara-se os resultados obtidos utilizando fonte tipo disco com os resultados obtidos por Green e Finn /13/ e Miller et al /27/. A fonte tem 8" de diâmetro e está localizada a 15,24 cm de um detetor 8"×4".

TABELA 6-7. Eficiência de fotopico para um cristal de NaI (8"×4") com fonte tipo disco paralelo.

E (MeV)	ESTE TRABALHO	Ref. /27/	Ref. /13/
0.279	0.846 ± 0.012	0.828	——
0.601	0.588 ± 0.011	0.574	0.55
1.33	0.402 ± 0.009	0.384	0.36
2.62	0.266 ± 0.007	0.288	——

Para fontes puntuais localizadas fora do eixo do detetor os resultados obtidos são comparados com os resultados experimentais e teóricos obtidos por Beam et al /2/ utilizando um detetor 2"×2" e uma fonte de ^{137}Cs (0.662 MeV) colocada em várias posições em relação ao cristal. A Tabela 6-8 ilustra estes resultados sendo que os dados estão normalizados para a fonte localizada no eixo do detetor.

TABELA 6-8. Eficiências para cristal "2 2" com fonte pontual de ^{137}Cs. Os dados estão normalizados para fonte no eixo do cristal.

Ângulo	ρ(cm) / h(cm)	Eficiência intrínsica relativa de fonte experim.	Beam et al	Este Trab.	Eficiência fotopico relativa de fonte exper.	Beam	Este Trab.
0^o	0 / 45.0	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
30^o	22.5 / 39.0	1.136	1.057	1.083	1.061	1.077	1.073
45^o	31.8 / 31.8	1.201	1.123	1.116	1.109	1.102	1.114
60^o	39.0 / 22.5	1.276	1.172	1.165	1.158	1.118	1.140
90^o	45.0 / 0	1.320	1.220	1.194	1.197	1.201	1.178
0^o	0 / 15.0	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
30^o	7.5 / 13.0	1.051	1.034	1.059	1.046	1.042	1.044
45^o	10.6 / 10.6	1.151	1.099	1.134	1.130	1.071	1.145
60^o	13.0 / 7.5	1.244	1.215	1.204	1.213	1.177	1.185
90^o	15.0 / 0	1.557	1.414	1.393	1.483	1.364	1.390

6-2. COMPARAÇÕES DOS ESPECTROS LEVANTADOS

Nas Figuras 6-2, 6-3 e 6-4 estão representados os espectros teóricos levantados por Zerby e Moran /43/ (linha cheia) e, os resultados obtidos neste trabalho (pontos). É interessante notar o comportamento das discrepâncias nas contagens sobre a cauda Compton com o aumento de energia da fonte. Este comportamento é devido aos diferentes valores de seções de choque utilizados, a consideração da radiação de freamento por Zerby /2/ e, neste caso, principalmente devido as diferenças nos modelos de cálculo utilizados.

É interessante ressaltar que os resultados para os espectros contínuos encontrados por Zerby e Moran /43/, e mostrados nas Figuras 6-2, 6-3 e 6-4, foram obtidos por ajustes empíricos a dados de pontos discretos como os reportados neste trabalho, e desta forma as curvas suaves, representando os espectros, não devem ser consideradas mais acuradas que os pontos calculados. Mais além, os primeiros canais (aproximadamente 5), obtidos neste trabalho, não devem ser considerados corretos devido as dificuldades de espalhamento do histograma nesta região. Finalmente, as comparações foram realizadas com resoluções dos espectros que mais se aproximaram as reportadas por Zerby e Moran /43/ e Heath /14/.

As Figuras 6-5, 6-6, 6-7 e 6-8 representam comparações entre os espectros obtidos neste trabalho e os espectros experimentais levantados por Heath /14/. As discrepâncias encontradas são devido as idealizações e aproximações utilizadas no modelo de cálculo e, as dificuldades experimentais para obtenção do espectro. As afirmativas acima encontram-se discutidas no texto.

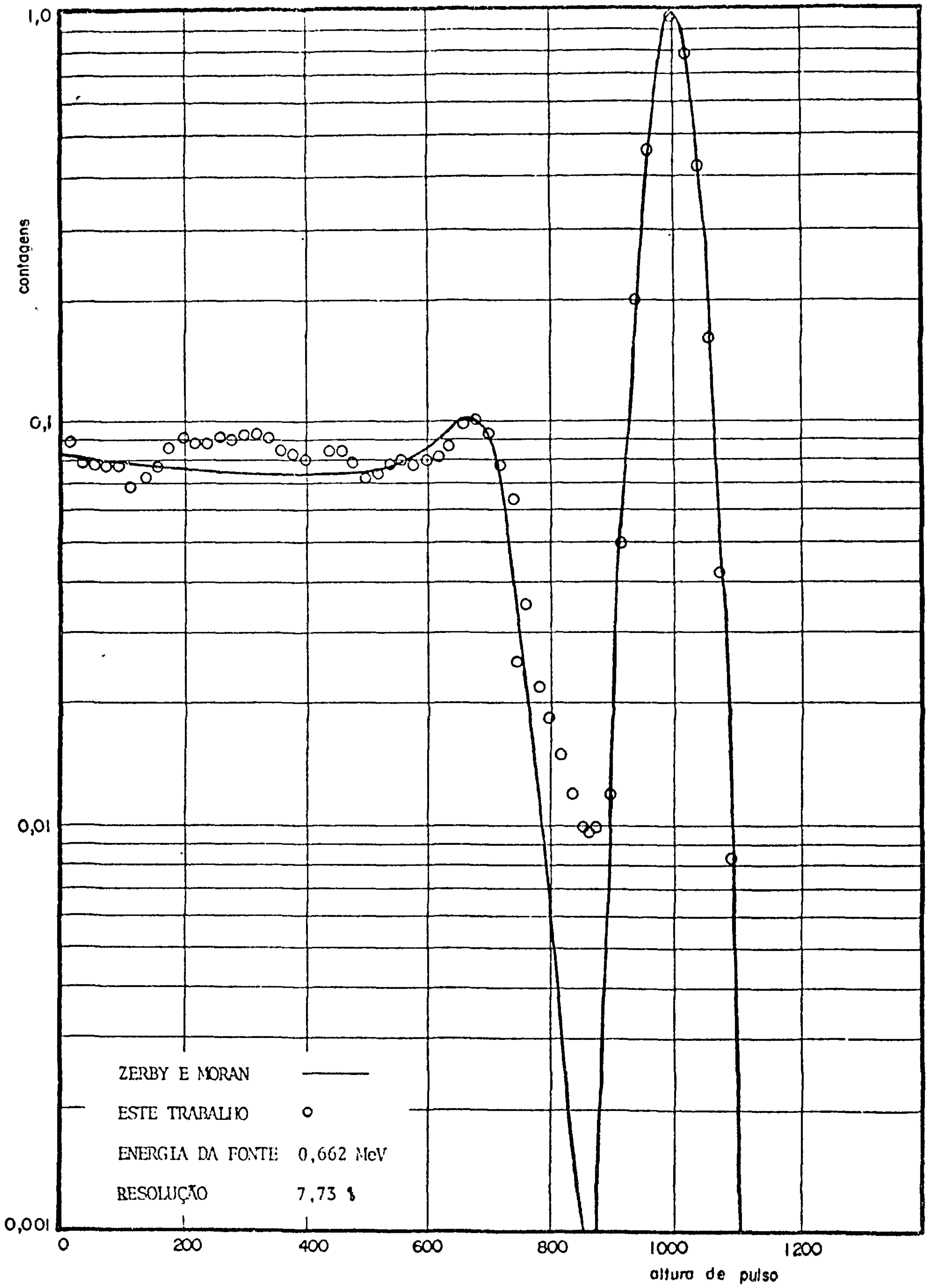


Figura 6-2. Comparação dos resultados obtidos para o ^{137}Cs, com fonte puntual a 10 cm do topo do cristal (3"×3"), com os resultados obtidos por Zerby e Moran /43/.

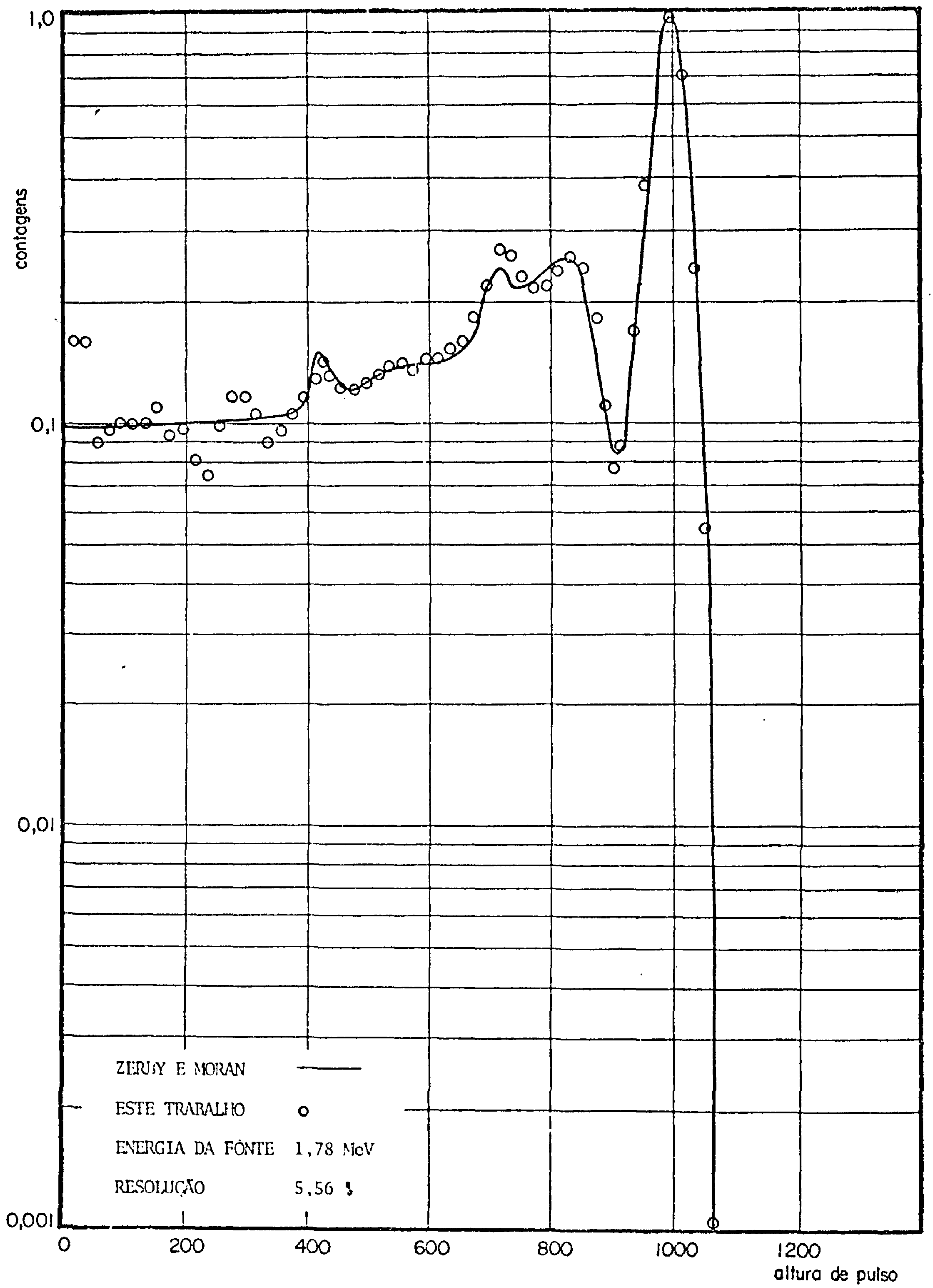


Figura 6-3. Comparação dos resultados obtidos para o ^{28}Al, com fonte puntual a 10 cm do topo do cristal (3"×3"), com os resultados obtidos por Zerby e Moran /43/.

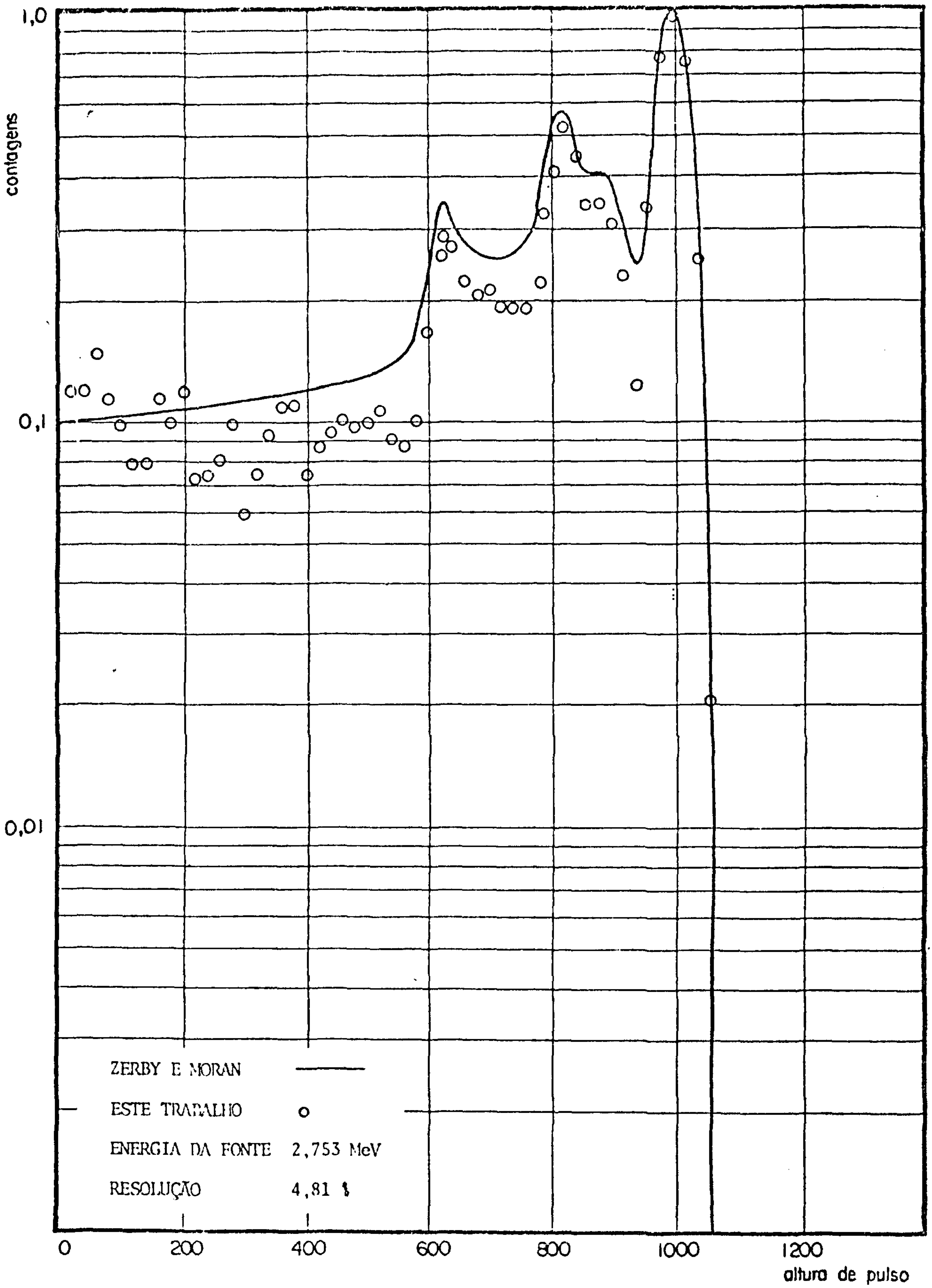


Figura 6-4. Comparação dos resultados obtidos para energia de 2.753 MeV, com fonte puntual a 10 cm do topo do cristal (3"x3"), com os resultados obtidos por Zerby e Moran /43/.

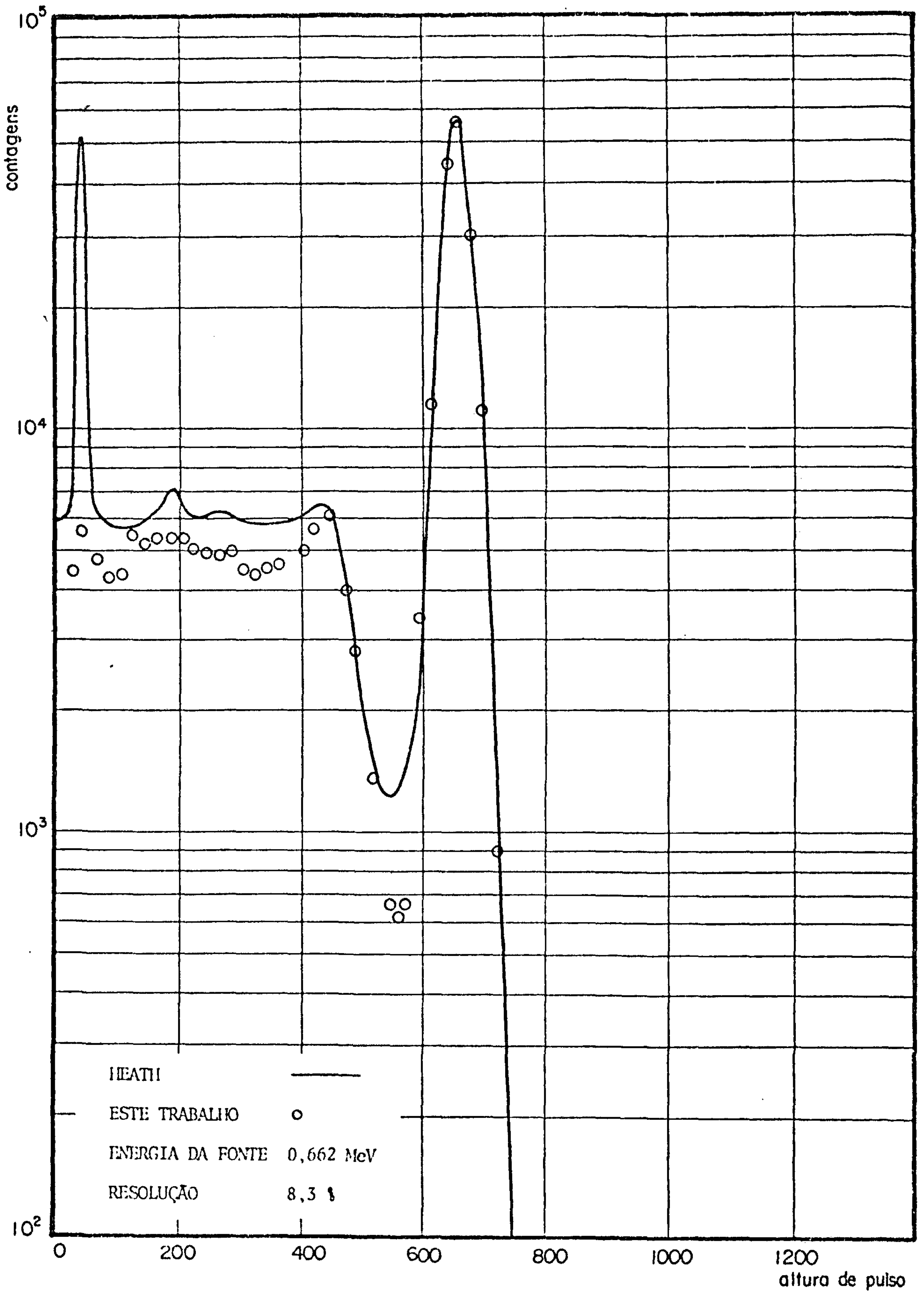


Figura 6-5. Comparação dos resultados obtidos para o ^{137}Cs, com fonte puntual a 10 cm do topo do cristal (3"×3"), com os resultados obtidos por Heath /14/.

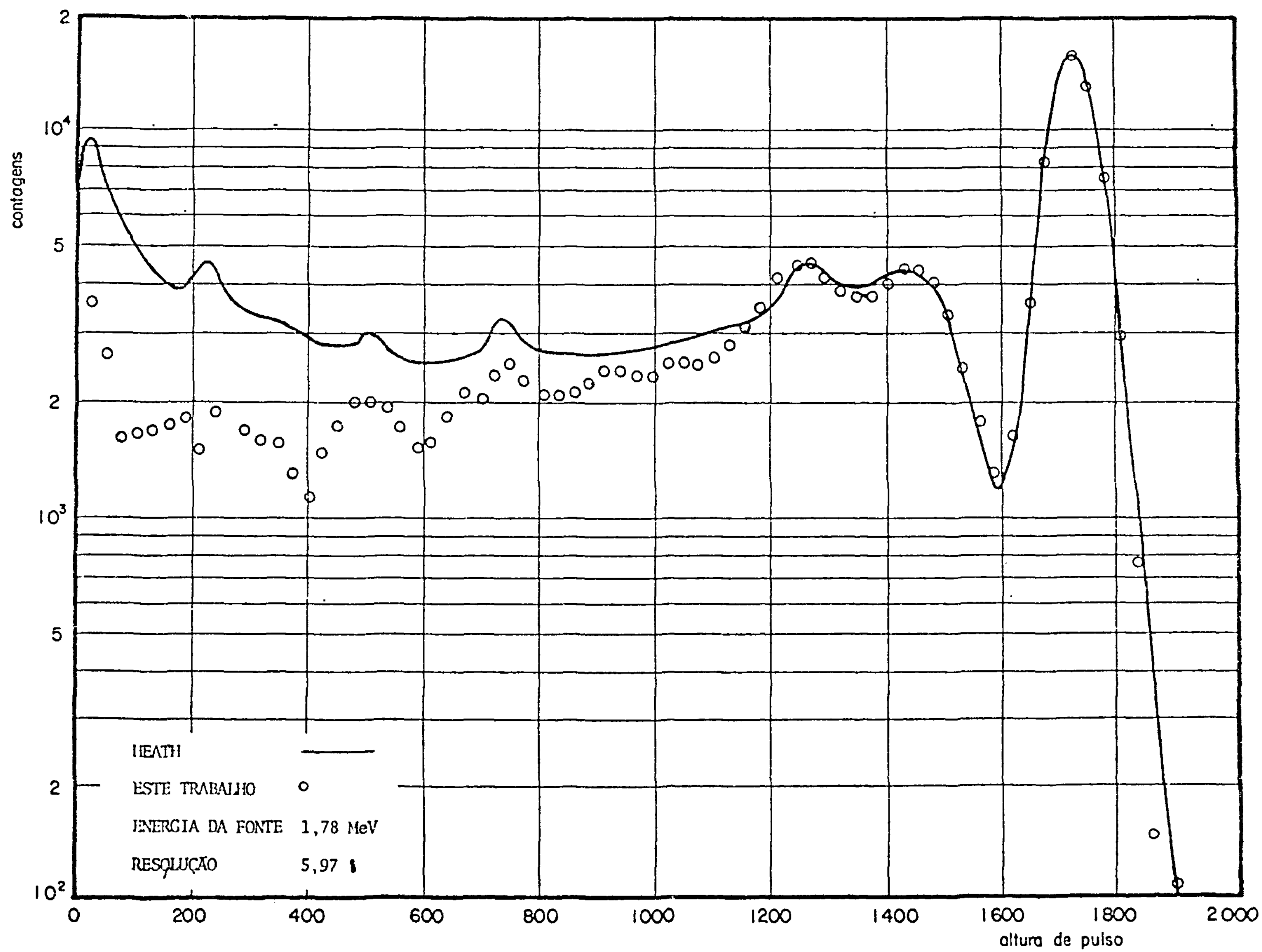


Figura 6-6. Comparação dos resultados obtidos para o $^{28}A\ell$, com fonte puntual a 10 cm do topo do cristal (3"×3"), com os resultados obtidos por Heath /14/.

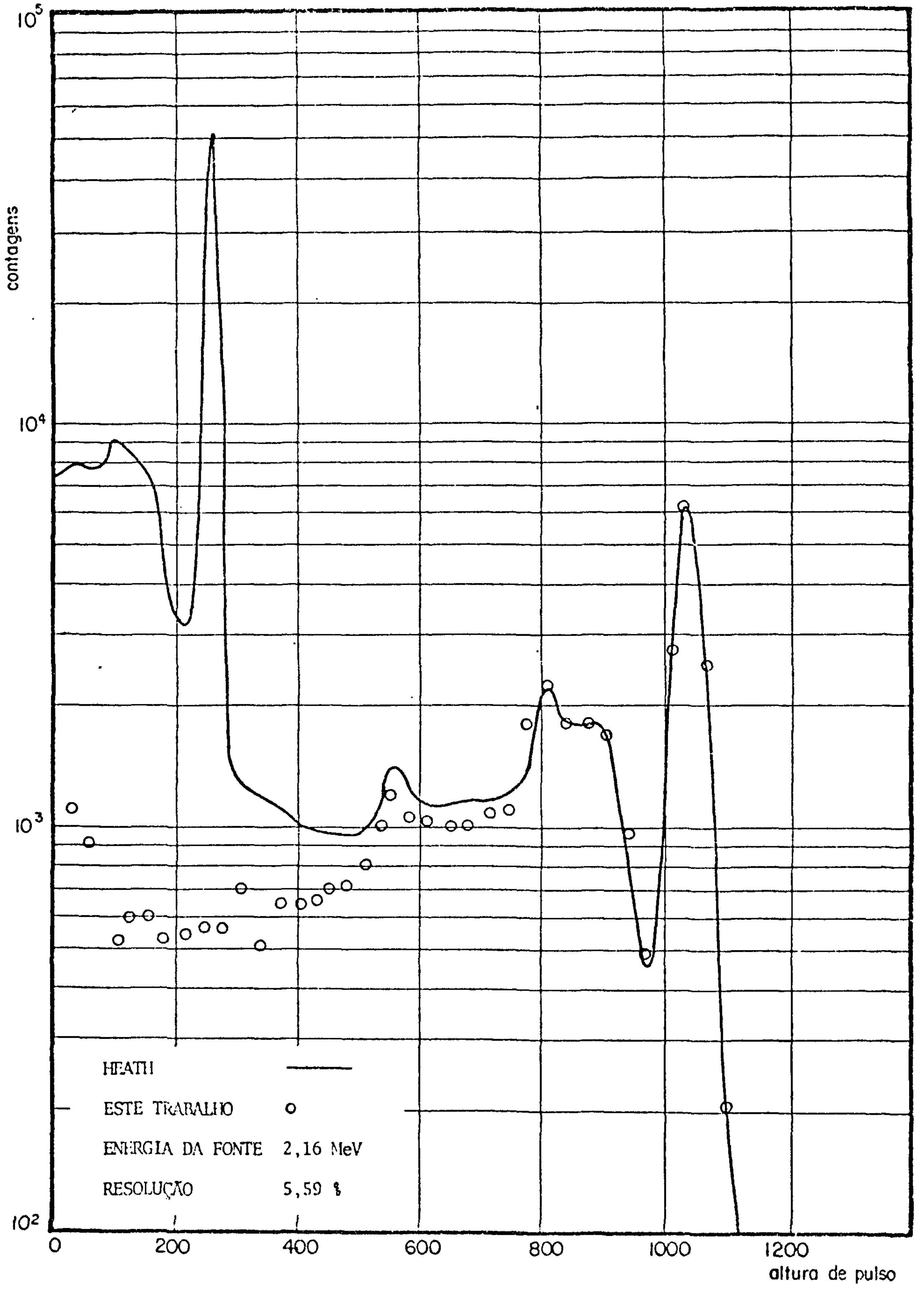


Figura 6-7. Comparação dos resultados obtidos para o ^{38}K, com fonte puntual a 10 cm do topo do cristal (3"×3"), com os resultados obtidos por Heath /14/.

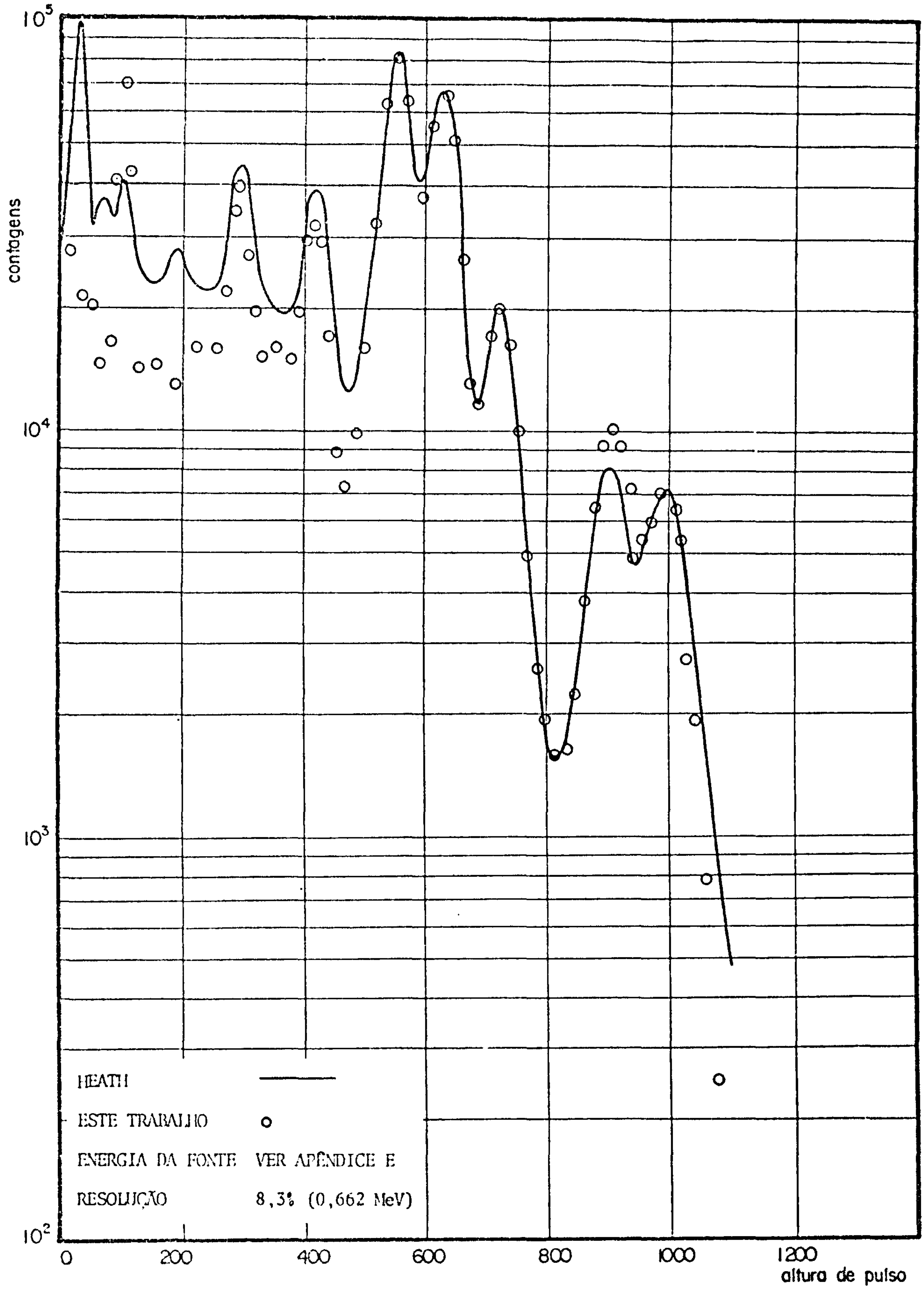


Figura 6-8. Comparação dos resultados obtidos para o ^{138}Pm(M), com fonte puntual a 10 cm do topo do cristal (3"×3"), com os resultados obtidos por Heath /14/.

7. CONCLUSÕES E SUGESTÕES

Os resultados obtidos para as eficiências calculadas, para a razão pico/total e para os espectros de deposição de energia têm uma boa concordância com os resultados teóricos e experimentais publicados na literatura. Estes resultados justificam a utilização deste trabalho, para o cálculo de eficiências e levantamento de espectros, dentro da faixa de energia recomendada (0.15 < E < 3 MeV).

A extensão deste trabalho com a inclusão do efeito da radiação de freamento (bremsstrahlung), com considerações sobre o transporte de elétrons, com a inclusão dos efeitos de baixa energia como por exemplo o raio-X característico do Iodo, com a consideração da presença do encamisamento do cristal e ainda a inclusão de outros tipos de fonte como por exemplo, fontes volumétricas, certamente aumentariam a faixa de energia para sua utilização, bem como uma maior versatilidade de aplicação e uma maior precisão nos resultados obtidos.

Também poderia-se incluir outros tipos de detetores como por exemplo os detetores de CsI e de Germânio puro. Poderia-se também fazer considerações sobre o retro espalhamento e a radiação de fundo nos ambientes de detecção, ou ainda, um tratamento mais acurado na seção de choque diferencial de espalhamento, e desta forma, a discrepância entre os resultados teóricos e experimentais com certeza diminuiriam.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. AVIGNONE III, F.T. & JEFFREYS, J.A. Empirical polynomials for computing gamma-ray interaction cross section and coefficients in Ge and NaI(Tℓ). Nucl. Instrum. Meth., 179: 159-62, 1981.

2. BEAM, G.B.; WIELOPOLSKI, L.; GARDNER, R.; VERGHESE, K. Monte Carlo calculation of efficiencies of right circular cylindrical NaI detectors for arbitrarily located point sources. Nucl. Instrum. Meth., 154:501-8, 1978.

3. BERGER, M.J. & SELTZER, S.M. Response functions for sodium iodide scintillation detectors. Nucl. Instrum. Meth., 104: 317-32, 1972.

4. CARTER, L.L. & CASHWELL, E.D. Particle transport simulation with the Monte Carlo method. Oak Ridge, Tn., USERDA, 1975.

5. CASHWELL, E.D. & EVERETT, C.J. A practical manual on the Monte Carlo method for random walk problems. New York, Pergamon, 1959.

6. CHINAGLIA, B. & MALVANO, R. Efficiency calibration of 3"×3" NaI(Tℓ) crystals. Nucl. Instrum. Meth., 45: 125-32, 1966.

7. CROUTHAMEL, C.E. Applied gamma-ray spectrometry. Oxford, Pergamon, 1970. (International series of monographs in analytical chemistry, 41)

8. EVANS, R.D. The atomic nucleus. New York, MsGraw-Hill, 1955.

9. EVERETT, C.J. & CASHWELL, E.D. Approximation for the inverse of the Klein-Nishina probability distribution. Los Alamos N.M. Los Alamos Scientific Lab., 1920. (LA-3839)

10. FRANZEN, H.R.; MAFRA, O.Y.; BIANCHINI, F.G. Monte Carlo calculation of monochromatic gamma-rays energy loss application for NaI(Tℓ) crystals. São Paulo, Instituto de Energia Atômica, Ago. 1968. (IEA-Pub-171)

11. GIANNINI, M.; OLIVA, P.R.; RAMORINO, M.C. Monte Carlo calculation of the energy loss spectra for gamma rays in cylindrical NaI(Tℓ) crystals. Nucl. Instrum. Methods, 81: 104-8, 1970.

12. GIANNINI, M.; OLIVA, P.; RAMORINO, M.C. Monte Carlo calculation of the energy loss spectra for gamma rays in cylindrical NaI(Tℓ) crystals. Roma, Comitato Nazionale Energia Nucleare, Feb. 1969. (RT/FI(69)15).

13. GREEN, R.M.; FINN, R.J. Photopeak efficiencies of NaI(Tℓ) crystals. Nucl. Instrum. Meth., 34: 72-6, 1965.

14. HEATH, R.L. Scintillation spectrometry gamma-ray spectrum catalogue. Idaho, Phillips Petroleum, Aug. 1964. (IDO-16880)

15. HEHL, W.S.C. FRENAI: um programa para o cálculo de função de resposta de um cristal de iodeto de sódio para raios gama mono energéticos. São Paulo, Instituto de Energia Atômica, Out. 1967. (IEA-Pub-151).

16. HEITLER, W. The quantum theory of radiation. Oxford, Clarendon, 1954.

17. JARCZYK, L.; KNOEPFEL, H.; LANG, J.; MULLER, R.; WOLFLI, W. Photopeak efficiency and response function of various NaI(Tℓ) and CsI(Tℓ) crystals in the energy range up to 11 MeV. Nucl. Instrum. Meth., 17: 310-20, 1962.

18. KAHN, H. Applications of Monte Carlo. Santa Monica, Calif., Rand Corporation, 1956. (AECU-3259)

19. KELLY, L.G. Handbook of numerical methods and applications. Massachussets, Addison-Wesley, 1967.

20. McLAREN, M.D. & MARSAGLIA, G. Uniform random number generators. J. Ass. comput. Mach., 12(1): 83-9, 1965.

21. MAIORINO, J.R. Blindagem para reatores nucleares. São Paulo, IPEN 1980. (Notas de aula)

22. MARMIER, P. & SHELDON, E. Physics of nuclear and particles. New York, Academic, 1969. V. 1.

23. MARSHALL, J.D. X-ray spectra calculations for complex detector geometries. Trans. Amer. Nucl. Soc., 13: 873, 1970.

24. MARTIN, I.M.; DUTRA, S.L.G.; PALMEIRA, R.A.R. Méthode de Monte Carlo apliquée au calcul de la perte d'énergie d'un flux isotope de rayons gamma dans un scintillateur cylindrique de NaI(Tℓ) dans l'intervale d'énergie 0,5-20 MeV. Rev. Bras. Fis., 5(1): 75-99, 1975.

25. METROPOLIS, N. & ULAM, S. The Monte Carlo method. J. Amer. Statistical Soc., 44(247): 335-41, 1949, apud SHREIDER, Y.A. Method of statistical testing. Amsterdan Elsevier, 1964. pg. 7.

26. MILLER, W.F. & SNOW, W.J. Monte Carlo calculations of energy loss spectra for gamma rays in sodium iodide and cesium iodide. Argonne, Ill., Argonne National Lab., Feb. 1961. (ANL-6318)

27. MILLER, W.F.; REYNOLDS, J.; WILLIAM, J.S. Efficiencies and photofractions for gamma radiation on sodium iodide (thallium activated) crystals. Argonne, Ill., Argonne National Lab., Aug. 1958. (ANL-5902)

28. NAKAMURA, T. Monte Carlo calculation of efficiencies and response functions of NaI(Tℓ) crystals for thick disk gamma ray sources and its applications to Ge(Li) detectors. Nucl. Instrum. Meth., 105: 77-89, 1972.

29. NARDI, E. A note on Monte Carlo calculations in NaI crystals. Nucl. Instrum. Meth., 83: 331, 1970.

30. PRICE, J. Nuclear radiation detection. 2ª ed. New York, McGraw-Hill, 1964.

31. SHIMIZU, T. Simulação em computador digital. São Paulo, Edgar Bluecher, 1975.

32. SHREIDER, Y.A. Method of statistical testing. Amsterdan, Elsevier, 1964.

33. SNYDER, B.J. Comparison of calculated and experimental scintillation crystal photofractions. Nucl. Instrum. Meth., 46: 173-6, 1967.

34. SNYDER, B.J. & KNOLL, G.F. Calculated gamma ray photofractions for well-type scintillation detectors. Nucl. Instrum. Meth., 40: 261-6, 1966.

35. SPANIER, J. & GELBARD, E.M. Monte Carlo principles and neutron transport problems. Massachusets, Addison-Wesley, 1969.

36. STEYN, J.J.; HUANG, R.; HARRIS, D.W. Monte Carlo calculation of clad NaI(Tℓ) scintillation crystal response to gamma photons. Nucl. Instrum. Meth., 107: 465-75, 1973.

37. STORM, E. & ISRAEL, H.I. Photon cross section from 0.001 to 100 MeV for elements 1 through 100. Los Alamos, New Mexico, Los Alamos Sci. Lab., 1974. (LA-3753).

38. WEITKAMP, C. Monte Carlo calculation of photofractions and intrinsic efficiencies of cylindrical NaI(Tℓ) scintillation detectors. Nucl. Instrum. Meth., 23: 13-18, 1963.

39. WIELOPOLSKI, L. The Monte Carlo calculation of the average solid angle subtended by a right circular cylinder from distributed sources. Nucl. Instrum. Meth., 143: 517-81, 1977.

40. YOUNG, F.C.; HEATON, H.T.; PHILLIPS, G.W.; FORSYTH, P.D.; MARION, J.B. Peak-to-total ratios and efficiencies for a 5 in dia by 5 in NaI crystal. Nucl. Instrum. Meth., 44: 109-13, 1966.

41. ZERBY, C.D. A Monte Carlo calculation of the response of gamma-ray scintillation counters. Methods Comput. Phys., 1: 89-134, 1963.

42. ZERBY, C.D. & MORAN, H.S. Bremsstrahlung spectra in NaI and air. Oak Ridge, Tn., Oak Ridge National Lab., May 1958. (ORNL-2454)

43. ZERBY, C.D. & MORAN, H.S. Calculation of the pulse-height response of NaI(Tℓ) scintillation counters. Oak Ridge, Tn., Oak Ridge National Lab., Jan. 1962. (ORNL-3169)

44. ZERBY, C.D. & MORAN, H.S. Calculation of the pulse height responde of NaI(Tℓ) scintillation counters. Nucl. Instrum. Meth., 14: 115-24, 1961.

APÊNDICE A

A. ALARGAMENTO DO ESPECTRO

O fotopico em um espectro de deposição de energia possui um espalhamento estatístico em torno da energia do pico, que é originário de flutuações estatísticas nos vários processos que determinam a contagem final. Este alargamento é devido basicamente a três motivos principais. O primeiro é a flutuação estatística na quantidade de luz produzida por unidade de energia absorvida no cristal. O segundo é a flutuação estatística na transferência desta luz, incluindo a fuga do cristal, a captação no acoplamento óptico, a conversão fotoelétrica no fotocatodo e a captação dos fotoelétrons no primeiro dinodo da fotomultiplicadora. O terceiro motivo é também a flutuação estatística na multiplicação dos elétrons na fotomultiplicadora /30/.

A largura do fotopico determina a resolução do aparelho, isto é, a sua capacidade de distinguir entre duas energias quase iguais. Quantitativamente a resolução é definida como

$$R = \frac{w}{H_o} \times 100\% , \qquad (A.1)$$

onde w é a largura do pico na metade de sua altura máxima em unidade de energia ou de altura de pulso e H_o é a energia do pico ou a sua altura máxima (Figura A-1), sendo esta uma função da energia do raio gama.

Este alargamento pode ser aproximado por uma dependência gaussiana dada por:

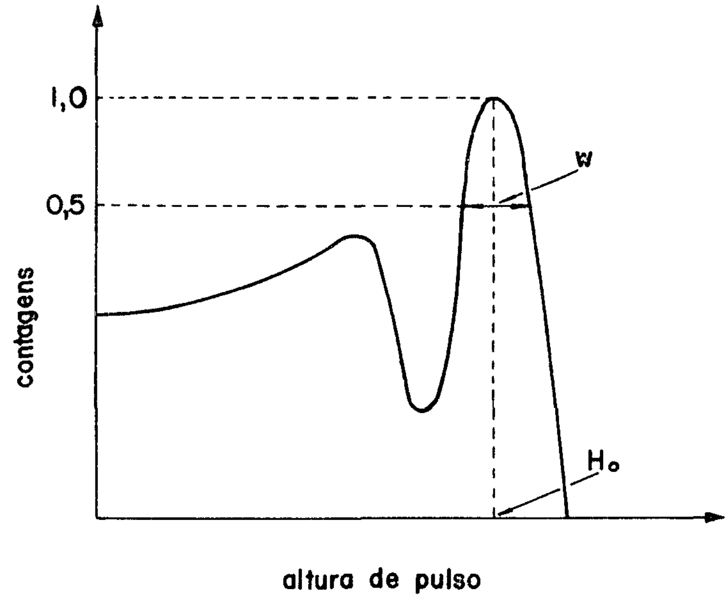


Figura A-1.
Cálculo da Resolução.

$$f(E,E')\,dE = \frac{1}{\sqrt{2\pi\,\sigma^2}}\,\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{E-E'}{\sigma}\right)^2\right] dE \,. \quad (A.2)$$

Análises de dados experimentais indicam que o σ da equação (A.2), o qual possui uma dependência em E', pode ser ajustado pela seguinte expressão /3/:

$$\sigma = K(E')^n \,, \quad (A.3)$$

onde n é aproximadamente igual a 2/3 e K é calculado também experimentalmente. Porém em calculos teóricos pode-se levantar espectros com qualquer resolução, ou seja, se um determinado problema proposto deve levantar um espectro com resolução de 8,3% e sabendo que o parâmetro σ está relacionado com a resolução por

$$w = 2.35\,\sigma \,, \quad (A.4)$$

encontra-se o σ para este caso como

$$\sigma = \frac{0.083}{2.35}\,E^{2/3} \,. \quad (A.5)$$

Estas duas observações, i.é, que o alargamento do espectro ajusta-se bem com uma distribuição gaussiana, e que a fórmula empírica do parâmetro σ dependente da energia está bem estabelecida, indicam que pode-se assumir uma resposta única do detetor para uma determinada energia depositada, depois de efetuados os cálculos principais, o efeito do alargamento. Foi feita uma subrotina especialmente para este propósito (ver Apêndice D).

APÊNDICE B

B. AMOSTRAGEM DA FÓRMULA DE KLEIN-NISHINA

Neste trabalho assume-se que os fótons são não polarizados, porém, como já foi mencionado anteriormente, o fóton primário não polarizado proveniente da fonte, após algumas interações, tende a possuir uma determinada direção de polarização. Não é feita nenhuma análise para a averiguação do erro introduzido com esta aproximação.

A fórmula de Klein-Nishina para o espalhamento de um fóton não polarizado com energia adimensional $\alpha = E/mc^2$, por um elétron livre em repouso, com um ângulo de espalhamento θ e $\theta + d\theta$ é dada por /9/

$$\sigma(\alpha,\mu)\, d\mu = \pi r_o^2 \left(\frac{\alpha'}{\alpha}\right)^2 \left[\frac{\alpha}{\alpha'} + \frac{\alpha'}{\alpha} + \mu^2 - 1\right] d\mu \,, \qquad -1 \leq \mu \leq 1 \tag{B.1}$$

onde $\mu = \cos\theta$, $\alpha' = \alpha/[1 + \alpha(1-\mu)]$ e r_o é o raio clássico do elétron. Definindo $x = \alpha'/\alpha$, obtém-se

$$\mu = 1 + \frac{1}{\alpha} - \frac{1}{\alpha x} \,, \tag{B.2}$$

$$\frac{d\mu}{dx} = \frac{1}{\alpha x^2} \,, \tag{B.3}$$

e portanto

$$\sigma(\alpha,x)\, dx = \pi r_o^2 \frac{1}{\alpha} \left(x + \frac{1}{x} + \mu^2 - 1\right) dx \,, \quad \frac{1}{1+2\alpha} \leq x \leq 1 \tag{B.4}$$

com a função distribuição de probabilidade associada

$$p(x)\ dx = \frac{f(x)}{G}\ dx\ , \tag{B.5}$$

onde

$$f(x) = x + \frac{1}{x} + \mu^2 - 1\ , \tag{B.6}$$

e

$$G = \int_{\frac{1}{1+2\alpha}}^{1} f(x)\ dx\ . \tag{B.7}$$

Para a aplicação da técnica da rejeição para a amostragem desta f.d.p. deve-se saber o máximo desta função no intervalo de variação. Sabendo que $\mu^2 - 1 \leq 0$ e que $x + \frac{1}{x}$ tende ao infinito quando x tende a zero, e a dois quando x tende a 1, pode-se concluir que o máximo desta função neste intervalo será tal que,

$$p(x) \leq \left[\frac{1}{1+2\alpha} + 1 + 2\alpha \right] / G\ . \tag{B.8}$$

Dessa maneira a técnica da rejeição pode ser aplicada de acordo com o diagrama mostrado na Figura B-1.

A fórmula de Klein-Nishina também pode ser amostrada pela aplicação da equação (4.22), ou seja,

$$\xi = \frac{1}{G} \int_x^1 f(x)\ dx = \frac{F(x)}{G}\ . \tag{B.9}$$

Cashwell e Everett /9/ aproximaram a função inversa $x = F^{-1}(y) \cong Q(y)$, com $y = F(x)$, para a amostragem de

$$x = F^{-1}(G\xi) \cong Q(G\xi)\ , \tag{B.10}$$

onde a função Q foi ajustada tomando-se vários valores de x e de α. De acordo com os autores estas funções podem ser utilizadas com erro relativo menor que 3.2% no intervalo

$0.001 \leq E \leq 100$ MeV .

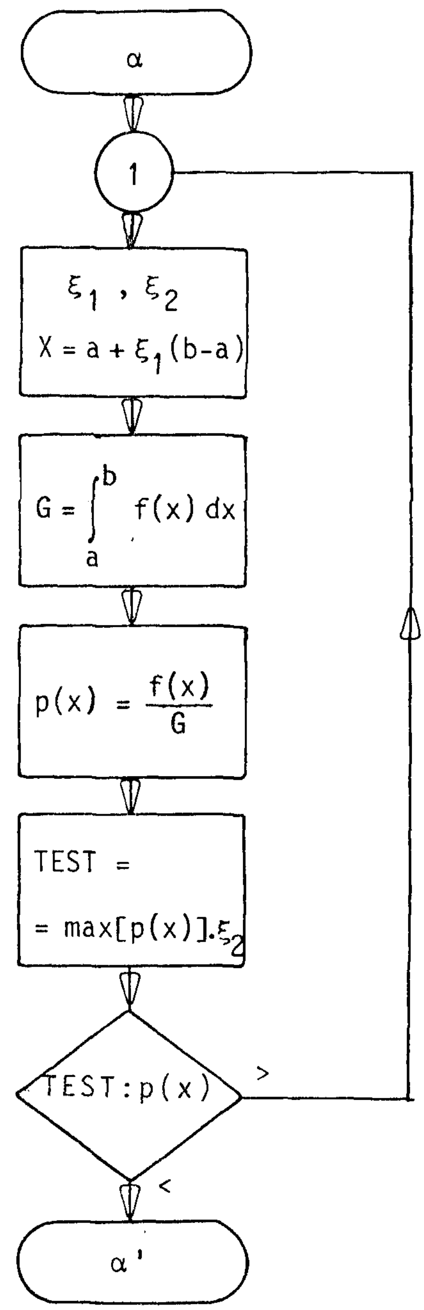


Figura B-1. Diagrama de blocos para a amostragem da fórmula de Klein-Nishina.

Neste trabalho estudou-se as diferenças entre os resultados obtidos utilizando a técnica da rejeição e os resultados obtidos utilizando os ajustes da publicação anteriormente citada. Porém as diferenças não foram significativas.

APÊNDICE C

C. DESCRIÇÃO DO PROGRAMA

O programa está escrito em linguagem FORTRAN IV G-H e foi implantado no computador IBM /370/155 do IPEN. É composto de um programa principal que utiliza 8 subrotinas e uma função. Cada raio gama é definido por sete variáveis, ou seja, as coordenadas espaciais (3), os cossenos diretores (3) e a energia.

A Figura C-1 mostra o diagrama de blocos do programa principal. Os dados de entrada são lidos em cartões do modo como está mostrado na Figura C-2. O primeiro cartão tem os dados geométricos que são dados em centímetros e no formato F 10.5, onde:

RF = Raio da fonte em disco ou do feixe paralelo,

RD = raio do detetor,

AD = altura do detetor,

P = distância da fonte puntual ao eixo do detetor,

HO = distância da fonte ao topo do detetor,

FP = indicador para fontes tipo feixe paralelo (Ø.Ø ou 1.Ø).

No segundo cartão estão: o parâmetro utilizado no espalhamento do histograma (ver Apêndice A), o número de histórias, o número de linhas do nuclídeo da fonte e o fator de normalização para comparações com outros espectros. Estes dados são lidos no formato (F10.5, 6X, I4, 8X, I2, F10.5). É importante notar que por limitações deste formato o fator de norma-

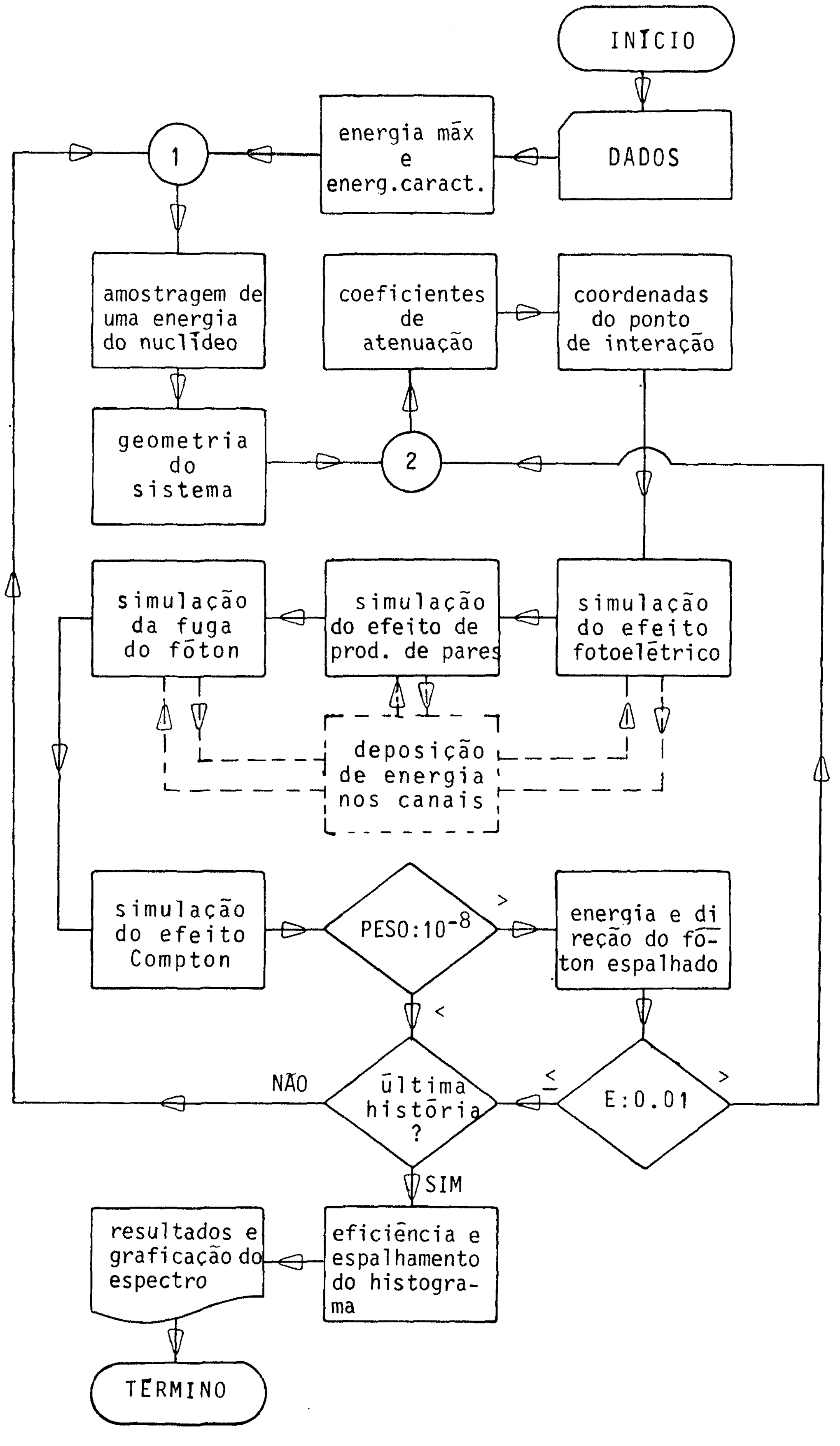


Figura C-1. Diagrama de blocos do programa desenvolvido.

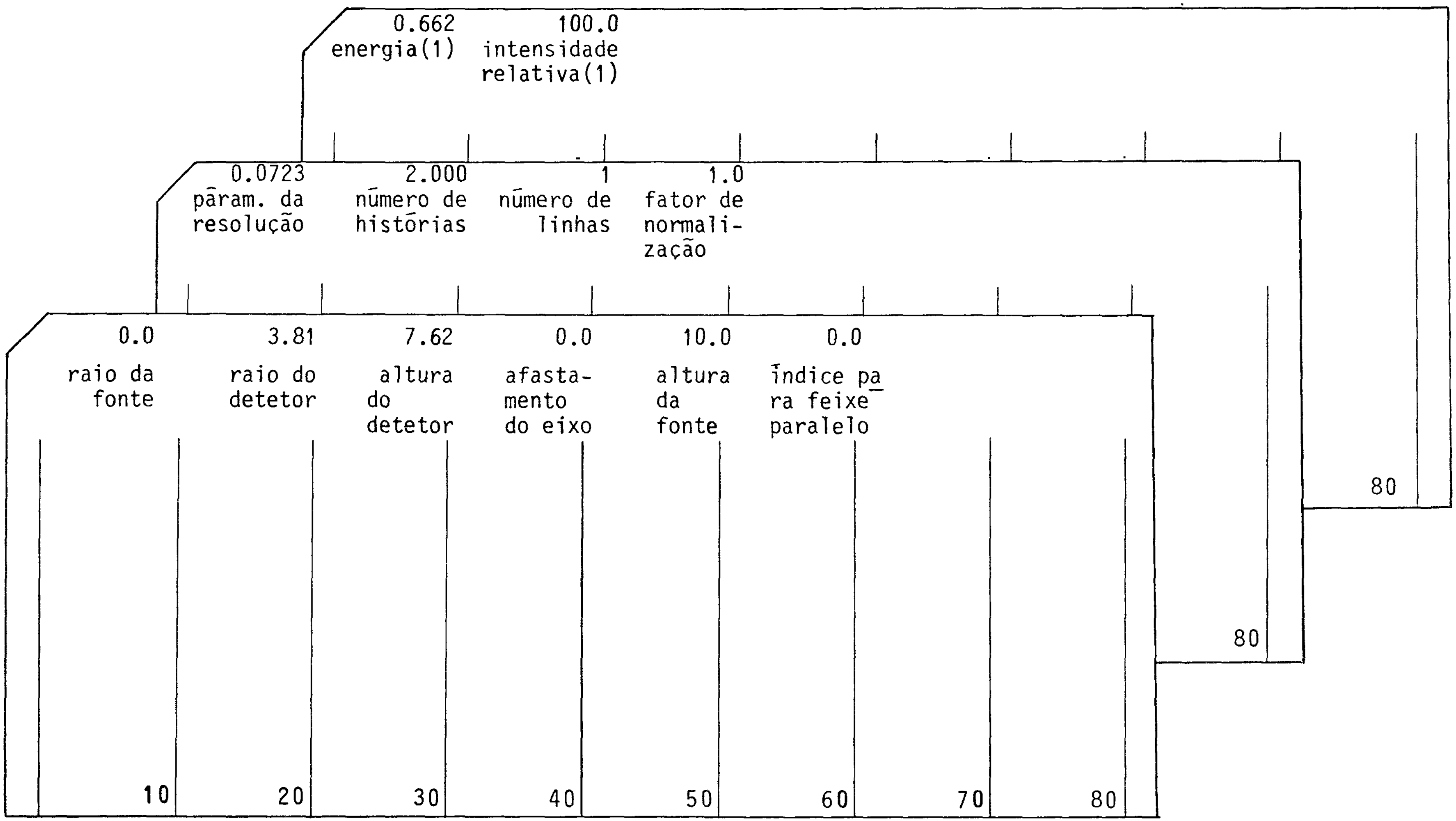


Figura C-2. Exemplo de uma entrada de dados para fonte puntual de ^{137}Cs a 10 cm do topo do detetor ("3x3").

lização deve ser menor que 10 o que é suficiente para realização das normalizações.

Os cartões subsequentes são utilizados para leitura das energias das linhas do nuclídeo e suas respectivas intensidades relativas, no formato 8(F10.5). A entrada destes dados deve estar na ordem decrescente das intensidades relativas das linhas do nuclídeo da fonte.

SUBROTINA FLO

Esta subrotina fornece a energia máxima, a energia característica, e amostra uma energia entre as linhas do nuclídeo. A energia máxima do nuclídeo é utilizada para o cálculo da largura dos canais e a energia característica tem como função a identificação do nuclídeo. Para a amostragem de uma energia entre as linhas do nuclídeo, é construída uma função distribuição de probabilidades utilizando as intensidades relativas das linhas que é amostrada utilizando a distribuição de probabilidade uniforme. Esta energia amostrada, é então utilizada na história seguinte.

SUBROTINA TATA

Utilizando os dados geométricos esta subrotina fornece um identificador para o tipo de fonte sendo utilizado, as coordenadas de entrada do fóton, a distância de percurso provável dentro do detetor e os cossenos diretores iniciais.

SUBROTINA SUSY

Esta subrotina fornece os coeficientes de atenuação linear para os efeitos fotoelétrico, Compton, formação de pares e total, segundo o que foi discutido na seção 5-5.

SUBROTINA BOIING

Esta subrotina amostra uma energia para o fóton espalhado dada pela fórmula de Klein-Nishina utilizando a técnica da rejeição conforme discutido anteriormente no Apêndice B.

SUBROTINA LILI

Esta subrotina fornece a energia absorvida no efeito de formação de pares de acordo com as considerações desenvolvidas na seção 5-6.

SUBROTINA MICA

Esta subrotina espalha o histograma por gaussianas com desvios padrões calculados empiricamente segundo o que foi discutido no Apêndice A.

SUBROTINA BIA

Subrotina para impressão dos dados e dos parâmetros calculados.

SUBROTINA FOFA

Subrotina para graficação dos espectros.

FUNÇÃO RANDO

Esta função fornece números aleatórios uniformemente distribuídos entre 0 e 1 de acordo com o método da congruência multiplicativo conforme o discutido na seção 4-3. Na Figura C-3 ilustra-se o diagrama de blocos da função utilizada neste trabalho.

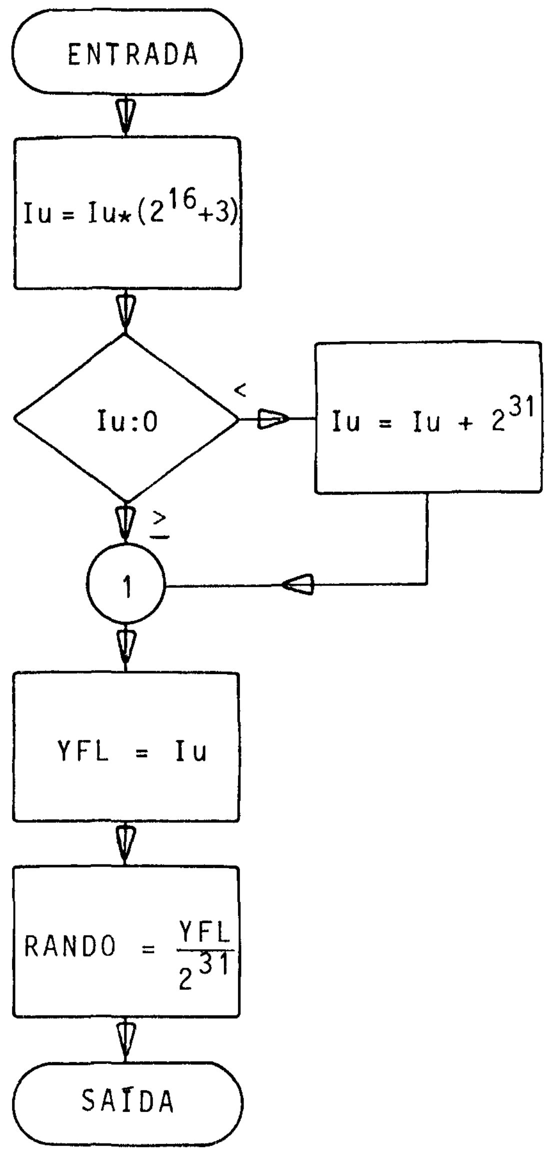


Figura C-3. Fluxograma da função RANDO.

APÊNDICE D

D. PROBLEMAS AMOSTRA

Neste Apêndice são ilustrados três problemas amostra cujas entradas de dados estão representadas na Figura D-1. Os resultados obtidos utilizando os dados da Tabela D-1 estão representados nas Figuras D-1 a D-3.

TABELA D-1. Dados de entrada utilizados nos problemas amostra 1, 2 e 3, ilustrados nas Figuras D-1, D-2 e D-3 respectivamente.

CARTÃO								
	PROBLEMA 1. Feixe paralelo colimado							
1	0.3	2.54	5.08	0.0	0.0	1.0		
2	0.0723	3 000	2	1.0				
3	1.333	100.0	1.173	99.9				
	PROBLEMA 2. Fonte tipo disco paralelo							
1	5.08	5.08	10.16	0.0	10.0	0.0		
2	0.0723	3 000	1	0.61				
3	0.662	100.0						
	PROBLEMA 3. Fonte puntual							
1	0.0	3.81	7.62	0.0	10.0	0.0		
2	0.0723	3 000	13	1.0				
3	0.5502	100.0	0.6299	95.65	0.7257	34.78	0.9154	21.74
4	1.0138	21.739	0.4141	19.57	0.288	13.04	0.0984	11.96
5	0.5995	8.7	0.5013	7.83	0.4326	7.28	0.3115	4.24
6	0.1896	1.41						
COLUNAS	10	20	30	40	50	60	70	80

RESULTADOS OBTIDOS UTILIZANDO FONTE TIPO FEIXE PARALELO

ALTURA DO DETETOR (AD) (CM)	RAIO DO DETETOR (RD) (CM)	RAIO DO FEIXE (RF) (CM)	ENERGIA CARACT. (EFC) (MEV)
5.0800	2.5400	0.3000	1.3330

EFICIENCIA INTRINSECA (EIT)	EFICIENCIA DE FOTOPICO (EFP)	FATOR GEOMETRICO (OMEGA)	RAZAO PICO/TOTAL (R)	LARGURA DO CANAL (MEV)
0.611926 DP=.0002	0.234746 DP=.0030	1.000000 DP=.0	0.383619 DP=.0048	0.010414

HISTOGRAMA

7.819	5.965	5.975	6.828	9.073	4.409	7.321	6.267
7.176	8.046	10.117	6.548	6.283	9.920	8.263	5.704
8.414	7.406	8.782	6.756	7.909	7.933	8.769	9.447
7.983	12.607	8.419	7.200	10.761	9.146	9.216	8.758
8.050	14.116	9.506	7.736	9.356	9.657	9.675	9.175
8.823	11.594	5.635	7.315	8.920	6.531	5.108	7.128
10.598	9.008	8.357	7.381	9.405	10.128	12.222	9.617
12.243	9.436	11.260	9.457	12.996	8.877	13.583	13.990
12.328	13.584	11.034	11.516	11.455	12.236	12.569	14.897
13.092	13.236	13.460	11.879	13.231	14.981	15.221	15.804
18.259	15.854	15.391	15.710	13.792	16.701	15.420	18.278
13.431	13.059	17.533	12.946	16.919	9.858	13.724	11.842
12.705	9.837	8.711	8.509	8.699	12.001	6.159	8.924
7.499	7.681	6.276	4.757	2.880	3.093	2.571	2.041
390.129	1.466	0.995	0.826	0.356	0.105	0.037	0.009
0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.0	0.0	316.352

ESPECTRO

0.221040	0.213168	0.165834	0.163643	0.186784	0.104553	0.148489	0.133963
0.146328	0.167700	0.179402	0.148485	0.147994	0.172806	0.162882	0.145319
0.154118	0.162138	0.162764	0.158193	0.159652	0.168060	0.177641	0.186109
0.194712	0.198932	0.192046	0.186057	0.189058	0.191738	0.191062	0.193971
0.202956	0.209526	0.205542	0.196703	0.192799	0.194011	0.195372	0.194396
0.190311	0.152493	0.172556	0.164171	0.159363	0.158249	0.161428	0.163671
0.176889	0.182784	0.186703	0.191850	0.200146	0.210125	0.218651	0.223795
0.225923	0.226879	0.228658	0.232552	0.238821	0.246642	0.254252	0.259636
0.261555	0.260502	0.258454	0.257713	0.259634	0.264037	0.269556	0.274605
0.278367	0.281269	0.284634	0.289853	0.297490	0.306906	0.316512	0.324505
0.329674	0.331849	0.331814	0.330727	0.329431	0.328097	0.326339	0.323632
0.319651	0.314314	0.307630	0.299579	0.290162	0.279507	0.267909	0.255804
0.243695	0.232091	0.221498	0.212093	0.204033	0.197556	0.194239	0.195931
0.211847	0.247542	0.313732	0.416941	0.554997	0.712543	0.861212	0.966567
1.000000	0.950361	0.828806	0.664321	0.492610	0.344524	0.239439	0.184970
0.180653	0.221737	0.300664	0.406200	0.522168	0.628066	0.702671	0.702889
0.675960	0.601229	0.494586	0.376292	0.264782	0.172319	0.103720	0.057739
0.029727	0.014156	0.006234	0.002539	0.000957	0.000333	0.000107	0.000032

RESOLUCAO= 6.57% NUMERO DE HISTORIAS=3000 FATOR DE NORMALIZACAO=1.000

Figura D-1a. Resultados obtidos para o problema amostra 1.

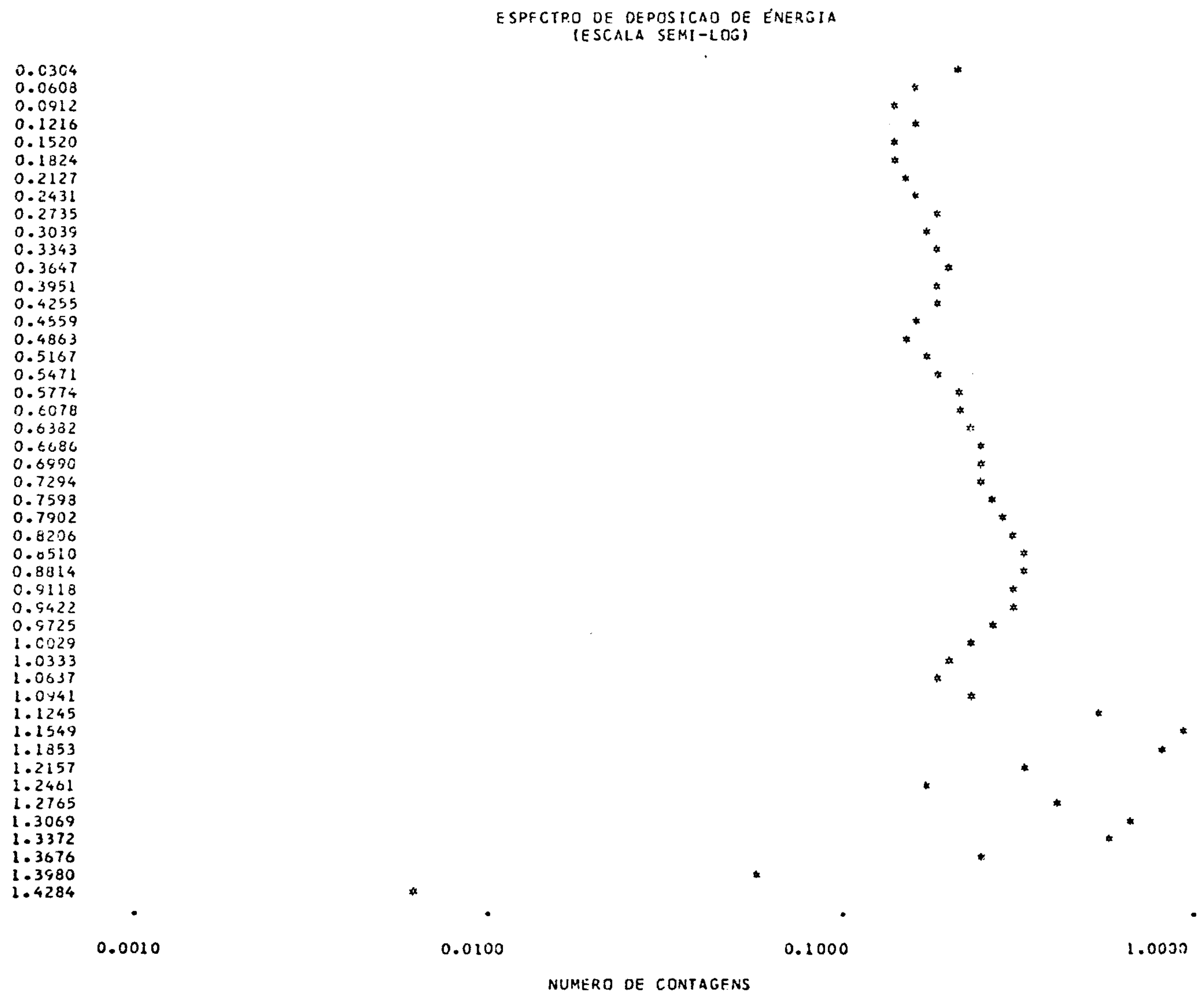


Figura D-1b. Espectro obtido para o problema amostra 1.

RESULTADOS OBTIDOS UTILIZANDO FONTE TIPO DISCO

ALTURA DO DETETOR (AD) (CM)	RAIO DO DETETOR (RD) (CM)	RAIO DA FONTE (RF) (CM)	ALTURA DA FONTE (HC) (CM)	ENERGIA CARACT. (EFC) (MEV)
10.1600	5.0800	5.0800	10.0000	0.0620

EFICIENCIA INTRINSECA (EIT)	EFICIENCIA DE FOTOPICO (EFP)	FATOR GEOMETRICO (OMEGA)	RAZAO PICO/TOTAL (R)	LARGURA DO CANAL (MEV)
0.687501 DP=.0106	0.446433 DP=.0065	0.046551 DP=.0005	0.649356 DP=.0124	0.005172

HISTOGRAMA

6.614	7.057	6.106	5.672	7.171	7.596	6.705	[illegible]
7.110	7.099	4.585	7.198	6.147	6.344	6.955	[illegible]
8.678	7.090	5.850	4.582	6.274	4.457	7.617	[illegible]
5.024	6.477	6.646	7.810	6.262	7.058	7.141	[illegible]
7.510	4.052	7.824	8.427	7.626	5.121	7.001	[illegible]
6.156	5.867	7.850	7.674	7.450	4.545	4.593	[illegible]
6.780	7.084	4.843	6.777	7.023	6.225	7.259	7.200
4.961	6.490	6.787	7.087	9.596	7.695	3.727	7.105
6.161	4.932	5.199	6.602	5.158	7.271	7.154	[illegible]
4.565	7.430	4.764	6.031	7.705	4.252	6.561	[illegible]
3.674	5.124	5.468	8.227	6.161	6.466	6.727	10.404
11.097	5.210	5.065	12.700	4.150	2.766	2.251	[illegible]
1.760	1.289	2.642	1.195	1.145	0.577	0.576	[illegible]
0.519	0.335	0.149	0.162	0.064	0.021	0.010	[illegible]
0.005	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1070.700

ESPECTRO

0.048056	0.072824	0.045465	0.039539	0.046451	0.040653	0.045024	[illegible]
0.049383	0.042596	0.038731	0.040951	0.042116	0.042235	0.043291	[illegible]
0.047441	0.045729	0.040595	0.037011	0.037256	0.040374	0.044382	[illegible]
0.047349	0.047208	0.047097	0.046626	0.045789	0.044045	0.043512	[illegible]
0.043030	0.043830	0.045146	0.045983	0.045060	0.044452	0.043380	0.042978
0.043337	0.044048	0.044461	0.044044	0.042703	0.041156	0.040102	[illegible]
0.040660	0.041889	0.043277	0.044565	0.045022	0.040228	0.040375	[illegible]
0.046108	0.046182	0.046401	0.046468	0.046141	0.045248	0.042952	[illegible]
0.041437	0.040760	0.040551	0.040834	0.041505	0.041788	0.042125	[illegible]
0.042145	0.041927	0.041654	0.041366	0.041166	0.041024	0.041000	[illegible]
0.042140	0.043413	0.043225	0.047477	0.045550	0.052316	0.054101	[illegible]
0.054667	0.053164	0.050043	0.045724	0.040602	0.055159	0.029606	[illegible]
0.021028	0.017739	0.015142	0.013100	0.011464	0.010111	0.005555	[illegible]
0.007058	0.008361	0.005745	0.005277	0.004934	0.004761	0.004035	[illegible]
0.006530	0.009022	0.013498	0.021964	0.035451	0.056685	0.087531	[illegible]
0.187605	0.256713	0.334842	0.416420	0.499543	0.557317	0.595514	0.610000
0.595243	0.553079	0.469338	0.412248	0.330703	0.252607	0.183751	[illegible]
0.083915	0.052654	0.031507	0.017535	0.009725	0.005020	0.002402	[illegible]

RESOLUCAO= 8.30% NUMERO DE HISTORIAS=3000 FATOR DE NORMALIZACAO=0.610

Figura D-2a. Resultados obtidos para o problema amostra 2.

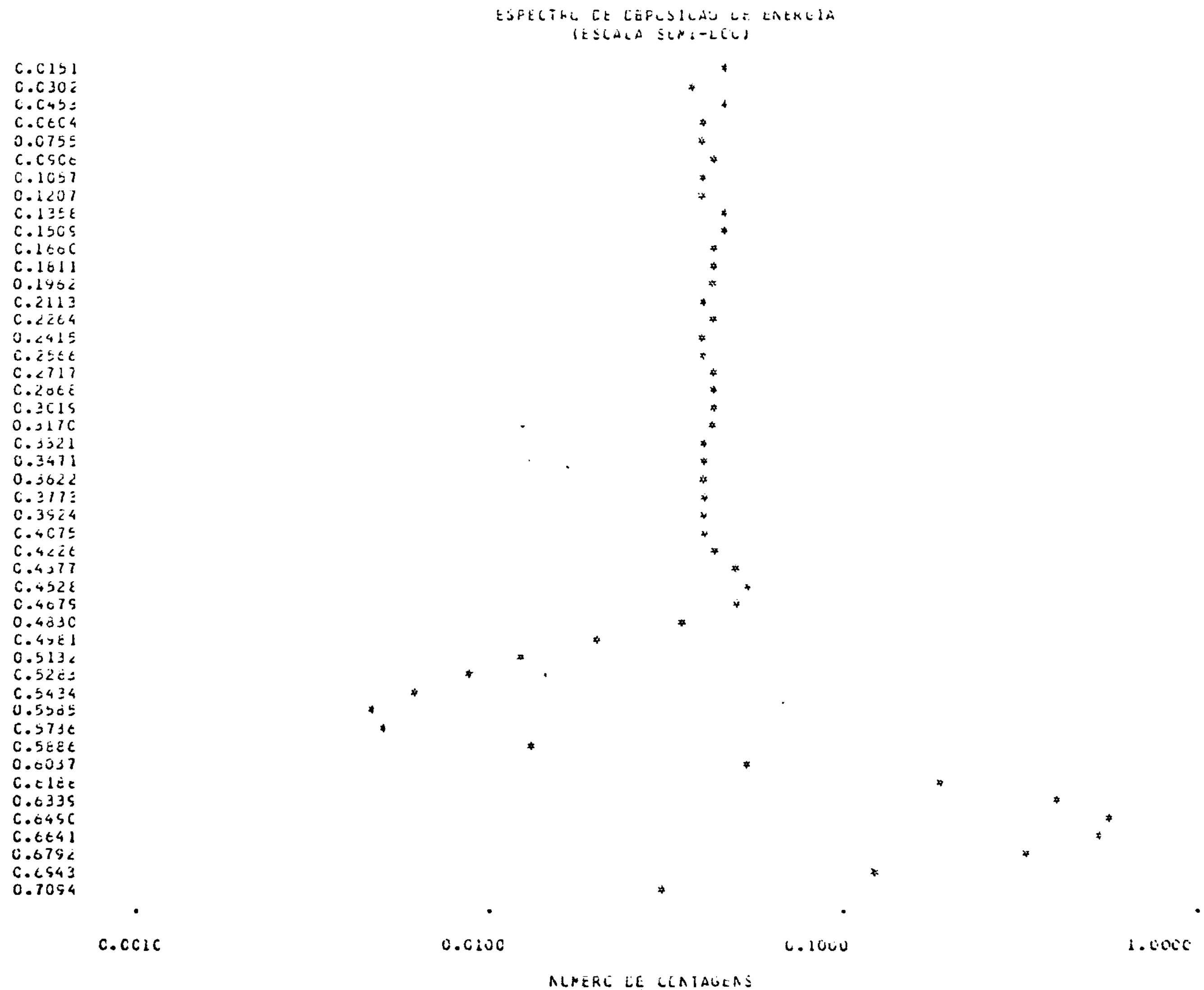


Figura D-2b. Espectro obtido para o problema amostra 2.

RESULTADOS OBTIDOS UTILIZANDO FONTE PONTUAL

ALTURA DO DETETOR (AD) (CM)	RAIO DO DETETOR (RD) (CM)	ALTURA DA FONTE (HO) (CM)	AFASTAMENTO DO EIXO (P) (CM)	ENERGIA CARACT. (ERC) (MEV)
7.6200	3.8100	10.0000	0.0	0.5502

EFICIENCIA INTRINSECA (EIT)	EFICIENCIA DE FOTOPICO (EFF)	FATOR GEOMETRICO (OMEGA)	RAZAO PICO/TOTAL (R)	LARGURA DO CANAL (MEV)
0.653685 DP=.0052	0.410092 DP=.0055	0.032764 DP=.0000	0.627253 DP=.0098	0.007520

HISTOGRAMA

12.209	13.153	10.120	14.999	13.450	16.415	13.740	12.000
8.730	14.167	11.817	9.762	105.175	13.655	12.093	10.091
9.029	11.735	9.747	12.077	11.316	12.100	11.238	[illegible]
7.532	11.431	11.442	14.901	13.425	9.500	12.040	[illegible]
12.515	12.424	11.894	12.565	69.105	12.001	10.728	8.404
9.225	12.009	9.898	12.972	9.255	14.522	10.154	11.554
5.094	7.113	8.507	9.678	94.837	7.531	[illegible]	[illegible]
3.660	4.552	3.847	3.034	3.105	3.349	3.411	23.000
2.378	4.344	3.596	3.837	0.913	524.090	[illegible]	1.578
1.081	1.088	1.384	35.772	2.195	1.052	0.555	333.835
0.852	2.093	1.219	0.717	2.733	1.555	1.354	1.000
1.456	2.102	2.506	107.752	0.957	1.655	0.750	0.347
1.782	0.292	1.082	0.574	0.890	0.317	0.573	0.413
0.101	0.128	0.138	0.168	0.203	0.022	[illegible]	0.132
0.095	0.013	0.003	69.548	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000	0.0	0.0	0.0	0.0	47.045

ESPECTRO

0.256156	0.250284	0.213651	0.268332	0.233333	0.259328	0.223797	0.150029
0.171774	0.204580	0.235925	0.525407	0.661516	0.346524	[illegible]	[illegible]
0.171029	0.175853	0.180066	0.165750	0.169565	0.130373	[illegible]	[illegible]
0.164292	0.175100	0.197649	0.206151	0.260367	0.200585	[illegible]	0.207752
0.224840	0.267740	0.350258	0.446155	0.467527	0.434600	0.327503	[illegible]
0.192019	0.180570	0.183021	0.166797	0.163050	0.165370	[illegible]	0.175027
0.194881	0.237499	0.303154	0.366094	0.392162	0.304037	[illegible]	[illegible]
0.151321	0.111238	0.092884	0.090272	0.100073	0.119750	[illegible]	[illegible]
0.274811	0.401823	0.578799	0.777142	0.537749	1.000000	[illegible]	[illegible]
0.607494	0.473495	0.424462	0.464241	0.567292	0.690667	[illegible]	[illegible]
0.754445	0.630301	0.475027	0.326663	0.219297	0.157111	[illegible]	[illegible]
0.183006	0.216770	0.245907	0.255020	0.242512	0.211505	[illegible]	[illegible]
0.085826	0.062100	0.043724	0.032687	0.026476	0.023043	[illegible]	[illegible]
0.019800	0.020573	0.022697	0.027509	0.035203	0.040596	[illegible]	[illegible]
0.096496	0.115320	0.127138	0.131606	0.126258	0.116038	[illegible]	[illegible]
0.077143	0.070246	0.069097	0.072926	0.079822	0.037203	[illegible]	[illegible]
0.075359	0.068233	0.057947	0.046131	0.034414	0.024000	[illegible]	[illegible]
0.005564	0.002999	0.001514	0.000716	0.000318	0.000152	0.000051	[illegible]

RESOLUCAO= 8.62%   NUMERO DE HISTORIAS=3000   FATOR DE NORMALIZACAO=1.000

Figura D-3a. Resultados obtidos para o problema amostra 3.

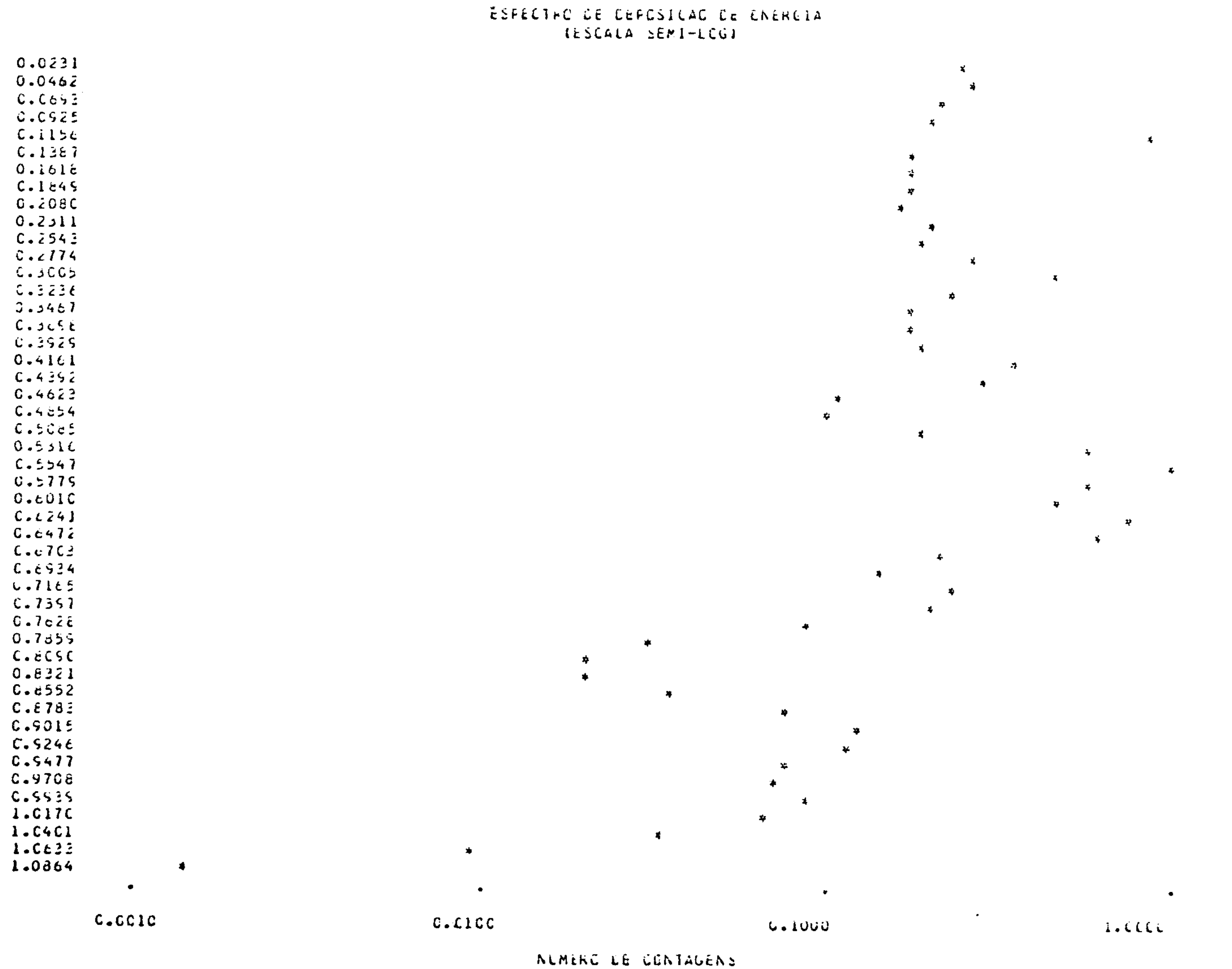


Figura D-3b. Espectro obtido para o problema amostra 3.

APÊNDICE E

E. LISTAGEM DO PROGRAMA

```
C          PRCGRAMA MCGAMA
C
C          WILSCN JCSE VIEIRA  MAIC/82
C
C
C          SIMULACAC CC ESPECTRC GAMA EM CETETCRES CE NAI
C          UTILIZANCO O METODO DE MCNTE CARLC - CISSERTA-
C          CAC CE MESTRACC
C
C
C          SUBRCTINAS UTILIZADAS
C
C                  BCIINC, TATA, SUSY, ERRSET (IBM), LILI,
C                  MICA, FCFA, BIA E FLO.
C
C
      IMPLICIT REAL * 8 (A-H,C-Z)
      CCMMCN IU
      CIMENSICN CCNT(144), E(1), FINAL(144)
      CIMENSICN ENERG(3C),PRCB(3C)
      CATA PI/3.1415926/
      CALL ERRSET (2C8,256,-1,1)
C
 1CO1 READ (5,2,ENC=2CCC) RF,RC,AC,P,HC,FP
    2 FORMAT (6F1C.4)
      READ (5,3) U,N,IZ,FNCRM
      READ(5,555)(ENERG(I),PRCB(I),I=1,IZ)
    3 FCRMAT (F1C.5,6X,I4,8X,I2,F1C.5)
  555 FCRMAT(8(F1C.6))
C
      IU=123456789
      DC 556 I=1,144
      CCNT(I)=C.DC
      FINAL(I)=C.DC
  556 CONTINUE
      SUM1=0.DO
      SUM2=C.DC
      SUM3=C.DC
      SUM4=0.DO
      SUM5=C.DC
      SUM6=0.DC
      HELP=C
C
          DO 1 I=1,N
C
C        SELECAO DA ENERGIA INICIAL
C
      CALL FLC (IZ,ENERG,PROB,HELP,EFMAX,EFC,EF)
      HELP=1
C
```

```
C          SELECAO DO PONTO DA PRIMEIRA INTERACAO
C
      CALL TATA (RF, RC, AO, P, HC, FP, WP, XE, YE, ZE, DE, ACOS,
     *BCOS, GCOS, IFONTE)
      X=RANDO(C)
      EO=EF
      WZ=0.DO
      WY=0.DO
      WP1=0.DO
      PROD=1.DO
      CALL SLSY (EO, SIGMAC, SIGMAF, SIGMAP, SIGMAT)
      ELI=-1.DO/SIGMAT*(DLOG(1.DO-X*(1.DO-DEXP(-SIGMAT*DE))))
      XN=ELI*ACOS+XE
      YN=ELI*BCOS+YE
      ZN=ELI*GCOS+ZE
      WT=1.DO-DEXP(-SIGMAT*DE)
      WV=WT*(SIGMAF/SIGMAT)
      DELTAE=EFMAX/128.
      EA=EF
      DO 55 K=1,128
      E(K)=DELTAE*K
      IF((EA-E(K)).LT.1.E-5) GO TO 54
      IF(EA-E(K)) 54,54,55
   54 CONT(K)=CONT(K)+WV
      GO TO 56
   55 CONTINUE
   56 WU=WT
      IF(EF.LT.1.1) GO TO 223
      WPP=WT*SIGMAP/SIGMAT
      CALL LILI (XN, YN, ZN, AO, EF, RC, EA)
      IF(EA-EF) 197,198,197
  198 WP1=WPP
  197 DO 6777 K=1,128
      E(K)=DELTAE*K
      IF((EA-E(K)).LT.1.D-5) GO TO 5777
      IF (EA-E(K)) 5777,5777,6777
 5777 CONT(K)=CONT(K)+WPP
      GO TO 223
 6777 CONTINUE
C
C          TESTE PARA TERMINO DA HISTORIA
C
  223 WX=WT*(SIGMAC/SIGMAT)
      IF (PROD.LE.1.DE-08) GO TO 401
      PROD=PROD*WX
C
C          SELECAO DO ANGULO DE ESPALHAMENTO E ENERGIA
C          DO FOTON ESPALHADO
C
      CALL BOING (EO,ES)
      TETA=DARCOS(1.0+0.511/EO-0.511/ES)
      EO=ES
C
C          TESTE PARA TERMINO DA HISTORIA
C
      IF (EO.LT.0.01) GO TO 401
      X=RANDO (C)
      FI=2.0*PI*X
      CT=DCOS(TETA)
      ST=DSIN(TETA)
      CF=DCOS(FI)
      SF=DSIN(FI)
C
```

```
C          CCSSENCS DIFETCRES EMERGENTES
C
      DENCM=DSCRT(C.1C1-GCCS*GCCS)
      IF(DENCM.LE.C.C-4) GC TC 26
      ACCSI=ACCS*CT+(GCCS*ACCS*ST*CF-BCCS*ST*SF)/DENCM
      BCCSI=BCCS*CT+(GCCS*BCCS*ST*CF+ACCS*ST*SF)/DENOM
      GCOSI=GCCS*CT-DENCM*ST*CF
      ACCS=ACCSI
      BCOS=BCCSI
      GCOS=GCCSI
      GC TC 27
   26 ACOS=ST*CF
      BCOS=ST*SF
      GCOS=GCCS*CF
C
C          SELECAC CA NCVA DISTANCIA A PERCORRER NC  CRISTAL
C
   27 A=ACCS*ACOS+BCOS*BCCS
      B=2.C    *(XN*ACCS+YN*BCCS)
      C=XN*XN+YN*YN-RD*RD
      D=B*B-4.C*A*C
      DE=(-B+DSQRT(D))/(2.C*A)
      ZR=DE*GCOS+ZN
      IF(ZR) 111,111,211
  211 IF(ZR-AD) 4C, 411, 411
  111 DE=-ZN/GCCS
      GO TC 4C
  411 DE=(AC-ZN)/GCOS
C
C
C          SELECAO CO NCVC PCNTO DE INTERACAC
C
   40 X=RANCC (0)
      CALL SLSY (EC, SIGMAC, SIGMAF, SIGMAP, SIGMAT)
      ELI=-1.CC/SIGMAT*(DLCG(1.CC-X*(1.CO-DEXP(-SIGMAT*DE))))
      XN=ELI*ACOS+XN
      YN=ELI*BCCS+YN
      ZN=ELI*GCGS+ZN
      WT=1.CO-DEXP(-SIGMAT*DE)
      IF(EF.LT.1.1) GC TC 312
      WK=WT*SIGMAP/SIGMAT
C
C
C          PERCA CE ENERGIA DEVIDO AO EFEITC DE PRODUCAC DE PARES
C
      CALL LILI (XN, YN, ZN, AC, EF, RD, EA)
      IF(EA-EF) 9,8,9
    8 WY=WY+WK*PRCD
    9 CC 677 K=1,128
      E(K)=DELTAE*K
      IF((EA-E(K)).LT.1.D-5) GC TC 98
      IF(EA-E(K)) 98,98,677
   98 CCNT(K)=CCNT(K)+WK*PROD
      GC TC 312
  677 CCNTINUE
C
C          PERCA CE ENERGIA DEVIDO AO EFEITC FOTCELETRICC
C
  312 WF=WT*(SIGMAF/SIGMAT)
      EA=EF
      DO 75 K=1,128
      E(K)=DELTAE*K
      IF((EA-E(K)).LT.1.E-5) GC TC 74
```

```
      IF(EA-E(K)) 74,74,75
   74 CCNT(K)=CCNT(K)+WF*PRCC
      WZ=WZ+WF*PRCC
      GC TC 77
   75 CCNTINUE
C
C          PERCA CE ENERGIA DEVIDO A FUGA DO FOTCN
C
   77 EA=EF-EO
          CC 67 K=1,128
      E(K)=DELTAE*K
      IF (EA-E(K)) 1C1,1C1,67
  1C1 CCNT(K)=CCNT(K)+PRCC*(1.-WT)
      GO TC 223
   67 CCNTINUE
C
C
C
C          FIM DA HISTCRIA
C
C
  401 SUM1=SUM1+WL*WP
      SUM2=SUM2+WP
      SUM3=SUM3+WL*WL*WP*WP
      SUM4=SUM4+WP*WP
      SS=WP*(WV+WZ+WF1+WY)
      SUM5=SUM5+SS
      SUM6=SUM6+SS**2.CC
C
    1 CONTINUE
C
C
C          CALCULO CO FATOR GECMETRICC
C
      OMEGA=SUM2/N
      S2=(1./(N-1.))*(SUM4-(SUM2)**2/N)/N
      SIGCME=DSQRT(S2)
C          CALCULO DA EFICIENCIA INTRINSICA TCTAL (EIT)
C
      EIT=(1.C/N)*SUM1/CMEGA
      C2=OMEGA*OMEGA
      S=(1./(N-1.))*(SUM3/C2-SUM1*SUM1/N/C2)/N
      SIGE=DSQRT(DABS(S))
C
C          CALCULC DA EFICIENCIA CE FCTCPICC (EFP)
C
      EFP=(1.0/N)*SUM5/CMEGA
      S1=(1./(N-1.))*(SUM6/02-(SUM5)**2/N/C2)/N
      SIGEFP=DSQRT(DABS(S1))
C
C          CALCULC DA RAZAO PICO/TCTAL (R)
C
      R=EFP/EIT
      SIGR=(EFP/EIT)*DSQRT((S1/(EFP*EFP)+S/(EIT*EIT)))
C
C          CALCULC DA EFICIENCIA INTRINSICA TCTAL DA FCNTE (ETG)
C
      ETG=CMEGA*EIT
      S3=OMEGA*OMEGA*S2+EIT*EIT*S
      SIGETG=DSQRT(S3)
C
C          CALCULO DA EFICIENCIA DE FCTCPICC DA FCNTE (EFG)
C
```

```
      EFG=CMEGA*EFP
C
      S4=CMEGA*CMEGA*S2+EFP*EFP*S1
      SIGEFG=DSQRT(S4)
C
C         ESPALHAMENTC DC HISTCGRAMA
C
      CALL MICA (EFMAX,L,CCNT,FINAL,FNCRM)
C
C
C         IMPRESSAC CE RESULTACCS
C
      CALL BIA(RF,RC,AC,P,HC,EFC,CCNT,FINAL,FNORM,U,N,
     *EIT,EFP,CMEGA,R,IFCNTE,SIGCME,SIGE,SIGEFP,SIGR,CELTAE)
C
C         GRAFICC CC ESPECTRC
C
      CALL FCFA(FINAL,CELTAE)
      GO TC 1CC1
C
 2000 STCP
       END
      SUBRCUTINE FLC (IZ,ENERG,PROB,HELP,EFMAX,EFC,EF)
C
C         ESTA SUBRCTINA FORNECE A ENERGIA MAXIMA DC NUCLICEC,
C         A ENERGIA CARACTERISTICA E AMOSTRA UMA ENERGIA QUALQUER
C         PARA UTILIZACAC NO DESENVCLVIMENTC DCS CALCULCS.
C
      IMPLICIT REAL * 8 (A-H,C-Z)
      COMMCN IL
      DIMENSICN ENERG(1),PRCB(1)
      IF(HELP.EQ.1) GC TC 30
      DEN=C.C
      DC 1 I=1,IZ
      DEN=DEN+PRCB(I)
    1 CCNTINUE
      DO 2 I=1,IZ
      PROB(I)=PRCB(I)/DEN
    2 CCNTINUE
      IF(IZ.LE.1) GC TC 4
      IZ1=IZ-1
      DO 3 I=1,IZ1
      PROB(I+1)=PRCB(I)+PRCB(I+1)
    3 CCNTINUE
      EFC=ENERG(1)
      EF=EFC
      DC 20 I=2,IZ
      IF (EF-ENERG(I)) 1C,10,20
   10 EF=ENERG(I)
   20 CCNTINUE
      EFMAX=EF
      GC TC 30
    4 EFMAX=ENERG(1)
      EFC=EFMAX
      EF=EFC
   30 X=RANDC(C)
      DC 5 I=1,IZ
      IF(X.GT.PRCB(I)) GC TC 5
      EF=ENERG(I)
      GC TC 40
    5 CCNTINUE
   40 RETURN
      END
```

```
      SUBROUTINE BIA(RF,RD,AD,P,HC,EFC,CONT,FINAL,FNORM,L,N,
     *EIT,EFF,OMEGA,R,IFONTE,SIGOME,SIGE,SIGEFP,SIGR,DELTAE)
C
C          SUBROTINA PARA IMPRESSAO DOS RESULTADOS
C
      IMPLICIT REAL * 8 (A-H,O-Z)
      DIMENSION CONT(1), FINAL(1)
      GO TO (1,2,3), IFONTE
C
C
    1 WRITE (6,10)
   10 FORMAT(1H1,38X,55HRESULTADOS OBTICOS UTILIZANDO FONTE TIPO FEIXE P
     1ARALELO///23H ALTURA DO DETETOR (AD),14X,20HRAIO DO DETETOR (RD),
     214X,18HRAIO DO FEIXE (RF),14X,21HENERGIA CARACT. (EFC))
      WRITE (6,12)
   12 FORMAT(1H ,7X,'(CM)',32X,'(CM)',29X,'(CM)',30X,'(MEV)')
C
      WRITE (6,11) AD,RD,RF,EFC
   11 FORMAT(1H0,4X,F10.4,26X,F10.4,24X,F10.4,15X,F10.4)
      GO TO 100
C
    2 WRITE (6,20)
   20 FORMAT(1H1,43X,43HRESULTADOS OBTIDOS UTILIZANDO FONTE PONTUAL
     1///23H ALTURA DO DETETOR (AD),5X,20HRAIO DO DETETOR (RD),5X,
     220HALTURA DA FONTE (HC),5X,23HAFASTAMENTO DO EIXO (P),5X,21HENERGI
     3A CARACT. (EFC))
      WRITE(6,22)
   22 FORMAT(1H ,7X,'(CM)',22X,'(CM)',19X,'(CM)',21X,'(CM)',23X,'(MEV)')
C
      WRITE (6,21) AD,RD,HC,P,EFC
   21 FORMAT(1H0,4X,F10.4,15X,F10.4,15X,F10.4,15X,F10.4,16X,F10.4)
      GO TO 100
C
    3 WRITE (6,30)
   30 FORMAT(1H1,42X,46HRESULTADOS OBTIDOS UTILIZANDO FONTE TIPO DISCO
     1///23H ALTURA DO DETETOR (AD),6X,20HRAIO DO DETETOR (RD),
     26X,18HRAIO DA FONTE (RF),6X,20HALTURA DA FONTE (HC),6X,
     321HENERGIA CARACT. (EFC))
      WRITE(6,32)
   32 FORMAT(1H ,7X,'(CM)',22X,'(CM)',19X,'(CM)',21X,'(CM)',23X,'(MEV)')
C
      WRITE (6,31) AD,RD,RF,HC,EFC
   31 FORMAT(1H0,4X,F10.4,18X,F10.4,16X,F10.4,13X,F10.4,14X,F10.4)
  100 WRITE (6,400)
  400 FORMAT(1H-,21HEFICIENCIA INTRINSECA,09X,22HEFICIENCIA DE FOTOPICO,
     19X,16HFATOR GEOMETRICO,9X,16HRAZAO PICO/TOTAL,
     29X,16HLARGURA DO CANAL)
      WRITE(6,402)
  402 FORMAT(1H ,8X,'(EIT)',24X,'(EFP)',22X,'(OMEGA)',21X,'(R)',
     122X,'(MEV)')
      WRITE (6,401) EIT,EFF,OMEGA,R,DELTAE
  401 FORMAT(1H0,3X,F8.6,24X,F8.6,22X,F8.6,16X,F8.6,20X,F8.6)
      WRITE (6,1000) SIGE,SIGEFP,SIGOME,SIGR
 1000 FORMAT(1H ,3X,'DP=',F5.4,24X,'DP=',F5.4,22X,'DP=',F5.4,16X,'DP=',
     1F5.4)
      WRITE (6,200)
  200 FORMAT(1H-,'HISTOGRAMA' //)
      WRITE (6,201) (CONT(K), K=1,128)
  201 FORMAT(8(7X,F8.3))
C
      WRITE (6,300)
  300 FORMAT(1H-,'ESPECTRO' //)
      WRITE (6,301) (FINAL(J), J=1,144)
```

```
  301 FORMAT(8(7X,F8.6))
      RES=U*EFC**(2./3.)*100./EFC
      WRITE(6,501) RES,N,FNORM
  501 FORMAT(1H-,10HRESOLUCAO=,F5.2,'%',25X,20HNUMERO DE HISTORIAS=,
     1I4,25X,22HFATOR DE NORMALIZACAO=,F5.3)
      RETURN
      END
      SUBROUTINE MICA (EFMAX,U,CONT,FINAL,FNORM)
C
C          ESTA SUBROTINA ESPALHA O HISTOGRAMA POR GAUSSIANAS COM
C          DESVIOS PADROES CALCULADOS EMPIRICAMENTE
C
      IMPLICIT REAL * 8 (A-H,O-Z)
      DIMENSION CONT(144),FINAL(144)
      PI=3.1415926
      DELTAE=EFMAX/128.
      DO 3367 J=1,144
      E1=DELTAE*J
      DO 3366 K=1,128
      E2=DELTAE*K
      SIGMA=U*E2**(2./3.)/2.35
      SIGMA2=SIGMA*SIGMA
      DIV=1.D0/DSQRT(2.D0*PI*SIGMA2)
      F=(E2-E1)/SIGMA
      F=F*F*0.5D0
      IF(K-1) 3,3,4
    3 W=0.5
      GO TO 6
    4 W=1.D0
    6 IF (F-10.) 3365,3366,3366
 3365 FINAL(J)=CONT(K)*DIV*DEXP(-F)*DELTAE*W+FINAL(J)
 3366 CONTINUE
 3367 CONTINUE
      CONST=FINAL(1)
      DO 1 I=1,144
      IF(CONST-FINAL(I)) 2,2,1
    2 CONST=FINAL(I)
    1 CONTINUE
      DO 3368 M=1,144
      FINAL(M)=(FINAL(M)/CONST)*FNORM
 3368 CONTINUE
      RETURN
      END
      SUBROUTINE LILI (XN, YN, ZN, AC, EF, RC, EA)
C
C          ESTA SUBROTINA FORNECE A ENERGIA ABSORVIDA
C          NO EFEITO DE FORMACAO DE PARES
C
      IMPLICIT REAL * 8 (A-H,O-Z)
      COMMON IU
      PI=3.1415926
      X=RAND(O)
      TETA=DARCOS(0.201*X-0.101)
      CT=DCOS(TETA)
      ST=DSIN(TETA)
      X=RAND(O)
      FI=2.*PI*X
      CF=DCOS(FI)
      SF=DSIN(FI)
C
C          COSSENOS DIRETORES
C
      CDA=ST*CF
```

```
      CDB=ST*SF
      CDG=CT
C
C          PRIMEIRC FCTCN CE ANIQUILAMENTG
C
  680 EC=0.511
      EA=EF
      CDA1=-CDA
      CDB1=-CDB
      CDG1=-CDG
      XP=XN
      YP=YN
      ZP=ZN
      XA=XN
      YA=YN
      ZA=ZN
      IAJUDA=1
      GC TC 332
C
C          SEGUNDO  FOTCN DE ANIQUILAMENTO
C
  329 CDA=CDA1
      EC=0.511
      CDB=CDB1
      CDG=CDG1
      XP=XA
      YP=YA
      ZP=ZA
      IAJUDA=2
C
C          CALCULO DA DISTANCIA A PERCORRER
C
  332 A=CDA*CDA+CDB*CDB
      B=2.*(XP*CDA+YP*CDB)
      C=XP*XP+YP*YP-RD*RD
      D=B*B-4.*A*C
      D=DSQRT(D)
      DE=(-B+D)/(2.*A)
      ZR=DE*CDG+ZP
      IF(ZR) 81,81,82
   82 IF(ZR-AD) 80,83,83
   81 DE=-ZP/CDG
      GO TC 8C
   83 DE=(AD-ZP)/CDG
C
C          SIMULACAC DC TIPO E LCCAL DE INTERACAC
C
   8C X=RANDC(C)
      CALL SUSY (EC, SIGMAC, SIGMAF, SIGMAP, SIGMAT)
      ELI=-1./SIGMAT*DLOG(X)
      IF(ELI.GT.DE) GC TO 5C4
      AUX=SIGMAC/SIGMAT
      X=RANDC(C)
      IF(X.LT.AUX) GC TC 5C3
      EA=EA
      IF (IAJUDA.EQ.1) GO TO 329
       GC TC 1
  5C4 EA=EA-EC
      IF (IAJUDA.EQ.1) GO TO 329
       GC TC 1
  5C3 XP=ELI*CDA+XP
      YP=ELI*CDB+YP
      ZP=ELI*CDG+ZP
```

```
      CALL BOIING (EO,ES)
      TETA=DARCOS(1.0+0.511/EO-0.511/ES)
      EO=ES
      CT=DCOS(TETA)
      ST=DSIN(TETA)
      X=RANDO(0)
      FI=2.*PI*X
      CF=DCOS(FI)
      SF=DSIN(FI)
C
C          COSSENOS DIRETORES EMERGENTES
C
      DENOM=DSQRT(1.-CDG*CDG)
      IF(DENOM.LE.1.D-04) GO TO 331
      CDA2=CDA*CT+(CDG*CDA*ST*CF-CDB*ST*SF)/DENOM
      CDB2=CDB*CT+(CDG*CDB*ST*CF+CDA*ST*SF)/DENOM
      CDG2=CDG*CT-DENOM*ST*CF
      CDA=CDA2
      CDB=CDB2
      CDG=CDG2
      GO TO 332
  331 CDA=ST*CF
      CDB=ST*SF
      CDG=CDG*CF
      GO TO 332
    1 RETURN
      END
      SUBROUTINE BOIING (EO,ES)
C
C          ESTA SUBROTINA AMOSTRA UMA ENERGIA PARA O FOTON
C          ESPALHADO DADA PELA FORMULA DE KLEIN-NISHINA
C          UTILIZANDO A TECNICA DE REJEICAO.
C
C
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
      COMMON IU
      A=EO/0.511
    2 R=RANDO(0)
      X=(1.+R*2.*A)/(1.+2.*A)
      CT=1.+1./A-1./(A*X)
      P=(2.*A*(1.+A))/((1.+2.*A)**2)
      Q=(1.-2./A-2./(A*A))*DLOG(1.+2.*A)
      T=4./A
      G=P+Q+T
      FX=(X+1./X+CT*CT-1.)/G
      R=RANDO(0)
      TEST=R*((1./(1.+2.*A)+1.+2.*A))/G
      IF(TEST-FX) 1,1,2
    1 ES=EO*X
      RETURN
      END
      SUBROUTINE DATA (RF, RD, AD, P, HD, FP, WP, XE, YE, ZE, DE, ACOS,
     *BCOS, GCOS, IFONTE)
      IMPLICIT REAL * 8 (A-H,O-Z)
      COMMON IU
C
C               ESTA SUBROTINA CALCULA O PESO GEOMETRICO, AS
C          COORDENADAS DE ENTRADA DO FOTON, AS POSSIVEIS CO-
C          ORDENADAS DE SAIDA, A DISTANCIA DE PERCURSO PROVA-
C          VEL DENTRO DO DETETOR E OS COSSENOS DIRETORES UTI
C          LIZANDO O METODO DE MONTE CARLO.
C
C          SELECAO DO TIPO DE FONTE
```

```
C
      PI=3.1415926
C
      IF (FP) 8,8,41
C
    8 IF (HO) 90,90,9
C
    9 IF (RF) 13,13,60
   13 IFONTE=2
C
   10 IF (P-RD) 20,30,30
C
C           SELECAO DA DIRECAO INICIAL
C
C           FONTE NA REGIAO CILINDRICA ACIMA DA FACE CIRCULAR DO DETETOR
C
   20 TETA7=DATAN((RD+P)/HO)
      TETAC=DATAN((RD-P)/HO)
      TETA4=0.0
      X=RANDD(0)
      TETA=DARCOS(1-X*(1-DCOS(TETA7)))
      W1=0.5*(DCOS(TETA4)-DCOS(TETA7))
      IF (TETA-TETAC) 11,11,12
   11 X=RANDD(0)
      ALFA=2*PI*X
      W2=1.0
      WP=W1*W2
      SEGCA=P*DCOS(ALFA)+DSQRT(RD*RD-P*P*DSIN(ALFA)*DSIN(ALFA))
      GO TO 14
   12 TTETA=DTAN(TETA)
      ALFA7=DARCOS((P*P+HO*HO*TTETA*TTETA-RD*RD)/(2.*HO*P*TTETA))
C
      X=RANDD(0)
C
      ALFA=ALFA7*(2*X-1)
      SEGCA=P*DCOS(ALFA)+DSQRT(RD*RD-P*P*DSIN(ALFA)*DSIN(ALFA))
      W2=ALFA7/PI
      WP=W1*W2
      GO TO 14
C
C           FONTE FORA DA REGIAO CILINDRICA E COM HO.GT.0.0
C
   30 ALFA7=DARSIN(RD/P)
      X=RANDD(0)
      ALFA=ALFA7*(2*X-1)
      W2=ALFA7/PI
      SEGCA=P*DCOS(ALFA)+DSQRT(RD*RD-P*P*DSIN(ALFA)*DSIN(ALFA))
      TETA7=DATAN(SEGCA/HO)
      SEGCB=P*DCOS(ALFA)-DSQRT(RD*RD-P*P*DSIN(ALFA)*DSIN(ALFA))
      TETAC=DATAN(SEGCB/HO)
      TETA4=DATAN(SEGCB/(HO+AD))
C
      X=RANDD(0)
C
      TETA=DARCOS(DCOS(TETA4)-X*(DCOS(TETA4)-DCOS(TETA7)))
      W1=0.5*(DCOS(TETA4)-DCOS(TETA7))
      WP=W1*W2
   17 G=SEGCB/DTAN(TETA)
      ZE=HO+AD-G
      IF (AD-ZE) 14,14,19
C
C           O FOTON ENTROU PELO LADO DO DETETOR
C
```

```
   19 XE=SEGCE*CSIN(ALFA)
      YE=SEGCE*CCCS(ALFA)-P
      GG=SEGCA/DTAN(TETA)
      ZS=HC+AC-SEGCA/CTAN(TETA)
      IF (ZS) 22,22,23
C
C          O FCTCN SE CIRIGE AO FUNCC CC CETETOR
C
   22 ZS=0.0
      SEGCG=(HC+AC)*CTAN(TETA)
      XS=SEGCG*DSIN(ALFA)
      YS=SEGCG*CCCS(ALFA)-P
      CE=ZE/CCCS(TETA)
C
      GC TC 22C
C
C          C FOTCN SE CIRIGE AC LADO CO CETETOR
C
   23 XS=SEGCA*DSIN(ALFA)
      YS=SEGCA*CCCS(ALFA)-P
      SAB=SEGCA-SEGCB
      DE=SAB/CSIN(TETA)
C
      GO TC 22C
C
C                C FCTCN ENTRCU PCR CIMA CC CETETOR
C
   14 EA=SEGCA-HC*CTAN(TETA)
      ZS=AC-EA/DTAN(TETA)
      IF (ZS) 15,16,16
C
C          O FOTCN SE CIRIGE AC FUNDC DC DETETCR
C
   15 SCE=HC*CTAN(TETA)
      XE=SCE*CSIN(ALFA)
      YE=SCE*CCCS(ALFA)-P
      ZE=AC
      SEGCG=(HC+AC)*CTAN(TETA)
      XS=SEGCG*CSIN(ALFA)
      YS=SEGCG*DCCS(ALFA)-P
      ZS=0.0
      CE=AC/CCCS(TETA)
C
      GC TC 22C
C
C                C FOTCN SE DIRIGE AO LACC CO DETETOR
C
   16 SOE=HC*DTAN(TETA)
      XE=SCE*CSIN(ALFA)
      YE=SCE*CCCS(ALFA)-P
      ZE=AC
      YS=SEGCA*CCCS(ALFA)-P
      XS=SEGCA*DSIN(ALFA)
      CE=EA/CSIN(TETA)
C
      GO TC 22C
C
C          FCNTE FCRA CA REGIAC CILINCRICA E CCM HC.LE.0.0
C
   90 RSP=RC/P
      ALFA7=CARSIN(RSP)
      X=RANCC(0)
      ALFA=ALFA7*(2*X-1)
```

```
      W2=ALFA7/PI
      SEGCA=P*DCOS(ALFA)+DSQRT(RC*RC-P*P*DSIN(ALFA)*DSIN(ALFA))
      SEGCB=P*DCOS(ALFA)-DSQRT(RC*RC-P*P*DSIN(ALFA)*DSIN(ALFA))
      TETA7=PI/2.0+DATAN(DABS(HC)/SEGCB)
      TETA4=DATAN(SEGCB/(AC-DABS(HC)))
      X=RANDC(C)
      TETA=DARCOS(DCOS(TETA4)-X*(DCOS(TETA4)-DCOS(TETA7)))
      W1=0.5*(DCOS(TETA4)-DCOS(TETA7))
      WP=W1*W2
      IFONTE=2
C
C          O FOTON TEM DIRECAO INICIAL DESCENDENTE
C
   18 IF(TETA-PI/2.0) 118,119,119
  118 G=SEGCB/DTAN(TETA)
      ZE=HC+AD-G
      YE=SEGCB*DCOS(ALFA)-P
      XE=SEGCB*DSIN(ALFA)
      GG=SEGCA/DTAN(TETA)
      ZS=HC+AC-GG
      IF(ZS) 22,22,23
C
C          O FOTON TEM DIRECAO INICIAL ASCENDENTE
C
  119 G=SEGCB*DTAN(TETA-PI/2.0)
      ZE=HC+AC+G
      YE=SEGCB*DCOS(ALFA)-P
      XE=SEGCB*DSIN(ALFA)
      GG=SEGCA*DTAN(TETA-PI/2)
      ZS=HC+AC+GG
      IF(ZS-AC) 23,24,24
C
C          O FOTON SE DIRIGE A SUPERFICIE CIRCULAR SUPERIOR DO DETETOR
C
   24 ZS=AD
      SEGCG=DABS(HC)/DTAN(TETA-PI/2.0)
      XS=SEGCG*DSIN(ALFA)
      YS=SEGCG*DCOS(ALFA)-P
      DE=ZE/DCOS(TETA)
C
      GO TO 220
C
C          FONTE TIPO FEIXE PARALELO
C
   41 X=RANDC(C)
      P=RF*DSQRT(X)
      XE=0.0
      YE=P
      ZE=AC
      XS=0.0
      YS=P
      ZS=0.0
      DE=AD
      ACOS=0.0
      BCOS=0.0
      GCOS=-1.D0
      WP=1.0
      IFONTE=1
C
      GO TO 21
C
C          FONTE EM DISCO
C
```

```
   60 X=RANCO(C)
      F=RF*CSCRT(X)
      IFONTE=3
C
      GC TC 10
C
C
C          COSSENCS DIRETCRES
C
  220 ACCS=(XS-XE)/CE
      BCOS=(YS-YE)/DE
      GCOS=(ZS-ZE)/CE
C
   21 RETURN
      END
      SUBRCUTINE SUSY (EC, SIGMAC, SIGMAF, SIGMAP, SIGMAT)
      IMPLICIT REAL * 8 (A-H,O-Z)
C
C          ESTA SUBRCTINA FCRNECE AS SECCES CE CHCCUE PARA
C          C ICCETC CE SCCIC PARA ENERGIAS ATE 1C MEV
C
C     SIGMAC = SECAC CE CHOCUE PARA O EFEITC CCMPTCN
C     SIGMAF = SECAC CE CHCCUE PARA O EFEITC FCTCELETRICO
C     SIGMAP = SECAC CE CHCCUE PARA FCRMACAC DE PARES
C     SIGMAT = SECAO CE CHCCUE TCTAL
C
C          CBS.
C
C          CS CCEFICIENTES DCS PCLINCMICS PARA C EFEITC CCMPTCN
C          E CE FORMACAC DE PARES FORAM RETIRADCS DA PUBLICACAO
C          CE F. T. AVIGNONE E J. A. JEFFREYS EM NUCL. INSTR. AND
C          METH. 179(1981)159, E CS CCEFICIENTES PARA C EFEITC
C          FCTCELETRICC FCRAM CALCULACOS POR UM AJUSTE PCR
C          MINIMCS CUACRACCS DCS DADCS CBTICCS PCR E. STCRM E
C          H. I. ISRAEL, LA-3753
C
C
C          SECAO CE CHCCUE CCMPTCN
C
      IF(EC.GT.0.04) GC TC 1
      SIGMAC=C.63-2.46*EC+9.94*EO*EO
      GO TC 2222
    1 IF(EC.GT.0.15) GO TO 2
      SIGMAC=C.6C8-1.74*EC+3.2*EC*EC
      GO TC 2222
    2 IF(EC.GT.0.7) GC TC 3
      SIGMAC=C.51-C.731*EC+C.507*EC*EC
      GC TO 2222
    3 IF(EC.GT.3.5) GC TC 4
      SIGMAC=C.355-C.222*EC+C.C772*EO*EC-C.0102*EC*EC*EC
      GC TC 2222
    4 SIGMAC=C.167-C.C26*EC+C.193E-2*EC*EC-0.52E-4*EC*EC*EC
C
C          SECAO CE CHCCUE PARA C EFEITC FCTCELETRICO
C
 2222 IF(EC.GT.0.01) GC TC 21
      SIGMAF=6CC.
      GO TC 3333
   21 IF (EC.GT.0.02) GC TC 22
      SIGMAF=1.9678E+3-1.96196E+5*EC+5.C792E+6*EC*EC
      GC TC 3333
   22 IF(EC.GT.0.03316) GC TC 23
      SIGMAF=3.2876E+2-1.764686E+4*EC+2.49437E+5*EC*EC
```

```
      GC TC 3333
   23 IF(EO.GT.C.C5) GC TC 24
      SIGMAF=5.9192E+2-2.117745E+4*EO+2.C146E+5*EO*EO
      GC TC 3333
   24 IF(EC.GT.C.C8) GC TC 25
      SIGMAF=1.9245E+2-4.50833E+3*EO+2.78666E+4*EO*EC
      GO TC 3333
   25 IF(EC.GT.0.15) GC TO 26
      SIGMAF=4.8158E+1-6.6484E+2*EC+2.3685E+3*EC*EO
      GO TC 3333
   26 IF (EC.GT.C.3) GC TC 27
      SIGMAF=1.8C23-5.1597*EO-C.1C345*EC*EC
      GO TC 3333
   27 IF (EO.GT.0.5) GC TC 28
      SIGMAF=1.1126-4.C767*EO+3.963*EO*EO
      GC TC 3333
   28 IF(EC.GT.C.8) GC TO 29
      SIGMAF=C.3155-C.7227*EC+C.44337*EC*EC
      GC TC 3333
   29 IF(EC.GT.1.5) GC TO 3C
      SIGMAF=0.080928-C.1C334*EO+C.C357CC7*EO*EO
      GC TC 3333
   30 IF(EC.GT.3.0) GC TO 31
      SIGMAF=0.C196932-0.01206*EC+0.002C6*EC*EO
      GO TC 3333
   31 IF(EC.GT.5.0) GC TC 32
      SIGMAF=C.CC6437-C.CC2C123*EC+C.0C0185*EC*EC
      GO TC 3333
   32 SIGMAF=0.00295-C.000538*EO+2.997E-5*EC*EO
C
C          SECAO CE CHCQUE PARA FORMACAC DE PARES
C
 3333 IF(EO.GT.1.C22) GC TC 3C1
      SIGMAF=C.0
      GC TC 4444
  301 IF(EC.GT.1.28) CO TO 302
      SIGMAP=-C.215E-3+0.209E-3*EO
      GO TC 4444
  302 IF(EC.GT.3.0) GC TO 3C3
      SIGMAP=-C.0133+C.907E-2*EC+0.107E-2*EC*EO
      GO TC 4444
  303 IF(EC.GT.4.0) GC TC 3C4
      SIGMAP=-C.0245+C.C184*EC-C.8E-3*EC*EC
      GC TC 4444
  304 IF(EC.GT.8.0) GC TC 305
      SIGMAP=-0.C197+C.C166*EC-C.633E-3*EC*EC
      GC TC 4444
  305 SIGMAP=C.C312+C.526E-2*EC
C
C          SECAC DE CHCQUE TCTAL
C
 4444 SIGMAT=SIGMAF+SIGMAC+SIGMAP
      RETURN
      END
       SUBROUTINE FCFA (FINAL,DELTAE)
C
C          ESTA SUBROTINA FORNECE UMA GRAFICACAC DC ESPECTRC
C          EM ESCALA SEMI-LOGARITMICA
C
C
C        CBS. CS VALCRES GRAFICADCS CORRESPCNDEM AOS
C             CANAIS 1, 4, 7, ..., 144.
C
```

```
      REAL * 8 FINAL,DELTAE
      DIMENSION OUT(100),YPR(11),A(288),FINAL(1)
      DATA ANG/'*'/,M/2/,N/144/,NLL/50/,BLANK/' '/
      DO 150 I=1,144
      A(I)=I
      IF(FINAL(I)-0.001) 15,150,150
15    FINAL(I)=0.001
150   A(144+I)=DLOG10(FINAL(I))
      WRITE (6,1)
1     FORMAT(1H1,50X,32HESPECTRO DE DEPOSICAO DE ENERGIA)
      WRITE (6,4)
4     FORMAT(1H ,57X,17H(ESCALA SEMI-LOG))
C     DETERMINACAO DA ESCALA PARA O EIXO X
      XSCAL=(A(N)-A(1))/(FLOAT(NLL-1))
C     DETERMINACAO DA ESCALA PARA O EIXO Y
      YMIN=-3.00
      YMAX=0.00
      YSCAL=(YMAX-YMIN)/99.00
C     DETERMINACAO DA POSICAO DE IMPRESSAO DE X
     L=1
     MY=M-1
     K=1
     I=1
45   F=I-1
     G=K-1
     XPR=F*XSCAL
     XXPR=G*XSCAL*DELTAE
     IF (A(L)-XPR) 50,50,70
C    DETERMINACAO DA POSICAO DE IMPRESSAO DE Y
50   DO 55 IX=1,100
55   OUT(IX)=BLANK
     DO 60  J=1,MY
     LL=L+J*N
     JP=((A(LL)-YMIN)/YSCAL)+1.0
     OUT(JP)=ANG
60   CONTINUE
C    IMPRESSAO DAS LINHAS
     WRITE (6,2) XXPR,(OUT(IZ),IZ=1,100)
     L=L+3
     GO TO 80
70   WRITE (6,3)
80   I=I+3
     K=K+1
     IF (I-N) 45,84,86
84   XPR=A(N)
     GO TO 50
86   WRITE (6,7)
     YPR(1)=0.001
     DO 90 KN=1,3
90   YPR(KN+1)=YPR(KN)*10.00
     WRITE (6,8) (YPR(IP),IP=1,4)
     WRITE (6,6)
     RETURN
2    FORMAT(1H ,F11.4,5X,100A1)
3    FORMAT(1H )
6    FORMAT(1H0,55X,19HNUMERO DE CONTAGENS)
7    FORMAT(1H ,16X,100H.
    1                    .
8    FORMAT(1H0,9X,F10.4,3(22X,F10.4))
     END
     FUNCTION RANDO(XXX)
     COMMON IU
     IU=IU*65539
     IF(IU) 5,6,6
   5 IU=IU+2147483647+1
   6 YFZ=IU
     RANDO=YFZ*0.4656613E-9
     RETURN
     END
```