INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES
Autarquia associada à Universidade de São Paulo

**DESENVOLVIMENTO DE UM SOFTWARE DE ESPECTROMETRIA GAMA
PARA ANÁLISE POR ATIVAÇÃO COM NÊUTRONS UTILIZANDO O
CONCEITO DE CÓDIGO LIVRE**

SÍLVIO ROGÉRIO DE LÚCIA

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

**Orientadora:
Dra. Vera Akiko Maihara**

**SÃO PAULO
2008**

**Dedico esse trabalho em especial
à minha esposa e aos meus filhos
pelo estímulo e paciência.**

AGRADECIMENTOS

Muitas pessoas, de forma direta ou indireta, contribuíram para a realização deste trabalho e a todas elas quero expressar meu reconhecimento e minha gratidão. Agradeço em especial,

À Dra. Vera Akiko Maihara, pela orientação dada a este trabalho, e pela confiança em mim depositada.

Ao Dr. Mario Olímpio Menezes, que me apoiou e contribuiu para a realização deste trabalho.

Ao IPEN/CNEN-SP, pela oportunidade de realizar este trabalho.

À Maria Aparecida H. Trezza, pelo apoio e oportunidade de realizar este trabalho.

DESENVOLVIMENTO DE UM SOFTWARE DE ESPECTROMETRIA GAMA PARA ANÁLISE POR ATIVAÇÃO COM NÊUTRONS UTILIZANDO O CONCEITO DE CÓDIGO LIVRE.

SÍLVIO ROGÉRIO DE LÚCIA

RESUMO

O Laboratório de Análise por Ativação com Nêutrons (LAN) do Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (IPEN), utiliza esta técnica analítica multielementar, baseada na irradiação de uma amostra por um feixe de nêutrons oriundos de um reator nuclear, que induz a radioatividade; que é medida em um espectrômetro de raios gama, para a obtenção dos espectros de raios gama. Neste trabalho é implementado um software denominado de “SAANI” (Software Análise por Ativação com Nêutrons Instrumental) para análise de espectros de raios gama, desenvolvido para os usuários do laboratório LAN-IPEN, com a filosofia de software livre, para a substituição do software existente VISPECT/VERSÃO 2, e tem como características principais: tornar a interface mais amigável; facilitar a padronização dos procedimentos realizados pelos pesquisadores, estudantes e técnicos; ser extensível com a utilização da tecnologia de plugins; multiplataforma; código livre. O software foi desenvolvido utilizando a linguagem de programação Python, a biblioteca gráfica Trolltech Qt e algumas de suas extensões científicas. Os resultados preliminares obtidos utilizando o software “SAANI” foram comparados aos obtidos com o software existente e foram considerados bons. Algumas diferenças encontradas foram verificadas oriundas de erros de precisão na implementação do software. O software SAANI está instalado nos computadores de usuários selecionados para a execução de rotinas de análise para uma maior verificação de sua robustez, precisão e usabilidade.

DEVELOPMENT OF A GAMMA RAY SPECTROMETRY SOFTWARE FOR NEUTRON ACTIVATION ANALYSIS USING THE OPEN SOURCE CONCEPT

SÍLVIO ROGÉRIO DE LÚCIA

ABSTRACT

This study developed a specific software for gamma ray spectra analysis for researchers of the Neutron Activation Laboratory (LAN), which was named SAANI (Instrumental Neutron Activation Analysis Software). The LAN laboratory of the Institute for Research and Nuclear Energy (IPEN-CNEN/SP), uses a multielemental analytical technique, based on irradiation of a sample by a flux of neutrons from a nuclear reactor, which induces radioactivity. The sample is then placed in a gamma-ray spectrometer, to obtain the spectrum. With free software philosophy in mind, this software will replace the existing software VISPECT / VERSION 2. The new software's main features are: a friendlier interface; easier standardization procedure carried out by LAN staff and researchers; adapted to the use of plug technology; multiplatform and code free. The software was developed using the programming Python language, the library Trolltech Qt graphics and some of their scientific extensions. Preliminary results using the SAANI software were compared to those obtained with the existing software and were considered good. There were some errors in accuracy during the implementation of the software. The SAANI software has been installed in selected computers to be used for routine analysis in order to verify its strength, accuracy and usability.

SUMÁRIO

CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO	10
1.1 – Objetivo	12
1.2 – Estrutura do trabalho	13
 CAPÍTULO 2 - METODOLOGIAS	 14
2.1 – Análise por Ativação com Nêutrons – AAN	14
2.1.1 – Princípio de Análise por Ativação com Nêutrons	14
2.1.2 – Detector e Geometria	16
2.1.3 – Radiação de fundo - Background (BG)	16
2.1.4 – Calibração do sistema de detecção	17
2.1.5 – Medição da Radiação Gama	17
2.2 – Processo de Desenvolvimento de Software	19
2.2.1 – Metodologia de Desenvolvimento de Software	21
2.2.2 – Metodologia de Desenvolvimento de Software Livre	24
2.2.3 – Modelo de Qualidade de Software	26
 CAPÍTULO 3 - MODELAGEM DO SOFTWARE	 28
3.1 – Software VISPECT/VERSÃO 2	30
3.2 – Requisitos Levantados do Software Desenvolvido	33
3.3 – Propostas do Projeto do Software SAANI	33
3.4 – Especificação	34
3.4.1 – Diagrama de Caso de Uso	34
3.4.1.1 – Caso de Uso: Acessar Software	35
3.4.1.2 – Caso de Uso: Abrir Projeto	36
3.4.1.3 – Caso de Uso: Recuperar Espectro	36
3.4.1.4 – Caso de Uso: Configurar Arquivo	37
3.4.1.5 – Caso de Uso: Verificar Cálculo	37
3.4.1.6 – Caso de Uso: Verificar Concentrações	38
3.4.2 – Modelo de Classes	38
 CAPÍTULO 4 - IMPLEMENTAÇÃO DO SOFTWARE	 41
4.1 – Técnicas e Ferramentas Utilizadas	41
4.1.1 – Python	41
4.1.2 – QT	42
4.2 – Implementação do Software SAANI	43
4.2.1 – Leitura do Arquivo de Espectro	43
4.2.2 – Apresentação do gráfico	45
4.2.3 – Configuração do Espectro	45
4.2.4 – Identificação dos picos	46
4.2.5 – Cálculos dos resultados	47

4.2.6 – Cálculo das concentrações	51
CAPÍTULO 5 – MANUAL DE USO DO SOFTWARE	53
5.1 – Projeto	53
5.2 – Inserir Arquivo do Espectro no Projeto	53
5.3 – Configurando Arquivo de Espectro	54
5.4 – Verificando Resultado dos Cálculos	55
5.5 – Verificando Resultado das Concentrações	55
5.6 – Salvando Projeto	55
CAPÍTULO 6 - RESULTADOS E DISCUSSÕES	56
6.1 – Comparação entre o softwares VISPECT/VERSÃO 2 e o SAANI	56
6.2 – Resultados Obtidos	63
6.2.1 – Resultados do processamento dos espectros	63
6.2.2 – Resultados do cálculo das concentrações	66
CAPÍTULO 7 - CONCLUSÕES	68
ANEXOS	69
Anexo A – Listagem do software SAANI: espectro MT4-B.CHN	70
Anexo B – Listagem do software VISPECT/VERSAO 2: espectro MT4-B.CHN	72
Anexo C – Listagem do software SAANI: espectro 112-1B.CHN	74
Anexo D – Listagem do software VISPECT/VERSAO 2: espectro 112-1B.CHN	76
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	78

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Caso de Uso: Acessar Software	35
Tabela 2 - Caso de Uso: Abrir Projeto	36
Tabela 3 - Caso de Uso: Recuperar Espectro	36
Tabela 4 - Caso de Uso: Configurar Arquivo	37
Tabela 5 - Caso de Uso: Verificar Cálculo	38
Tabela 6 - Caso de Uso: Verificar Concentrações	38
Tabela 7 - Lay-out dos arquivos de espectros: "CHN" e "MCA"	43
Tabela 8 – Código fonte para ler o arquivo de espectro	44
Tabela 9 – Código fonte para exibir o gráfico	45
Tabela 10 - Código fonte para chamar o cálculo dos resultados	48
Tabela 11 - Resultados dos cálculos	51
Tabela 12 - Comparação do espectro: 112-1B.CHN.....	64
Tabela 13 - Comparação do espectro: MT4-B.CHN	65
Tabela 14 - Comparação das concentrações dos elementos	66

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Seqüência de eventos do mecanismo da reação nuclear tipo (n, γ).....	15
Figura 2 - Desenvolvimento de sistemas - modelo cascata	22
Figura 3 - Desenvolvimento de sistemas - modelo interativo incremental	24
Figura 4 - Etapas do processo da análise de espectros de raios gamas.....	29
Figura 5 - Tela do software VISPECT/VERSÃO 2	30
Figura 6 - Casos de Usos	35
Figura 7 - Exemplificando janelas para busca dos picos no espectro.....	47
Figura 8 - Recorte do espectro.....	49
Figura 9 - Tela da apresentação dos resultados das concentrações	52
Figura 10 - Parâmetros do arquivo de espectro de um padrão	54
Figura 11 - VISPECT/VERSÃO 2: Seleção tipo formato arquivo	56
Figura 12 - VISPECT/VERSÃO 2: Digitando nome do arquivo e extensão	57
Figura 13 - SAANI: Tela Principal opção de abrir arquivo de espectro	57
Figura 14 - VISPECT/VERSÃO 2: Tela da apresentação do gráfico	58
Figura 15 - SAANI: Tela da apresentação do gráfico	59
Figura 16 - SAANI: Seleção de uma área do gráfico	59
Figura 17 - SAANI: Área selecionada ampliada	60
Figura 18 - VISPECT/VERSÃO 2: Relatório impresso dos resultados.....	61
Figura 19 - SAANI: Resultados apresentados no vídeo.....	61
Figura 20 - SAANI: Resultados das concentrações apresentados no vídeo	62

CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO

O Laboratório de Análise por Ativação Neutrônica (LAN-IPEN) é um dos principais laboratórios no país que realiza análises multielementares utilizando o método de ativação neutrônica e está situado no Centro do Reator Nuclear de Pesquisas (CRPq) do Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (IPEN-CNEN/SP).

O método de Análise por Ativação com Nêutrons (AAN) é conhecido por sua sensibilidade para detecção e determinação de um grande número de elementos químicos. O método consiste basicamente da produção de radionuclídeos artificiais a partir de elementos estáveis por meio da irradiação de uma amostra sob um fluxo de nêutrons e medida das radiações emitidas pelos radionuclídeos formados.

Dentre os diversos materiais (amostras) que podem ser analisados utilizando a Análise por Ativação com Nêutrons, podem-se citar: amostras geológicas (solos, rochas, carvão, minérios, concentrados minerais); plásticos, resinas e outros produtos industriais; catalisadores; petróleo; amostras arqueológicas; metais e ligas: aços, silício metálico, ligas nióbio-tântalo; amostras agropecuárias (pêlos de animais, solos, subprodutos agro-industriais); tecidos animais e humanos (cabelos, ossos, unhas, etc.); plantas e vegetais; alimentos e dietas e amostras ambientais.

O LAN-IPEN utiliza o método de Análise por Ativação Comparativo, onde amostras e padrões são irradiados juntos sob as mesmas condições de tempo de irradiação e fluxo de nêutrons. A concentração de um elemento particular de interesse é obtida comparando-se as taxas de contagens dos espectros de amostra e padrão, obtidas a partir das mesmas condições de geometria de contagem.

Como cada radioisótopo tem suas próprias características de meia-vida e energia (ou energias) de raios gama, é possível, em geral, identificar os isótopos dos elementos. A quantidade desse elemento na amostra é considerada como diretamente proporcional à taxa de contagens de raios gama.

Para análise dos espectros de raios gama utiliza-se uma série de rotinas para localizar e quantificar os picos, calcular os resultados como energia dos picos, área líquida, área do BG, resolução em energia, canal da mediana, canal inicial, largura do pico em número de canais, atividades em contagens/segundos, desvio padrão da atividade em porcentagem. Estes cálculos são realizados para todos os espectros de amostra e padrão, que fazem parte de uma análise gerando as matrizes contendo os resultados dos cálculos.

Para a realização dessas análises, o LAN-IPEN conta com um conjunto de softwares. Esses softwares, apesar de utilizarem praticamente o mesmo conjunto de dados, são independentes e executados em seqüência, requerendo a entrada de um mesmo conjunto de dados em cada uma das diferentes fases de análise.

Existem diversos softwares para a análise de dados de espectrometria gama (IAEA, 1998). Alguns disponíveis comercialmente, alguns disponíveis gratuita e livremente e outros distribuídos com os equipamentos de espectroscopia do fabricante.

Dentre os vários softwares podem-se citar: GammaVision-32 feito pela Ortec (ORTEC, 2006), Genie-2000, feito pela Canberra (CAMBERRA, 2006), Hypermet-PC, feito pelo “Institute of Isotopes, Budapest, Hungary” e HyperLab (SIMONITS,2003).

Estes softwares são distribuídos sob a forma de “códigos executáveis” e “fechados”, ou seja, não permitem que se desenvolvam novas funcionalidades ou mesmo que sejam integrados a outros softwares para ampliação de suas capacidades.

O LAN-IPEN, utiliza para a análise dos espectros o software VISPECT/VERSÃO 2, desenvolvido na linguagem TURBO BASIC, pelo Dr. Denis Piccot, do Laboratório Pierre Sue, do Centro de Estudos Nucleares de Saclay. Apesar de se possuir o código fonte deste software, a linguagem utilizada no seu desenvolvimento é bastante limitada, só pode ser executada em ambiente Windows™; a interface do usuário do VISPECT/VERSÃO 2 é também bastante limitada, o que propicia maior probabilidade de erro na entrada de dados. Para o cálculo das concentrações dos elementos são utilizados outros softwares, como o desenvolvido no próprio laboratório chamado de espectro ou a planilha do Excel.

A proposta deste trabalho é o desenvolvimento de um software, para Análise de Espectros de Raios Gama, com a filosofia de software livre, para a

substituição do software existente VISPECT/VERSÃO 2, e tem como características principais: 1) tornar a interface mais amigável; 2) facilitar a padronização dos procedimentos realizados pelos pesquisadores, estudantes e técnicos; 3) ser extensível com a utilização da tecnologia de plugins; 4) multiplataforma; 5) código livre.

O desenvolvimento de software de modo organizado, planejado e controlado é objeto da Engenharia de Software, que tem suas atividades bem definidas de acordo com Pressman (PRESSMAN, 2002).

Este trabalho visa o desenvolvimento de um software de espectrometria gama para análise por ativação com nêutrons utilizando o conceito de software livre integrando processos e sistemas, desenvolvido para os usuários do laboratório LAN-IPEN.

Para o desenvolvimento deste software, denominado SAANI (Software para Análise por Ativação com Nêutrons Instrumental) foi efetuado um levantamento detalhado dos procedimentos executados pelos usuários do LAN-IPEN, bem como dos softwares utilizados e dos processos da análise dos materiais.

Para a validação dos resultados e das rotinas implementadas no novo software foi realizada uma série de testes com espectros reais e comparados com os resultados dos procedimentos adotados de forma rotineira pelo LAN-IPEN para as análises dos materiais.

1.1 – Objetivo

O objetivo deste trabalho é desenvolver um software livre, multiplataforma, para Análise de Espectros de Raios Gama, aplicado especificamente a Análise por Ativação com Nêutrons que é realizada no Laboratório de Análise por Ativação Neutrônica (LAN) do IPEN-CNEN/SP, facilitando a obtenção dos resultados de análise, de modo que os dados obtidos no espectrômetro sejam diretamente processados pelo aplicativo, eliminando os erros causados pela entrada manual nos softwares para os cálculos das concentrações (Excel e/ou Espectro) atualmente utilizados.

1.2 – Estrutura do trabalho

O trabalho está estruturado em 7 capítulos. O primeiro é esta Introdução; o segundo capítulo, Fundamentação Teórica, apresenta os conceitos básicos sobre Análise por Ativação com Nêutrons; o terceiro capítulo, Desenvolvimento do Software, apresenta conceitos sobre o processo de desenvolvimento de software – engenharia de software, metodologias e a descrição das etapas realizadas. O capítulo quatro, Implementação, apresenta os detalhes da implementação do software, descrevendo as ferramentas utilizadas. No quinto capítulo, Etapas para uso do Software SAANI, é apresentado um “manual resumido do usuário”, que servirá de base para a documentação do software. No sexto capítulo, Resultados e Discussões, são apresentados os principais resultados obtidos e algumas discussões pertinentes a estes resultados. O capítulo sete, Conclusões, apresenta as principais conclusões deste trabalho e também algumas sugestões para trabalhos futuros.

CAPÍTULO 2 - METODOLOGIAS

Neste capítulo são apresentados alguns conceitos que fundamentam o projeto do software de espectrometria gama para o laboratório de análises por ativação com nêutrons.

2.1 – Análise por Ativação com Nêutrons – AAN

A Análise por Ativação com Nêutrons (AAN) originou-se com os trabalhos de Hevesy e Levi em 1936, mas não se tornou um método prático de análise até o desenvolvimento do reator nuclear como uma fonte de nêutrons de alta intensidade. A introdução dos detectores de raios gama por cintilação NaI(Tl) e o de alta resolução Ge(Li) estabeleceram a AAN como uma técnica analítica sensível e de boa precisão e exatidão, útil para análises multielementares quali e quantitativas dos elementos principais, elementos menores e elementos traço, em amostras dos mais variados campos de aplicação (ALFASSI, 1990).

2.1.1 – Princípio de Análise por Ativação com Nêutrons

O princípio da análise por ativação com nêutrons é a interação de um núcleo alvo com nêutrons, que induz uma reação nuclear em um núcleo de um elemento alvo. O produto da reação é detectado e quantificado por um fóton pronto ou emissão de uma partícula ou, mais comumente, por suas propriedades de decaimento (meia-vida).

A reação nuclear do tipo (n,γ) , conforme mostra a Figura 1, produz o radionuclídeo de interesse para a realização de uma análise, por meio do método de ativação com nêutrons, que ocorre quando um feixe de partículas ativadoras (nêutrons) interage com o núcleo alvo, por meio de colisão inelástica, originando um núcleo composto de alta energia de excitação. Rapidamente este núcleo instável passa para uma configuração mais estável, emitindo raios gama “prontos” e transformando-se em um núcleo radioativo. Esse núcleo radioativo emitirá raios

gama e partículas beta, com uma meia-vida característica, formando por fim um núcleo estável. Por meio da energia da radiação gama de decaimento e da meia-vida, o radioisótopo formado na reação nuclear pode ser identificado, permitindo assim realizar análises qualitativas e quantitativas do elemento contido na amostra.

Figura 1 - Seqüência de eventos do mecanismo da reação nuclear tipo (n, γ).

Cada fóton de raio gama tem uma energia discreta e esta energia é característica do isótopo fonte. Isto forma a base da espectrometria de raios gama; através da medição das energias dos fótons de raios gama, pode-se determinar a fonte da radiação (IAEA, 2003).

O espectro de energia dos raios gama representa a distribuição de energia dos fótons emitidos na fonte. Cada linha do espectro (ou espectro de “emissão”) mostra a energia e a intensidade relativa das emissões de raios gama nas séries de decaimento nuclear.

Cada radioisótopo gera um pico definido, representando a energia dos fótons diretamente transmitida. Isto é superposto no espectro dos fótons espalhados por efeito Compton que mostram um “continuum” de energias até a máxima energia dos fótons emitidos pelo isótopo. Este “continuum” é devido a eventos de espalhamentos simples e múltiplos entre a fonte e o detector.

Na prática, o espectro do fluxo de raios gama registrado sempre terá as contribuições dos espalhamentos e também a influência da resposta do detector.

2.1.2 – Detector e Geometria

Detectores semicondutores e cintiladores são os tipos mais comuns utilizados em espectrometria gama, em particular os de germânio hiperpuro (HPGe), germânio-lítio (Ge(Li)), NaI(Tl). Estes detectores modificam o espectro consideravelmente.

Os principais aspectos da resposta do detector são:

- A eficiência do detector
- A resolução em energia
- O tempo morto

A eficiência do detector está relacionada à quão bem o detector absorve os raios gama que o atingem. A resolução em energia é a medida da habilidade do detector em distinguir entre dois raios gama de energias próximas.

O tempo morto refere-se ao tempo finito requerido para o espectrômetro processar fótons individuais. Outros fatores como eventos de escape, soma accidental e o “joelho” Compton característico podem afetar a forma do espectro de amplitude de pulso. Espectros de fotopicos têm formas Gaussianas.

A espessura da fonte tem um efeito significativo na forma do espectro observado. Com o aumento da espessura da fonte há um aumento no “continuum” Compton devido ao espalhamento na fonte. Os fotopicos são, assim, reduzidos relativamente ao fundo Compton. Como fótons de baixa energia são mais facilmente atenuados do que os de alta energia, este efeito é mais pronunciado em baixas energias.

2.1.3 – Radiação de fundo - Background (BG)

Os espectros de raios gama que são analisados têm sua origem em um espectro da radiação de fundo ou “background” (BG) de um dos sistemas detectores.

Os espectrômetros de raios gama utilizados no LAN-IPEN consistem de um detector de Ge hiperpuro (marca Canberra e/ou Ortec), que está ligado a um microcomputador PC, no qual tem o software de aquisição de dados e a uma eletrônica associada.

O espectro do BG mostra as radiações que estão presentes no ambiente do sistema detector e às quais ele é sensível e que, desse modo, também estarão presentes quando da contagem de uma amostra e farão parte do espectro da mesma, sem ter origem nela.

2.1.4 – Calibração do sistema de detecção

A calibração é feita através de fontes radioativas conhecidas, certificadas que emitem radiações gama, com energias bem definidas. Normalmente fontes de ^{152}Eu e ^{60}Co são utilizadas para fazer a calibração do sistema detector de raios gama, uma vez que possuem radioisótopos que apresentam fotopicos em toda a faixa de energia do espectro, desde baixas energias até altas energias.

O espectro de calibração do sistema para o software tem o intuito de conseguir uma relação canal-energia.

A calibração de um sistema de detecção se divide na calibração em energia e na calibração em resolução.

Para a calibração em energia basta fornecer a energia de pelo menos dois canais do espectro e uma regressão linear da energia em função do número do canal é obtido, ao passo que a calibração em resolução é feita em função da energia, e são os coeficientes destas retas que ficam guardados nos arquivos de calibração, de forma que, quando se faz uma nova análise sob as mesmas condições em que foi feita a calibração, não é necessário refazer a calibração e sim recuperar as informações a partir do arquivo de calibração já existente.

2.1.5 – Medição da Radiação Gama

Por meio dos detectores semicondutores e cintiladores, utilizados em espectrometria gama, ocorre a detecção de raios gama por cristais semicondutores de Ge(Li) ou de Ge hiperpuro, que se dá através dos modos pelos quais a radiação gama interage com a matéria, gerando impulsos elétricos proporcionais à energia da radiação incidente. Desse modo, o detector efetua a contagem dos raios gama por canais, gerando o espectro que pode ser salvo em arquivo de computador.

Levando-se em conta a eficiência do detector, a atividade induzida A_t em um elemento após determinado tempo de irradiação t_i , que pode ser medida por detector adequado, é dada pela seguinte equação (2.1):

$$A_t = \frac{\varepsilon \sigma \Phi N_A m_a f (1 - e^{-\lambda t_i})}{M} \quad (2.1)$$

onde:

- ε Eficiência do detector;
- σ Seção de choque;
- Φ Fluxo de nêutrons;
- N_A Número de Avogadro;
- m_a Massa do elemento, em gramas;
- f Abundância isotópica do nuclídeo alvo;
- M Massa atômica do elemento.

Na AAN não destrutiva ou instrumental (AANI), técnica mais comumente utilizada no LAN do IPEN/CNEN-SP, o radionuclídeo é normalmente quantificado sem que a amostra irradiada sofra um processo químico anterior a espectroscopia de raios gama.

Em princípio, a AANI é um método absoluto de análise e a concentração C_a de um elemento pode ser calculada se a taxa de desintegração absoluta, A_t , é medida e se Φ e σ são conhecidos. A análise absoluta é mais difícil de ser utilizada porque Φ e σ variam com a energia do nêutron.

Como o método absoluto tem sua aplicação restrita, a determinação da concentração C_a do elemento na amostra é realizada pelo método comparativo, no qual a amostra desconhecida tem sua massa determinada e é irradiada simultaneamente com um padrão (material de concentração conhecida do elemento a ser determinado), e após determinado período de tempo, a intensidade e energia dos picos de raios gama são medidos. A comparação entre as atividades específicas induzidas nos padrões e nas amostras desconhecidas é a base para o cálculo da concentração do elemento na amostra.

Estas atividades resultantes, A_a e A_p , respectivamente, são expressas pelas equações (2.2) e (2.3):

$$A_a = \frac{\varepsilon \sigma \Phi N_A m_a f (1 - e^{-\lambda t_i})}{M} \quad (2.2)$$

$$A_p = \frac{\varepsilon \sigma \Phi N_A m_p f (1 - e^{-\lambda t_i})}{M} \quad (2.3)$$

Onde os índices a e p se referem à amostra e ao padrão, respectivamente. A razão entre as equações (2.2) e (2.3) resulta em:

$$\frac{A_a}{A_p} = \frac{m_a}{m_p} \quad (2.4)$$

A concentração C_a do elemento na amostra é, então, expressa por:

$$C_a = \frac{A_a C_p m_p e^{\lambda(t_a - t_p)}}{A_p m_a} \quad (2.5)$$

onde:

- C_p concentração do elemento no padrão;
- t_a tempo de decaimento da amostra;
- t_p tempo de decaimento do padrão.

O termo exponencial na equação (2.5) leva em consideração o decaimento da amostra e do padrão, uma vez que estes não são medidos simultaneamente.

2.2 – Processo de Desenvolvimento de Software

Engenharias de software compreendem tecnologias e práticas utilizadas para criar software para computadores melhorando a produtividade e qualidade. Estas tecnologias e práticas englobam linguagens de programação, bases de dados, ferramentas, plataformas, bibliotecas, padrões e processos.

Esses métodos e técnicas consistem na investigação e especificação da solução de problemas, a partir dos requisitos (dados) levantados.

O desenvolvimento de software de modo organizado, planejado e controlado é objeto da Engenharia de Software. Termos como Processo, Modelo, Método e Metodologia são muitas vezes utilizados para descreverem a atividade de desenvolvimento de software. Embora haja alguma sobreposição nas definições destes termos, eles não são sinônimos (BONA, 2004).

Vários autores definem o Processo de desenvolvimento de software, conforme citado a seguir:

- O Processo de Software é definido por SOMMERVILLE (2003) como: “O processo é um conjunto de atividades e resultados associados que produzem um produto de software”.
- PRESSMAN (2002) oferece a seguinte definição: “...definimos um processo de software como um framework para as tarefas que são necessárias para a construção de software de alta qualidade”.
- De acordo com COSTA (2001), o processo de software tem a seguinte definição: “O processo define quem irá fazer o quê e como será atingido o objetivo. O objetivo é construir um software ou melhorar um existente”.

Estas definições oferecem uma idéia mais clara do que é considerado um processo, diretamente destas, pode-se retirar os seguintes pontos:

- O processo reúne um conjunto de atividades. Como existem atividades que englobam outras atividades, pode-se usar o termo fase para descrever atividades no nível mais alto;
- A definição contempla na prática: procedimentos e métodos, ferramentas e equipamentos, comunicação e pessoas;
- O processo tem como objetivo desenvolver um produto de software. PRESSMAN (2002) restringe o termo a processos que geram “produtos de alta qualidade”, mas se esta restrição for ignorada, pode-se aplicar o termo a qualquer conjunto de atividades que é aplicada com o objetivo de desenvolver software.

O processo direciona as tarefas individuais e do grupo como um todo. O nível de detalhamento de cada processo depende da equipe envolvida no desenvolvimento do software. REZENDE (2002) usa a metáfora da receita de bolo para representar o processo. Quem segue uma receita tem a liberdade de adicionar ou suprir partes, assim também pode ocorrer com o processo, estabelecendo um dinamismo na execução.

Não há processo correto ou incorreto; dependendo da sua aplicação, ambiente e objetivo, o uso de um processo específico pode ser vantajoso ou não. Um ponto importante a ressaltar é que, cada autor e organização colocam e classificam processos e atividades de forma diferente, tornando difícil uma uniformidade completa.

Os processos de desenvolvimento de softwares podem ser realizados utilizando diversas metodologias (GUSTAFSON, 2003). Neste trabalho, foi utilizada uma mescla das metodologias existentes, apropriando-se das melhores partes de cada uma delas, tornando o desenvolvimento um processo ágil e eficiente.

Desta forma, são apresentados simplificadaamente abaixo, alguns tópicos da metodologia de desenvolvimento, para que se tenha uma linha mestra de trabalho. Outras metodologias são utilizadas, visando flexibilidade na abordagem do problema.

2.2.1 – Metodologia de Desenvolvimento de Software

O processo clássico de desenvolvimento de sistemas chamado waterfall (ou cascata) (PRESSMAN, 2002) possui uma seqüência de fases bem definidas que guiam o desenvolvimento de um sistema, conforme mostra a Figura 2. Para que uma fase seja iniciada, é necessário que a fase anterior seja totalmente concluída.

Mesmo com a execução rigorosa das fases de engenharia de requisitos e de análise, a experiência na construção de sistemas mostra que ainda existe uma lacuna de informações a serem especificadas, para prosseguir com a fase de projeto. Isto significa que especificar e modelar o que o sistema deve fazer não é

suficiente para saber como o sistema deve ser estruturado e organizado, para satisfazer os requisitos funcionais e os atributos de qualidade.

Figura 2 - Desenvolvimento de sistemas - modelo cascata

O processo de desenvolvimento considera as seguintes fases, conforme Figura 2 (PRESSMAN, 2002):

Engenharia de requisitos/informações: fase que estabelece os requisitos necessários, conforme a estratégia e a área de atuação do negócio e identifica a interação do sistema com outros elementos externos, tais como hardware, pessoas, base de dados ou outros sistemas.

Análise de requisitos: fase que estabelece o entendimento da natureza do sistema a ser construído, o domínio de informações, as funcionalidades solicitadas e o comportamento em relação ao negócio;

Projeto: fase na qual se transforma requisitos em uma representação do software, que pode ter medidas de qualidade antes da codificação do software iniciar;

Codificação: fase na qual se transforma o projeto em código legível por máquina;

Teste: fase na qual se testa o código gerado, com foco tanto na lógica interna do software quanto nas funcionalidades externas;

Operação: fase na qual se identificam as mudanças e manutenções (corretivas, evolutivas ou adaptativas) necessárias no software.

A arquitetura de software propõe várias atividades que tentam suprir esta distância entre as fases de análise e projeto, dentre elas a elaboração de um modelo de domínio com o objetivo de ressaltar o escopo do sistema, a identificação das dependências de construção e o mapeamento dos requisitos não funcionais, que o sistema deve atender e que não foram totalmente especificados na fase de engenharia dos requisitos.

As atividades da arquitetura são mais visíveis dentro do processo de desenvolvimento de sistemas. A diferença entre as fases de análise e de projeto, com as atividades de arquitetura são mais evidentes quando se trata de sistemas grandes e complexos.

Para sistemas pequenos, a transição entre as fases de engenharia de requisitos, análise e projeto é tranqüila, pois os modelos gerados nestas fases são suficientes para representar os requisitos necessários, satisfazendo a construção do sistema.

Apesar de o modelo de processo adotado para explicação do esquema conceitual ser linearmente seqüencial, o desenvolvimento não implica que, ao final, o software estará completamente pronto. O processo, para fornecer versões rápidas e cada vez mais robustas, deve ser interativo e incremental, como ocorre na Figura 3, aliando-se às fases do modelo cascata.

Figura 3 - Desenvolvimento de sistemas - modelo interativo incremental

A arquitetura deve considerar que requisitos são mutáveis, por natureza. Sendo assim, várias versões podem ser estabelecidas considerando que o modelo cascata é repetido em cada ciclo que finaliza uma versão (PRESSMAN, 2002).

2.2.2 – Metodologia de Desenvolvimento de Software Livre

O desenvolvimento de software de modo organizado, planejado e controlado é objeto da Engenharia de Software, que tem suas atividades bem definidas de acordo com PRESSMAN (2002).

O desenvolvimento e distribuição de softwares (programas) livres estão relacionados com a liberdade das pessoas em utilizar o software da maneira como achar necessário. É ter a liberdade de executar o software para qualquer propósito, acessar o código fonte para modificar o software para adequá-lo às suas necessidades, redistribuir de graça ou cobrando e distribuir versões modificadas do software de modo que outros possam se beneficiar das suas melhorias.

Não existe uma definição exata do termo “Software Livre”, mas geralmente a definição usada é a de que “Software Livre é um tipo de software que é distribuído de acordo com os termos estabelecidos pelo Open Source Definition” (JOSEPH, 2002).

Este documento é mantido pela Open Source Initiative(OSI), e não deve ser entendido como uma definição de licença, e sim uma especificação de como o software deve ser distribuído. Para o produto ser considerado Software Livre, e capaz de receber um certificado OSI, este deve estar de acordo com todos os critérios da especificação, sem exceção.

O movimento de software livre tem crescido expressivamente, conseguindo inclusive o apoio de universidades e órgãos governamentais, que enxergam no software livre um caminho economicamente viável para a democratização do acesso aos recursos da informática no país.

Não existe um processo de desenvolvimento de software livre que seja considerado “padrão”, diferentes desenvolvedores e comunidades empregarão técnicas, métodos e ferramentas diferentes.

Embora estas diferenças existam, ainda assim é possível delinear nos diferentes projetos várias características comuns. Descrevem-se aqui estas características, lembrando que mesmo estas, podem vir a sofrer alterações significativas em alguns projetos mais específicos.

Um projeto de software livre pode ter várias formas, mas dois estilos de desenvolvimento são considerados dominantes na comunidade:

- **A catedral:** os sistemas desenvolvidos neste estilo são normalmente fruto do trabalho de um grupo pequeno de programadores ou mesmo de um único programador. Contribuições de código ou idéias vindas da comunidade são aceitas, mas estas não são as principais preocupações dos autores originais. Estes monopolizam grande parte das decisões de design, implementação e a data de liberação de determinada versão, o que faz com que o tempo entre o lançamento de versões se torne maior e a contribuição por parte da comunidade diminua.
- **O bazar:** ao contrário da catedral, este estilo é bem menos conservador, e trabalha com ciclos de desenvolvimento bem menores. Muitos projetos deste tipo ainda são controlados por um pequeno grupo de

desenvolvedores, mas a contribuição de código é muito encorajada e inclusive esse fato é um dos motivos que leva o ciclo de desenvolvimento a ser tão pequeno. Este estilo de desenvolvimento faz uso intensivo de ferramentas de Groupware (bate-papos, listas de discussão, IRC) entre seus participantes como uma forma de estimular a troca de idéias. É comum também a existência de um repositório global de código no qual as contribuições são feitas.

A forma de desenvolvimento de software livre tem dois métodos: a *catedral* refere-se àquela que descreve projetos desenvolvidos por grupos fechados, com pequena abertura para participação externa e o *bazar* que engloba projeto colaborativo aberto aos usuários, os quais são bem vindos para participar e opinar sobre o desenvolvimento de qualquer fase.

2.2.3 – Modelo de Qualidade de Software

A garantia da qualidade de um software depende da qualidade da arquitetura definida para este software. Para PRESSMAN (2002), há três pontos importantes relacionados à qualidade:

- Requisitos de software são a base para medidas de qualidade. Falta de aderência da arquitetura aos requisitos significa falta de qualidade;
- Padrões específicos estabelecem um conjunto de critérios que guiam a definição da arquitetura. Se os critérios não são seguidos, o resultado não terá qualidade;
- Há os atributos de qualidade (requisitos não funcionais) que nem sempre são mencionados. Se a arquitetura apresenta os requisitos explícitos, mas não apresenta algum dos requisitos implícitos, a qualidade será duvidosa.

A necessidade de se construir um sistema determina qualidades que devem ser acomodadas pela arquitetura. O atendimento aos requisitos funcionais é a condição básica para os serviços e habilidades do sistema. Porém, muitos

destes sistemas são re-projetados, não por causa de deficiências em suas funcionalidades, mas devido à dificuldade de serem mantidos, ou pela deficiência no desempenho e na segurança.

A arquitetura de software tem como objetivo melhorar a qualidade dos produtos de software que são construídos. Sua definição consiste em quebrar a complexidade do problema em partes menores, denominadas componentes ou subsistemas, explicitando o relacionamento entre estas partes. Os componentes podem ser pedaços de código, um sistema externo, elementos de hardware, protocolos de comunicação, entre outros. Isto significa que arquitetura de software representa muito mais do que a infra-estrutura técnica necessária para desenvolver sistemas. Sua importância surge, pois:

- Possui a abstração da complexidade do problema que facilita a comunicação entre os participantes do desenvolvimento do sistema;
- Antecipa decisões de projeto, estabelecendo as restrições do ponto de vista do negócio e do ponto de vista técnico;
- Incentiva o reuso através da utilização de componentes prontos e também através dos estilos e padrões arquiteturais.

Os estilos de arquitetura oferecem muitos recursos que orientam as atividades do arquiteto, descrevendo domínios de aplicação, tipos e padrões para o paracionamento dos componentes e motivações para o reuso. Estes recursos e também as definições relacionadas à arquitetura de referência e modelos de referência indicam que a definição de uma arquitetura não precisa partir do zero. Ela pode e deve utilizar tais recursos e técnicas como ponto de partida.

Dentre os requisitos, há aqueles que são identificados pelos participantes que são responsáveis pelo negócio e desejam uma solução computacional para o problema que enfrentam. Estes requisitos estão ligados às funcionalidades que o sistema deve atender.

Porém, há outros requisitos implícitos, denominados requisitos não funcionais ou atributos de qualidade que devem ser identificados e compreendidos pelos arquitetos, analistas e projetistas de sistemas.

CAPÍTULO 3 - MODELAGEM DO SOFTWARE

Este trabalho visa o desenvolvimento de um software de espectrometria gama para análise por ativação com nêutrons utilizando o conceito de software livre, tendo como características principais fornecer informações da análise dos espectros relacionados à espectrometria de raios gama, referente às análises executadas no laboratório LAN do IPEN, integrando processos e sistemas.

Neste trabalho é implementado um software denominado de “SAANI” (**S**oftware **A**nálise por **A**tivação com **N**êutrons **I**nstrumental) para análise de espectros de raios gama, desenvolvido para os usuários do laboratório LAN-IPEN, focados para os pesquisadores, estudantes e técnicos, que trabalham a maior parte do tempo com pesquisas e que necessitam de alta precisão, mobilidade e praticidade em suas ferramentas, que auxiliam no trabalho e que ao mesmo tempo precisam associar isto à necessidade de possuir um fluxo de trabalho ágil e com informações atualizadas.

No processo de análise de uma amostra identificou-se a necessidade de utilizar outro software para o cálculo das concentrações dos elementos encontrados na amostra, no qual o usuário tem que digitar os resultados gerados pelo software VISPECT/VERSÃO 2 em outro software para obter as concentrações dos elementos, durante o processo de digitação dos dados no segundo software podem ocorrer erros. O novo software irá eliminar este processo, pois os cálculos das concentrações são realizados no mesmo software, eliminando este possível erro.

A Figura 4 mostra as etapas do processo da análise de espectros de raios gamas.

Figura 4 - Etapas do processo da análise de espectros de raios gamas.

O processo ocorre em várias etapas, como mostra a Figura 4. Após a contagem feita pelo equipamento, o software VISPECT/VERSÃO 2 processa o espectro e gera uma listagem com os resultados dos cálculos, que é posteriormente entrada para outro software, no qual são calculados as concentração dos elementos. O novo software vai agregar os dois processos em um único software, dando maior agilidade, melhorando a qualidade da informação, com uma menor possibilidade de erros.

Com o estudo das etapas e o processo que envolve a AANI - Análise por Ativação de Nêutrons Instrumental, tanto os manuais quanto os automatizados e as características e funcionalidades dos softwares que são utilizados no LAN-IPEN, foi feito o levantamento dos requisitos principais do software.

Como o VISPECT/VERSÃO 2 foi desenvolvido utilizando uma linguagem conhecida, o TURBO BASIC, o seu código, que é disponível, é o ponto de partida

para o entendimento de várias funcionalidades, como leitura dos arquivos de espectros com origem de diferentes equipamentos, localização dos picos e os cálculos.

As rotinas gráficas do novo software SAANI foram baseadas no software *PyMca* que é um software para a Fluorescência de Raios-X (SOLÉ, 2007), apresenta uma estrutura e implementação muito próximas do que foi planejado para o novo software SAANI.

O *PyMca* tem em sua estrutura rotinas gráficas implementadas que foram estudadas e portadas para dar suporte a montagem e manipulação dos gráficos no novo software SAANI.

3.1 – Software VISPECT/VERSÃO 2

O Laboratório de Análise por Ativação Neutrônica (LAN-IPEN), utiliza para a análise de espectros o software VISPECT/VERSÃO 2, desenvolvido na linguagem TURBO BASIC, pelo Dr. Denis Piccot, do Laboratório Pierre Sue, do Centro de Estudos Nucleares de Saclay.

Figura 5 - Tela do software VISPECT/VERSÃO 2

O software VISPECT/VERSÃO 2, conforme mostra a Figura 5, tem as seguintes características:

- Interface não gráfica;
- Efetua a leitura dos arquivos de espectros criados por sistemas detectores da EG&G Ortec com a aquisição dos dados MAESTRO II com extensão “.CHN” e da Canberra com aquisição de dados S100 com extensão “.MCA”;
- Lê o espectro e exibe os dados no vídeo como: canal inicial, canal final, fundo de escala em contagens, canal em que o cursor está posicionado, o número de contagens desse canal;

Esta tela possui dez funções:

F1 - ajuda;

F2 - marcar um canal como limite inferior de uma região;

F3 - marcar um canal como limite superior de uma região;

F4 - visualizar no vídeo apenas a região marcada;

F5 - voltar ao espectro original;

F6 - calibração – ativa uma lista de opções que permite fazer calibração em energia (fornece a energia de pelo menos dois canais do espectro) e em resolução do espectro (é necessário marcar pelo menos dois picos no espectro para que o software possa calcular função de resolução do detector). Pode-se salvar essa calibração em arquivo, ou chamar uma calibração já gravada;

F7 - imprimir uma lista com os números dos canais e suas contagens;

F8 - marcar uma região previamente selecionada;

F9 - desmarcar uma região previamente selecionada;

F10 - imprimir resultados. A impressão do relatório tem como informações: nome do arquivo, data e hora em que o espectro foi gravado (quando os espectros são obtidos nos sistemas EG&G Ortec), tempo de detecção e as informações dos fotopicos são tabeladas na seguinte ordem: energia dos fotopicos, área líquida, área do BG, resolução em energia, canal da mediana,

canal inicial, largura do fotopico em número de canais, atividades em contagens/segundos, desvio padrão da atividade em porcentagem;

Ctrl-P – para realizar a localização de fotopicos, informa-se qual o nível de sensibilidade, sendo o padrão 15, se for menor que este nível de sensibilidade localiza os fotopicos com poucas contagens acima da linha BG (Background) e se for maior localiza os fotopicos com maior número de contagens. Antes de localizar os fotopicos, é necessário fazer a calibração ou ler a calibração existente no sistema.

Para realizar a análise dos espectros, o software VISPECT/VERSÃO 2 utiliza uma série de rotinas para localizar e quantificar os fotopicos. Para entender como o software realiza estas tarefas, foi realizado um estudo de suas rotinas para o desenvolvimento do novo software referente a este trabalho.

Segundo os estudos efetuados sobre os softwares que fazem este tipo de análise, algumas características em comum são:

- Ter uma rotina para realizar uma análise automática dos dados;
- O método deve ser capaz de manipular os dados medidos sobre uma grande variedade de condições experimentais, incluindo estatística variável, ganho do sistema variável e detectores de diferentes tamanhos e qualidades;
- O método deve ser capaz de analisar espectros de alta complexidade e nenhum conhecimento prévio dos componentes do espectro deve ser necessário. Informações devem ser incluídas para o reconhecimento e análise de linhas espectrais próximas (multipletos);
- Os dados de calibração, se necessários, devem estar facilmente disponíveis;
- Os resultados da análise devem incluir as energias e as intensidades dos raios gama e as meias-vidas das linhas medidas;
- A análise deve incluir os procedimentos de calibração para a determinação da energia e eficiência;
- A exatidão dos resultados deve ser tão boa quanto a estatística dos dados e a exatidão das informações da calibração permitir;

- O procedimento computacional deve ser eficiente o suficiente para tornar o método viável para as análises de rotina, usando as capacidades computacionais disponíveis.

Estas características são pertinentes aos softwares de análise e foram aplicadas no desenvolvimento do software SAANI.

3.2 – Requisitos Levantados do Software Desenvolvido

A seguir, são descritos os requisitos funcionais, não funcionais e as regras de negócio levantadas para a implementação do trabalho:

- Ler o arquivo de espectro, conforme a especificação do usuário;
- Apresentar o espectro graficamente no vídeo;
- Manipular o espectro, por região de interesse;
- Ler dados de calibração do sistema em que o espectro foi gerado;
- Realizar a calibração do sistema quando necessário, por energia ou resolução;
- Realizar a localização dos fotopicos de forma automática e/ou manual;
- Emitir relatório de resultado de análise realizada;
- Calcular as concentrações.

3.3 – Propostas do Projeto do Software SAANI

Desenvolver um software de análise de espectros de raios gama aplicado à Análise por Ativação com Nêutrons, que apresenta como características principais:

- A facilitação de padronização dos procedimentos realizados pelos pesquisadores, estudantes e técnicos;
- A fácil extensibilidade com a utilização da tecnologia de plugins;

- Eliminar os erros causados pela entrada manual dos resultados gerados pelo VISPECT/VERSÃO 2 em outro software para o cálculo das concentrações.

Construir um aplicativo mais moderno, com mais facilidades do ponto de vista de interface com o usuário, sem, no entanto, estender em demasia as funcionalidades dos existentes com relação a:

- Métodos matemáticos e estatísticos;
- Execução em ambiente de rede, através de interface WEB ou modelo Cliente/Servidor;
- Detecção automática de fotopicos;
- Identificação automática de elementos através de base de dados nucleares.

O aplicativo, resultado deste trabalho, teve seu escopo inicial definido para substituir aquele que está sendo atualmente utilizado, o VISPECT/VERSÃO 2, servindo de base para desenvolvimentos futuros e extensões de funcionalidades.

Desta forma, a proposta do trabalho é lançar as bases para futuros desenvolvimentos, portanto obtendo ao final do trabalho um software moderno, de fácil utilização, com ganho de produtividade e eficiência para seus usuários.

3.4 – Especificação

Na especificação técnica do sistema, são apresentados modelos baseados na linguagem Unified Modeling Language (UML), que é uma linguagem para modelar softwares, descreve diagramas de classe, diagramas de caso de uso, especificando textualmente as funções do sistema e de seus principais módulos.

3.4.1 – Diagrama de Caso de Uso

Apresentam-se os casos de uso a seguir, explicando de maneira mais detalhada os casos de maior influência dentro do sistema.

Figura 6 - Casos de Usos

Estes casos de usos, mostrados na Figura 6, representam graficamente as funcionalidades propostas para o sistema. A seguir, será detalhado cada caso de uso, para um melhor entendimento dos processos.

3.4.1.1 – Caso de Uso: Acessar Software

O usuário terá um ícone para o acesso ao sistema. Ao clicar no ícone, o sistema irá abrir a janela principal do aplicativo.

Tabela 1 - Caso de Uso: Acessar Software

Caso de Uso – Acessar Software	
Ator primário	Usuário (Pesquisador ou Bolsista).
Ator secundário	Não há.
Pré-condições	O usuário deve possuir acesso ao sistema, ou seja, no equipamento do usuário deve ter o software instalado.
Fluxo principal	- O usuário clica o ícone; - Será aberto e apresentado o aplicativo no vídeo, na sua janela principal.
Fluxo alternativo	- Caso não encontre o arquivo será dada mensagem de arquivo não localizado.
Pós-condições	Aplicativo aberto para uso.
Regras de negócio	- O software deve estar instalado no equipamento do usuário.

3.4.1.2 – Caso de Uso: Abrir Projeto

O usuário deve clicar no botão “Abrir Projeto” para a localização do arquivo anteriormente gravado. Ao clicar neste botão, abre-se a janela padrão do sistema para localização do arquivo. Após localizar o arquivo, o sistema carrega todos os dados referentes ao projeto.

Tabela 2 - Caso de Uso: Abrir Projeto

Caso de Uso – Abrir Projeto	
Ator primário	Usuário (Pesquisador ou Bolsista).
Ator secundário	Não há.
Pré-condições	O sistema deve estar aberto.
Fluxo principal	<ul style="list-style-type: none"> - O usuário clica no botão “Abrir Projeto”; - Será aberta janela padrão do sistema para localizar o arquivo; - O sistema processa a leitura e efetua a leitura dos dados referentes ao projeto.
Fluxo alternativo	- Caso não encontre o arquivo retorna para a página principal.
Pós-condições	Projeto aberto e carregado para uso.
Regras de negócio	<ul style="list-style-type: none"> - O software deve estar instalado no equipamento do usuário; - Sistema deve estar aberto.

3.4.1.3 – Caso de Uso: Recuperar Espectro

O usuário pode ler arquivos de espectros com extensões “.CHN” e “.MCA”, originários de equipamentos de contagem diferentes. O sistema conta com reconhecimento automático do tipo de arquivo, no momento da abertura do arquivo, não sendo necessário o usuário diferenciar o tipo do arquivo, facilitando o processo.

Tabela 3 - Caso de Uso: Recuperar Espectro

Caso de Uso - Recuperar Espectro	
Ator primário	Usuário (Pesquisador ou Bolsista).
Ator secundário	Não há.
Pré-condições	Conhecer o local onde o arquivo de espectro está armazenado.
Fluxo principal	<ul style="list-style-type: none"> - O usuário acessa o sistema através da tela principal; - Seleciona a opção do menu Arquivo e sub-menu Abrir ou botão abrir; - Será apresentada uma janela padrão do sistema para localizar o arquivo de espectro a ser aberto; - Seleciona a pasta, o arquivo e clica a opção do botão Abrir;
Fluxo alternativo	<ul style="list-style-type: none"> - Caso não encontre o arquivo exibe mensagem de arquivo não localizado; - Caso cancele operação de abertura, o sistema retorna a tela principal.
Pós-condições	Espectro obtido e apresentação do gráfico.
Regras de negócio	- Não importa o tipo de arquivo que será aberto “.CHN” ou “.MCA”, o software irá identificar e ler o arquivo.

3.4.1.4 – Caso de Uso: Configurar Arquivo

Para configuração do arquivo de espectro, o usuário deve clicar na aba “Parâmetros do Arquivo”, que abre no vídeo a janela para entrada dos dados: tipo do arquivo (amostra ou padrão), massa, data e hora em que a contagem foi realizada, nível de sensibilidade para busca dos picos, desvio padrão para os cálculos. Quando o tipo do arquivo for o arquivo do padrão, é necessário informar dados adicionais sobre os elementos, concentrações e desvio padrão que estão presentes no padrão.

Tabela 4 - Caso de Uso: Configurar Arquivo

Caso de Uso – Configurar Arquivo	
Ator primário	Usuário (Pesquisador ou Bolsista).
Ator secundário	Não há.
Pré-condições	<ul style="list-style-type: none"> - O usuário deve possuir os dados do arquivo de espectro para a configuração; - Deve ter o arquivo de espectro aberto e selecioná-lo da lista de arquivos, para poder efetuar a configuração.
Fluxo principal	<ul style="list-style-type: none"> - O usuário seleciona arquivo de espectro na lista de arquivos; - Clica na aba “Parâmetros do Arquivo”, para abrir janela para entrada dos dados; - Efetua a entrada dos dados: tipo do arquivo (amostra ou padrão), massa, data e hora em que a contagem foi realizada, calibração do sistema onde o arquivo foi gerado, nível de sensibilidade, desvio padrão; - Se o tipo do arquivo de espectro for o arquivo do padrão é necessário dar entrada nos elementos e dados de concentrações, que compõem o padrão.
Fluxo alternativo	<ul style="list-style-type: none"> - Se não tiver os dados para configuração, salvar o projeto e localizar os dados para depois atualizá-lo.
Pós-condições	Arquivo de espectro configurado e pronto para cálculo.
Regras de negócio	<ul style="list-style-type: none"> - Se o arquivo for padrão, permitir entrada de dados adicionais.

3.4.1.5 – Caso de Uso: Verificar Cálculo

Para verificar os resultados dos cálculos, o usuário deve clicar a aba “Resultado dos Cálculos”, onde serão exibidos os seguintes dados: energia dos picos, área líquida, área do BG, resolução em energia, canal da mediana, canal inicial, largura do pico em número de canais, atividades em contagens/segundos, desvio padrão da atividade em porcentagem.

Tabela 5 - Caso de Uso: Verificar Cálculo

Caso de Uso – Verificar Cálculo	
Ator primário	Usuário (Pesquisador ou Bolsista)
Ator secundário	Não há
Pré-condições	- Arquivo de espectro deve estar selecionado e configurado.
Fluxo principal	- Seleciona a aba “Resultado dos Cálculos”; - Será aberta a aba e apresentado os resultados.
Fluxo alternativo	- Caso tenha algum dado do arquivo não configurado, o sistema apresenta mensagem e posiciona na tela de configuração.
Pós-condições	- Obtém os resultados dos cálculos.
Regras de negócio	- Têm que ser configurado os dados do arquivo de espectro.

3.4.1.6 – Caso de Uso: Verificar Concentrações

O cálculo das concentrações confronta cada amostra com todos os padrões que foram inseridos no projeto. Ao encontrar os elementos, através dos dados já configurados anteriormente, efetua o cálculo da concentração para cada elemento encontrado e seu respectivo desvio padrão. O usuário deve clicar a aba “Resultado das Concentrações”, onde são mostrados os resultados.

Tabela 6 - Caso de Uso: Verificar Concentrações

Caso de Uso – Verificar Concentrações	
Ator primário	Usuário (Pesquisador ou Bolsista)
Ator secundário	Não há
Pré-condições	- Arquivo de espectro deve estar selecionado e configurado.
Fluxo principal	- Seleciona a aba “Resultado das Concentrações”; - Será aberta a aba e apresentado os resultados; - Selecionar a aba da amostra para verificar os resultados.
Fluxo alternativo	- Caso tenha algum dado do arquivo não configurado, o sistema apresenta mensagem e posiciona na tela de configuração do respectivo arquivo de espectro.
Pós-condições	- Obtém os resultados das concentrações.
Regras de negócio	- Têm que ser configurado os dados do arquivo de espectro.

3.4.2 – Modelo de Classes

O sistema é composto por vários objetos de negócio, nos quais cada um representa uma necessidade básica, que deverá ser comportada pelo sistema, controlando todas as ações que poderão ser tomadas por cada item. Dentro da implementação, a interface da aplicação apenas irá solicitar aos objetos de negócio as informações necessárias e, os objetos de negócio irão devolver

apenas os dados já formatados e preparados para serem apresentados na interface da aplicação.

O acesso aos dados é feito com base em uma classe implementada apenas para este fim, na qual todos os métodos estão preparados para efetuarem as transações com os dados e devolverem apenas as informações solicitadas pela classe de negócio.

O modelo conta com 7 classes, nas quais 2 estarão focadas diretamente no negócio e uma classe estará disposta especialmente para prover acesso aos dados.

Explicando melhor as classes implementadas:

- Classe LerEspectro: é responsável pela leitura dos dados do espectro, e seus dados complementares se houver; permite a leitura de tipos de arquivos de espectros de diferente origem, retorna um dicionário (um DataObjetc) com os dados, valores das contagens para cada canal, nome do arquivo lido e outras informações.
- Classe QtBlissGraph: esta classe é encarregada pela apresentação do gráfico no vídeo e todas as rotinas que envolvem a manipulação do gráfico, como por exemplo, a seleção de uma parte do gráfico para análise (Zoom).
- Classe VispectFit: Efetua a busca dos fotopicos automaticamente e calcula a área dos fotopicos, estuda alguns casos de dupletos e gera uma saída com os resultados da energia dos fotopicos, área líquida, área do BG, resolução em energia, canal da mediana, canal inicial, largura do fotopico em número de canais, atividades em contagens/segundos, desvio padrão da atividade em porcentagem.

As classes que iniciam por “frm”, como frmMenu, frmResultados, frmConcentracao, são lay-out das telas para exibição no vídeo dos resultados e operações do sistema, e são controladas pelos arquivos que iniciam por “crt”, como crtResultados, crtConcentracao.

Os principais métodos são listados a seguir:

- ler_MCAeCHN: Efetua a leitura do arquivo de espectro;
- lerCalibracao: Efetua a leitura da calibração do sistema (equipamento) no qual foi gerado o espectro (o software SAANI não efetua a calibração do sistema ainda, utiliza o arquivo de calibração já existente do software VISPECT/VERSÃO 2);
- VispectFit: Executa a busca dos fotopicos e calcula resultados;
- CalConcetra: Efetua o cálculo das concentrações, a partir das matrizes resultados dos cálculos, sendo confrontados as amostras com os padrões dos elementos cadastrados.

CAPÍTULO 4 - IMPLEMENTAÇÃO DO SOFTWARE

Neste capítulo, são apresentados tópicos referentes à implementação do software deste trabalho.

A proposta é o desenvolvimento de um software que será liberado de acordo com a licença de código aberto (GPL) ou Licença Pública Geral, possibilitando liberdade de execução, estudo, modificação e redistribuição do código fonte. Na fase inicial, por se tratar de um trabalho acadêmico, foi utilizada uma metodologia mais voltada para o método “Catedral”, pois está focado a um único programador. A intenção é que após a conclusão do projeto, este será liberado para a comunidade, quando então será aplicado o método “Bazar” (RAYMOND, 2007).

Este trabalho poderá ser explorado, tornando-se base para novas implementações ou extensões, entre outras melhorias que possam surgir, toda a documentação e programas fontes desenvolvidos estão disponíveis para este fim, Anexo “CD” com os fontes do software.

4.1 – Técnicas e Ferramentas Utilizadas

Nos tópicos a seguir, são apresentadas algumas das principais ferramentas e técnicas utilizadas para o desenvolvimento deste software. O principal destaque é o desenvolvimento de software livre com a implementação em Python e o ambiente de gráfico QT.

4.1.1 – Python

É uma linguagem de programação que foi criada por Guido van Rossum um programador de computador em 1991, enquanto trabalhava para o sistema operacional distribuído Amoeba no Instituto Nacional de Investigação de Matemática e Ciências da Computação em Amesterdã (PYTHON, 2004).

O nome Python teve a sua origem no grupo humorístico britânico Monty Python, e não com animais selvagens e ferozes, que muitas pessoas fazem associação.

Algumas das características do Python são:

- fácil de utilizar;
- linguagem do tipo interpretada;
- contém uma vasta biblioteca de objetos e funções;
- é orientada a objetos;
- exceções, um moderno mecanismo para o tratamento de erros;
- módulos, uma forma inteligente de acessar e organizar código a ser reutilizado, coleta de lixo automática, sistema que elimina os erros causados pelo acúmulo de dados inúteis na memória do computador;
- recursos avançados de manipulação de textos, listas e outras estruturas de dados;
- multiplataforma, ou seja, possibilidade de executar o mesmo software sem modificações em várias plataformas de hardware e sistemas operacionais.

Por estas características apresentadas e com o objetivo de criar um software livre com metodologia orientada a objetos, foi adotada esta linguagem de programação para o desenvolvimento do novo software de espectrometria gama.

4.1.2 – QT

QT é um sistema multiplataforma para o desenvolvimento de programas de interface gráfica. A empresa responsável pela criação é a norueguesa Trolltech, que lançou uma versão 4 da biblioteca sob as licenças GPL em todas as plataformas suportadas, incluindo a partir desta versão, a plataforma Windows (TROLLTECH, 2005), que foi utilizada para o desenvolvimento de toda a interface gráfica do software, através do PyQt (RIVERBANK, 2005), que é um pacote para o desenvolvimento em Python.

4.2 – Implementação do Software SAANI

Nos tópicos a seguir, são apresentadas as implementações efetuadas e a operacionalização do software.

4.2.1 – Leitura do Arquivo de Espectro

Uma das preocupações iniciais foi com a leitura dos dados do espectro pois, o LAN-IPEN tem dois sistemas de detectores: 1) da Ortec da E&G ORTEC com a aquisição dos dados utilizando o software MAESTRO II, gerando o arquivo de espectro com extensão “.CHN”; 2) da Canberra com aquisição de dados através do software S100, gerando o arquivo de espectro com extensão “.MCA”, e os arquivos gerados por estes sistemas são de diferentes formatos, conforme mostra o Tabela 7.

Tabela 7 - Lay-out dos arquivos de espectros: "CHN" e "MCA"

Lay-Out			
CHN		MCA	
Posição	Conteúdo	Posição	Conteúdo
1 a 8	Espaços livres em branco	1 a 48	Espaços livres em branco
9 a 12	Tempo total	49 a 52	Tempo vivo
13 a 16	Tempo vivo	53 a 56	Tempo total
17 a 24	Data inicio contagem	57 a 138	Espaços livres em branco
25 a 28	Hora inicio contagem	139 a fim de 4 em 4 posições	Canal e contagem são 8190 canais correndo as posições
29 a 32	Espaços livres em branco		
33 a fim de 4 em 4 posições	Canal e contagem são 8190 canais correndo as posições		

Para implementar a rotina da leitura dos arquivos de espectros, o software VISPECT/VERSÃO 2, que contém o código fonte na linguagem de programação BASIC, com base em suas rotinas os formatos dos arquivos foram identificados e, dessa forma, foi possível elaborar a rotina de leitura em Python, para o novo software desenvolvido.

Para a leitura dos espectros, foi desenvolvida a classe LerSpectro, que contém as rotinas de identificação do tipo de arquivo que deve ser lido e a leitura

efetiva dos dados, que retorna um dicionário contendo o dados das contagens por canais e informações sobre o espectro. O trecho de código, na Tabela 8, demonstra a rotina de identificação do tipo de arquivo e a execução da rotina que realiza a leitura dos dados.

Tabela 8 – Código fonte para ler o arquivo de espectro

Código: classe LerSpectro
<pre> Class LerSpectro: def __init__(self, arquivo): self.arquivo = arquivo self.tt=0 self.tv=0 self.dt="" def ler_MCAeCHN(self): espectro = DataObject.DataObject() espectro.info["SourceType"] = "SpecFile" espectro.info["SourceName"] = self.arquivo espectro.info["Key"] = "1.1.1.1" espectro.info['FileName'] = self.arquivo espectro.info['selectiontype'] = "1D" self.tipo = string.upper(self.arquivo[-3:]) if self.tipo == 'CHN': espectro.data = self.ler_CHN() else: espectro.data = self.ler_MCA() espectro.info['TempoTotal'] = self.tt espectro.info['TempoVivo'] = self.tv espectro.info['DataTempo'] = self.dt espectro.info['HoraTempo'] = "" espectro.info['Massa'] = "" espectro.info['Nivel'] = "15" espectro.info['Sigma'] = "2" espectro.info['JaElementos'] = 0 espectro.info['JaCalculado'] = 0 espectro.info['slope'] = 0 espectro.info['offset'] = 0 espectro.info['ro'] = 0 espectro.info['kres'] = 0 espectro.info['Amostra'] = 0 espectro.info['ResCalculo'] = 0 espectro.info['lElem'] = '' ch0 = 0 espectro.x = [Numeric.arange(ch0, ch0 + len(espectro.data)).astype(Numeric.Float)] espectro.y = [espectro.data[:].astype(Numeric.Float)] espectro.m = None espectro.data = None return espectro </pre>

4.2.2 – Apresentação do gráfico

Para o desenvolvimento da apresentação dos gráficos no sistema, foi utilizada a classe “QtBlissGraph” do software PyMCA (SOLÉ, 2007) que contém varias rotinas com uma série de recursos para apresentação e manipulação dos gráficos.

Após a leitura dos dados do arquivo de espectro, o software armazena os dados em um dicionário para cada espectro e adiciona em uma lista o nome do arquivo de espectro, esta lista fica disponível para que o usuário do software selecione o espectro que deseja trabalhar.

Para a apresentação do gráfico após o usuário selecionar o espectro de interesse o software exibe o gráfico de conforme mostra a rotina na Tabela 9.

Tabela 9 – Código fonte para exibir o gráfico

Código: Recupera os dados do arquivo de espectro e exibe o gráfico
<pre> vobj = LerVispect.LerVispect(filename[0]) vdata = vobj.ler_MCAeCHN() dataObject = vdata self.dataObjectsDict[legend] = dataObject self.vaux=legend self.ui.lstarqs.addItem(self.vaux) curveinfo={} self.graph.clearcurves() self.graph.newCurve(legend,x=vdata.x[0], y=vdata.y[0], logfilter=1, curveinfo=curveinfo) self.graph.replot()</pre>

4.2.3 – Configuração do Espectro

Para cada arquivo de espectro, o usuário deve fazer a configuração dos dados antes de efetuar o cálculo. Clicar na aba “Parâmetros do Arquivo” abre então a janela para entrada dos seguintes dados: tipo do arquivo (amostra ou padrão), massa, data e hora em que a contagem foi realizada, calibração do sistema, nível de sensibilidade para busca dos picos, desvio padrão para os cálculos.

Se o tipo do arquivo for o arquivo do padrão, é aberta uma nova entrada de dados na qual são informados os elementos e a concentrações que compõem o

padrão. Existe um arquivo no software SAANI, que contém os dados dos elementos na seguinte ordem: energia referente ao elemento; descrição do elemento; a meia vida; tipo do tempo da meia vida em horas, dias, meses ou anos.

4.2.4 – Identificação dos picos

As rotinas de busca e identificação dos fotopicos foram implementadas para o novo software SAANI baseadas nas rotinas do software VISPECT/VERSÃO 2.

Com os dados do arquivo de calibração do sistema detector, em que os espectros foram gerados e, do parâmetro nível de sensibilidade, cujo valor padrão é 15, é possível realizar a localização dos picos.

O nível da sensibilidade padrão usado na procura de picos, significa que para localizar picos com poucas contagens acima da linha do BG é necessário diminuir esse valor, e ao contrário, se o objetivo for localizar somente os picos com um grande número de contagens deve-se aumentar esse valor.

A rotina de localização dos picos segue várias etapas, começando com a utilização de informações contidas no arquivo de calibração. Por isso, a calibração é obrigatoriamente chamada no início de um projeto. Posteriormente, são inseridos os espectros, identificando-os como amostra ou padrão. No padrão são inseridos os elementos com suas concentrações que são a base para identificação nas amostras e para os cálculos das concentrações.

A rotina de localização utiliza os coeficientes das calibrações para calcular o número de canais (NC) que a forma do sinal de procura irá ter.

Os pontos do espectro que têm valores maiores que o da sensibilidade escolhida quando se inicia o processo da procura dos picos no espectro, mostram a presença de picos nestas posições. São utilizadas as somas em quadratura das raízes quadradas das contagens para marcar as regiões do espectro em que existem os picos.

Para exemplificar através do NC, encontram-se as somatórias das raízes quadradas das contagens denominadas janela total (JT) e janela central (JC), conforme mostra a Figura 7.

Figura 7 - Exemplificando janelas para busca dos picos no espectro

Estas janelas são deslizadas no espectro, e é testado se a subtração da JT menos 5 (cinco) vezes a JC é maior que a sensibilidade, se for indica que o canal faz parte de uma região do pico.

O software determina o canal inicial do pico ao primeiro canal que possui um valor maior que o da sensibilidade e após esta ocorrência encontra o final do pico quando o canal do espectro possuir um valor menor que o da sensibilidade, marca assim as regiões do espectro que foram encontrados os picos.

Na sequência, é procurado dentro destas regiões encontradas o canal que possui a maior contagem, que indicam os picos no espectro.

O processo de busca dos picos, canal inicial, canal final e localização da maior contagem ocorrem para todo o espectro, identificando todos os picos existentes no espectro.

Após o processamento destas rotinas o software executa os cálculos para apresentar os resultados.

4.2.5 – Cálculos dos resultados

As rotinas de cálculo da energia do pico, área líquida, área do BG, resolução em energia, canal da mediana, canal inicial, largura do pico em número de canais, atividade em contagens/segundo e desvio padrão da atividade em porcentagem, foram extraídas do VISPECT/VERSÃO 2 e implementadas no novo software.

A classe VispectFit é a responsável pela busca dos picos, que é automática, e pelo cálculo da área dos picos, verifica alguns casos de dupletos e gera a saída com os resultados.

Tabela 10 - Código fonte para chamar o cálculo dos resultados

Código: Cálculo dos resultados
<pre> xmin,xmax=self.graph.getxlaxislimits() self.vispectfit.Lt = info['TempoVivo'] self.vispectfit.vy=Numeric.array(y,Numeric.Float64) pdic=self.vispectfit.vispectfit(xmin=xmin,xmax=xmax,vlegend=info).copy() self.dataObjectsDict[legend].info['ResCalculo']=pdic n=len(pdic) self.nlinhas=n VispectFuncs.criarGrade(self.ui.tableWidget, n,12,{}) for i in range(0,n): VispectFuncs.incGrade(self.ui.tableWidget,i,pdic[i]) </pre>

A Tabela 10 mostra o código que efetua a chamada da classe VispectFit, que é responsável por encontrar os picos e efetuar o cálculo dos resultados, que são exibidos no vídeo na aba “Resultados de Cálculos”, através da função incGrade do arquivo VispectFuncs.

Com os canais iniciais e finais conhecidos, o software efetua o cálculo da área do pico, através do método da Área Total do Pico (Total Peak Area - TPA), segundo BAEDECKER (1971).

O método da Área Total do Pico utiliza o seguinte equacionamento:

$$A_L = A_T - A_{Bg} \quad (4.1)$$

sendo:

$$A_T = \sum_{i=1}^f C_i \quad (4.2)$$

e

$$A_{BG} = \frac{(Y_i + Y_f)}{2} \bullet LP \quad (4.3)$$

ou seja, a área líquida (A_L) é a diferença entre a área total (A_T) e a área do BG (A_{BG}). A área total é a somatória das contagens dos canais (x_i) e a área do BG é a média dos extremos do pico (Y_i e Y_f) multiplicado pelo número de canais que formam o pico (LP), mas Y_i e Y_f são calculados como é mostrado abaixo:

$$Y_i = \frac{x_{i-1} + x_i + x_{i+1}}{3} \quad (4.4)$$

$$Y_f = \frac{x_{f-1} + x_f + x_{f+1}}{3} \quad (4.5)$$

isto é: Y_i é a média aritmética feita com as contagens do canal inicial do pico e das contagens dos dois canais vizinhos e Y_f é a média aritmética feita com as contagens do canal final do pico e das contagens dos dois canais vizinhos.

A Figura 8 mostra um recorte de um espectro, denominado 283br5-2.chn, onde está marcada em negrito a área das contagens para exemplificar os cálculos.

Figura 8 - Recorte do espectro

Através do recorte na Figura 8, serão exemplificados os cálculos e os resultados estão demonstrados na Tabela 11.

A área total do pico é a somatória das contagens do canal inicial 2261 até o canal final 2272, que neste exemplo é igual a 39.266.

O Bg é igual a 8.706, utilizam-se os canais dos extremos, que é a média dos extremos das três últimas contagens do pico dividido por 2 e multiplicado pelo

número de canais que formam o pico (LP) da área marcada, que no caso são 12 canais.

Através dos dados de contagem do espectro e o tempo vivo, que é o tempo de contagem efetivo no sistema de detecção, é calculado a atividade (AT_{cps}) que é dada pela equação (4.6):

$$AT_{CPS} = \frac{A_L}{T_V} \quad (4.6)$$

onde:

A_L Área líquida;

T_V Tempo vivo.

O erro ou desvio padrão da área líquida do pico é calculado de acordo com a equação (4.7):

$$\sigma = \frac{\sqrt{2A_{BG} + A_L}}{A_L} \times 100 \times p \quad (4.7)$$

onde:

A_L Área líquida;

A_{Bg} Área do Bg;

p Valor inteiro (1,2 ou 3).

A energia é calculada utilizando a equação (4.8):

$$E = CM \times Slope + OffSet \quad (4.8)$$

onde:

CM Canal da mediana;

$Slope$ Inclinação da reta (dado da calibração);

$Offset$ Intercept (dado da calibração);

Na Tabela 11 são apresentados os resultados dos cálculos referentes ao exemplo apresentado na Figura 8, para o pico encontrado no espectro entre o canal 2261 a 2272.

Tabela 11 - Resultados dos cálculos

Energia E	Área Total A_T	Área Líquida A_L	Bg A_{BG}	Atividade (cps) AT_{CPS}	Desvio Padrão σ	Tempo Vivo T_V
554,15	39266	30560	8706	5,0792	0,716	6016,7

Estes cálculos ocorrem para todas as regiões marcadas no espectro que contém os fotopicos. Assim, uma listagem com todos os resultados são exibidos no vídeo ou também podem ser impressos. São estes resultados de todos os espectros, que formam as matrizes para os cálculos das concentrações.

4.2.6 – Cálculo das concentrações

Através do levantamento de dados efetuado junto aos usuários, verificou-se que existem dois procedimentos para o cálculo das concentrações: 1) Software Espectro2000 (desenvolvido para o cálculo de concentração); 2) Planilha do Excel, montada com as fórmulas necessárias para o cálculo.

Nos dois procedimentos, existe a necessidade da entrada dos dados, a data e a hora em que os arquivos de espectros foram processados, os resultados dos cálculos das atividades dos espectros obtidas pelo software VISPECT/VERSÃO 2. Neste momento, quando é necessário fazer a digitação dos dados, podem ocorrer erros de digitação no lançamento dos dados.

Alguns arquivos de espectros e uma planilha do Excel com as fórmulas foram coletados para o detalhamento do processo dos cálculos, permitindo efetuar alguns testes iniciais.

O método “calConcentra” foi desenvolvido para o cálculo das concentrações. No projeto, após os espectros das amostras e dos padrões serem inseridos, configurados e calculados as áreas e atividades, é possível efetuar o cálculo das concentrações. Cada amostra é confrontada com todos os padrões, quando é identificado o elemento através da energia na amostra e no padrão, são então recuperados os dados de concentração dos elementos nos padrões para o cálculo da concentração, o desvio padrão para o elemento e a energia localizada.

O software calcula as concentrações de todos os elementos de interesse presentes nas amostras. Após todos os espectros serem processados e as

atividades calculadas, são realizados os cálculos das concentrações dos elementos nas amostras.

Utiliza-se a equação 2.5 do Capítulo 2 para o cálculo das concentrações. O cálculo da concentração ocorre para cada elemento que foi lançado no padrão e localizado na amostra, é assim, montada uma tabela de todos os resultados das concentrações por amostras.

	Elemento	FZ15.CHN	S(%)	EU15.CHN	S(%)	CS15.CHN	S(%)
1	Fe 59(1099.25)	573.675704	8.664000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
2	Fe 59(1291.6)	579.406650	10.390383	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
3	Zn 65(1115.55)	106.013105	1.340089	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
4	Zn 69m(438.63)	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
5	Eu 152(1408.0)	0.000000	0.000000	0.034927	0.001970	0.000000	0.000000
6	Eu 152m(841.59)	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
7	Eu 154(1274.51)	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
8	Se 75(136.01)	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	4.065282	0.148013
9	Se 75(264.66)	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	4.044050	0.123120
10	Se 75(400.7)	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	3.804761	0.267187
11	Co 58(810.77)	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
12	Co 60(1173.24)	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.872914	0.011934

Figura 9 - Tela da apresentação dos resultados das concentrações

A Figura 9 mostra a janela do software SAANI com os resultados das concentrações, possibilitando a impressão dos dados.

CAPÍTULO 5 – MANUAL DE USO DO SOFTWARE

Neste capítulo são apresentadas detalhadamente as etapas que compõem o SAANI.

5.1 – Projeto

O projeto é a forma utilizada para organizar o processo de análise, ou seja, agrupar todos os arquivos de espectros que são analisados. Pode-se criar um projeto novo e inserir os arquivos de espectros ou abrir um projeto, que já foi gravado anteriormente, com todos os arquivos de espectros e suas características.

Para iniciar um projeto, é necessário efetuar a leitura do arquivo de calibração, o software SAANI na aba projeto tem um botão chamado “Ler arquivo de calibração”, que abre janela padrão do sistema para a abertura do arquivo com extensão “cal”.

5.2 – Inserir Arquivo do Espectro no Projeto

O arquivo de espectro, que foi gerado por um dos dois sistemas detectores da Ortec ou da Canberra, localizados no laboratório do IPEN, é armazenado em uma pasta ou outro meio magnético. O software SAANI faz a abertura do arquivo, identifica o tipo do arquivo através de sua extensão “.CHN” ou “.MCA”, carrega os dados das contagens por canais, adiciona o nome do arquivo de espectro na lista de arquivos abertos e apresenta o gráfico do espectro no vídeo.

Ao clicar em outro arquivo de espectro da lista, este será selecionado e apresentado o respectivo gráfico, podendo alternar de um arquivo para outro, através de um clique do mouse.

5.3 – Configurando Arquivo de Espectro

A configuração do arquivo de espectro é necessária para o processo da análise. Verifica se o arquivo do espectro que foi adicionado ao projeto é uma amostra ou um padrão (ou um material de referência). Digitam-se a massa utilizada, data e hora em que foi processada a leitura no sistema de detecção, o nível de sensibilidade de contagens por canais para a identificação dos picos é escolhido e o valor do desvio padrão que será utilizado. Se o arquivo de espectro for de um padrão, exige a entrada de mais alguns dados, como os elementos presentes no padrão para a análise e suas respectivas concentrações, permitindo incluir vários elementos para cada padrão.

SAANI - C:\Silvio-2008\mestrado\vera-analise\Contagem 2.san

Arquivo Projeto Help

Projeto: C:\Silvio-2008\mestrado\vera-analise\Contagem 2.san

Gráfico Parâmetros do Arquivo Resultado dos Cálculos Resultado das Concentrações Projeto

Tipo Arquivo ☐ Amostra ☒ Padrão

Tempo Vivo 3600.0

Tempo Morto 3610.56

Massa 1

Data 19/06/2008 10:06:00

Nível de sensibilidade 15

Desvio padrão(% 1,2 ou 3) 1

Concentração dos Elementos no Padrão

Elemento	Energia	Meia Vida (minutos)	Concentração	Desv.
1 Fe 59(1099.25)	1099.250000	64080.000000	489.100000	0.000000
2 Fe 59(1291.6)	1291.600000	64080.000000	489.100000	0.000000
3 Zn 65(1115.55)	1115.550000	351216.000000	25.740000	0.000000
4 Zn 69m(438.63)	438.630000	825.600000	25.740000	0.000000

Ca 47(1297.09) 11 0 Incluir Excluir

Figura 10 - Parâmetros do arquivo de espectro de um padrão

A Figura 10 mostra a janela dos parâmetros do arquivo de espectro; quando é de uma amostra, não exibe a janela para entrada da concentração dos elementos. Já no caso de arquivo de um padrão, é montada uma tabela com os elementos presentes no padrão, mostrando as energias dos elementos, meia vida.

5.4 – Verificando Resultado dos Cálculos

Após a configuração do arquivo dos espectros das amostras e dos padrões e com os dados da calibração do sistema é possível calcular os resultados. Ao clicar na aba “Resultado dos Cálculos” na janela principal, são calculados os dados e são exibidos na seguinte ordem: energia do pico, área líquida, área do BG, resolução em energia, canal da mediana, canal inicial, largura do pico em número de canais, atividade em contagens/segundo e desvio padrão da atividade em porcentagem, elemento identificado e sua meia vida.

5.5 – Verificando Resultado das Concentrações

O resultado das concentrações dos elementos depende dos dados da configuração dos arquivos de espectros, previamente fornecidos ao software e o cálculo das concentrações é feito automaticamente. Para visualizar os resultados, deve-se clicar na aba “Resultado das Concentrações” na janela principal.

Os resultados das concentrações são calculados para cada amostra em função dos padrões utilizados e mostrados na tela, com a identificação de cada amostra analisada.

5.6 – Salvando Projeto

Para salvar o projeto, o software utiliza a janela padrão do sistema operacional, na qual é determinado o nome do arquivo a ser salvo. O arquivo salvo terá a extensão “.SAN” para diferenciar dos demais arquivos do sistema.

Para o usuário salvar o projeto deve clicar no botão “Salvar Projeto” e ao abrir a janela padrão do sistema, informar o nome do arquivo e salvar o projeto.

CAPÍTULO 6 - RESULTADOS E DISCUSSÕES

6.1 – Comparação entre o softwares VISPECT/VERSÃO 2 e o SAANI

Para proceder a leitura de um arquivo de espectro no software VISPECT/VERSÃO 2, inicialmente seleciona o tipo de arquivo onde o espectro foi gerado para identificar qual “lay-out” de leitura que será processado, conforme Figura 11. Logo após, é necessário digitar o nome do arquivo com sua extensão, conforme mostrado na Figura 12.

Figura 11 - VISPECT/VERSÃO 2: Seleção tipo formato arquivo

Figura 12 - VISPECT/VERSÃO 2: Digitando nome do arquivo e extensão

No software SAANI, para selecionar o arquivo do espectro, o usuário seleciona no menu “arquivo” a opção “abrir” ou simplesmente, clica no ícone “abrir espectro”, conforme mostra a Figura 13. Em seguida, abre-se uma janela padrão do sistema para a seleção do arquivo.

Figura 13 - SAANI: Tela Principal opção de abrir arquivo de espectro

No software VISPECT/VERSÃO 2 existe a necessidade de informar o tipo de arquivo e digitar o nome do arquivo para leitura do espectro, quando é feita a digitação do nome do arquivo e pressionado a tecla “Enter”, o software lê o arquivo e se ele não existir ocorre um erro e aborta o software voltando para a

tela principal. No SAANI, a identificação do tipo de arquivo não é efetuada e também não é digitado o nome do arquivo. Ao clicar o botão “abrir”, o software exibe a janela de abertura padrão do sistema, permitindo a seleção do arquivo através do clique do mouse, facilitando o processo para o usuário e evitando erros de digitação do nome do arquivo.

O software VISPECT/VERSÃO 2 não tem interface gráfica bem definida. Utiliza o sistema “DOS”. Assim, após a entrada do nome do arquivo o software mostra o gráfico de acordo com a Figura 14.

Figura 14 - VISPECT/VERSÃO 2: Tela da apresentação do gráfico

No software VISPECT/VERSÃO 2, como podemos verificar na Figura 14, a interface para a visualização do gráfico não é muito boa, devido à limitação da interface gráfica.

O software novo, SAANI, tem uma interface gráfica bem definida, é utilizada a biblioteca PyQt para a montagem do gráfico, como mostra a Figura 15.

Figura 15 - SAANI: Tela da apresentação do gráfico

Com as rotinas gráficas definidas é possível, com o uso do mouse, selecionar regiões para ampliação, conforme mostram as Figuras 16 e 17.

Figura 16 - SAANI: Seleção de uma área do gráfico

Figura 17 - SAANI: Área selecionada ampliada

No software VISPECT/VERSÃO 2, para efetuar a ampliação de parte do gráfico é necessário utilizar o teclado acionando as teclas F2 e F3 para marcar a região e F5 para executar a ampliação. As rotinas gráficas implementadas no SAANI facilitam a identificação e ampliação dos picos no espectro de forma rápida, simples e fácil.

O software VISPECT/VERSÃO 2 apresenta os resultados somente em relatório impresso, como mostra a Figura 18. Já o novo software apresenta os dados no vídeo, permitindo a impressão, caso necessário, conforme mostra Figura 19.

No novo software é permitida a entrada dos dados do espectro, ou seja, data e hora em que o espectro foi gravado e tempo de detecção. As informações sobre os picos são apresentadas e tabeladas na seguinte ordem: energia dos picos, área líquida, área do BG, resolução em energia, canal da mediana, canal inicial, largura do pico em número de canais, atividade em contagens/segundo e desvio padrão da atividade em porcentagem.

arcd-la.mca desde o canal 0 ate o canal 8191

Tempo total = 8109.8 segundos
Tempo vivo = 7200.0 segundos

Pk	It	Energia	Area	BG	Resol	Canal Cini	LP	Cds	ISX	Fit
1	0	41.65	43256	105101	1.64	168.55	161	16	6.008	1.2
2	0	92.17	21128	158048	1.14	374.83	368	16	2.934	2.7
3	0	100.96	2156	111966	1.08	410.75	405	12	0.299	22.1
4	0	136.96	4603	150974	2.10	557.74	549	19	0.639	12.0
5	0	140.39	2200	85347	1.36	571.71	567	11	0.306	18.9
6	0	159.51	3029	92400	1.24	649.79	644	13	0.421	14.3
7	0	221.50	39753	142380	1.19	902.90	894	20	5.521	1.4
8	0	273.51	11050	77798	1.23	1115.27	1109	14	1.535	3.7
9	0	320.02	2171	66029	1.32	1305.18	1299	14	0.302	16.9
10	0	346.68	4686	56152	1.29	1414.01	1409	12	0.651	7.3
11	0	511.04	42095	85058	2.46	2085.12	2075	25	5.846	1.1
12	0	554.33	497076	80600	1.44	2261.87	2249	25	69.038	0.2
13	0	559.11	28586	55938	1.42	2281.39	2273	18	3.370	1.3
14	0	606.36	7066	37413	1.42	2474.28	2467	15	0.981	4.1
15	0	619.09	270161	70336	1.48	2526.25	2513	28	37.522	0.2
16	0	657.07	3402	37014	1.42	2681.34	2674	18	0.473	8.2
17	0	698.34	153591	50982	1.54	2849.85	2838	26	21.332	0.3
18	0	776.48	423290	54968	1.58	3168.91	3157	27	58.790	0.2
19	0	827.79	117285	51255	1.62	3378.39	3365	26	16.290	0.4
20	10	857.05	690	36270	1.49	3497.88	3494	14	0.096	39.2
21	10	857.71	1508	35891	1.49	3500.56	3494	14	0.209	17.9
22	0	952.19	1554	29811	1.86	3886.31	3881	16	0.216	15.9
23	0	1007.53	5805	42042	1.85	4112.27	4102	21	0.806	5.2
24	0	1043.95	107233	59163	1.75	4260.99	4250	26	14.893	0.4
25	0	1081.24	2810	42645	1.80	4413.24	4406	17	0.390	10.6
26	0	1115.42	2479	44765	1.89	4552.80	4545	16	0.344	12.2
27	0	1173.37	3665	34970	1.78	4789.39	4780	19	0.509	7.4
28	0	1216.02	976	15547	1.19	4963.54	4958	11	0.136	18.3
29	0	1252.73	1743	18957	1.93	5113.43	5105	20	0.242	11.4
30	0	1292.95	321	5203	0.81	5277.67	5274	8	0.045	32.2
31	0	1317.46	86951	19300	1.88	5377.72	5364	29	12.076	0.4
32	0	1330.85	3236	14475	2.09	5432.41	5421	23	0.449	5.5
33	0	1368.62	1021329	29315	1.91	5586.63	5572	30	141.851	0.1
34	0	1395.68	994	8405	1.62	5697.09	5689	15	0.138	13.4
35	0	1474.88	47941	14640	1.87	6070.48	6066	30	4.658	0.4

Na 24

Figura 18 - VISPECT/VERSÃO 2: Relatório impresso dos resultados

SAANI - C:\Silvio-2008\mestrado\vera-analise\Contagem 2.san *

Arquivo Projeto Help

Projeto: C:\Silvio-2008\mestrado\vera-analise\Contagem 2.san

Gráfico Parametros do Arquivo Resultado dos Cálculos Resultado das Concentrações Projeto

Imprimir

	Energia	Area	BG	Resol	Canal Final	Canal Inicial	LP
1	7.36	-2481	236093	-7.44	33.35	51	8
2	75.09	2755	261811	1.03	305.20	300	11
3	98.67	3307	355114	1.24	399.85	395	14
4	121.52	12549	343192	1.61	491.59	484	16
5	136.11	22825	274914	1.34	550.15	543	15
6	145.51	11231	263704	1.33	587.89	581	16
7	159.48	5598	179296	1.28	643.95	638	13
8	192.49	3101	139802	1.23	776.47	771	15
9	238.83	2177	83670	1.70	962.47	956	15
10	264.78	16753	89726	1.53	1066.65	1058	21
11	279.59	9014	74523	1.54	1126.09	1115	20

Figura 19 - SAANI: Resultados apresentados no vídeo

O VISPECT/VERSÃO 2 não executa o cálculo das concentrações, só emitindo o relatório impresso com os resultados dos cálculos das áreas, atividades e outras informações, conforme já relatado anteriormente. Há a necessidade de executar outro software ou utilizar uma planilha com as fórmulas para execução dos cálculos das concentrações.

SAANI - C:\Silvio-2008\mestrado\vera-analise\Contagem 2.san *

Arquivo Projeto Help

Projeto: C:\Silvio-2008\mestrado\vera-analise\Contagem 2.san

Gráfico Parametros do Arquivo Resultado dos Cálculos Resultado das Concentrações Projeto

Imprimir

	Elemento	FZN15.CHN	S(%)	EU15.CHN	S(%)	CS15.CHN
1	Fe 59(1099.25)	614.008036	9.199496	0.000000	0.000000	0.000000
2	Fe 59(1291.6)	612.936650	10.932921	0.000000	0.000000	0.000000
3	Zn 65(1115.55)	112.731161	1.315917	0.000000	0.000000	0.000000
4	Zn 69m(438.63)	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
5	Eu 152(1408.0)	0.000000	0.000000	0.034972	0.002006	0.000000
6	Eu 152m(841.59)	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
7	Eu 154(1274.51)	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
8	Se 75(136.01)	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	4.490327
9	Se 75(264.66)	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	4.462259
10	Se 75(400.7)	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	4.301402
11	Co 58(810.77)	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
12	Co 60(1173.24)	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.881581

Figura 20 - SAANI: Resultados das concentrações apresentados no vídeo

O novo software elimina a entrada de dados, conforme mostra a Figura 20, recupera automaticamente os resultados e efetua o cálculo de todo o processo dentro do mesmo software SAANI. O usuário irá montar o projeto, inserir os arquivos de espectros, efetuar as configurações e o aplicativo resolve os cálculos das concentrações, através do clique na aba “Resultado Concentrações”.

6.2 – Resultados Obtidos

Para a análise dos dados dos espectros, o software SAANI utiliza uma série de rotinas para localizar e quantificar os picos, calcular os resultados como energia dos picos, área líquida, área do BG, resolução em energia, canal da mediana, canal inicial, largura do pico em número de canais, atividades em contagens/segundos, desvio padrão da atividade em porcentagem.

Para a determinação da concentração dos elementos presentes nas matrizes de interesse (resultados dos cálculos dos espectros) utiliza-se a análise por ativação comparativa, que é o procedimento empregado no Laboratório de Análise por Ativação Neutrônica -LAN-IPEN para a análise dos materiais (amostras).

Nesse método, padrões contendo conhecidas quantidades de elementos de interesse são submetidos ao fluxo de nêutrons juntos com as amostras e as atividades induzidas são medidas nas mesmas condições.

Como cada radioisótopo tem suas próprias características de meia-vida e energia (ou energias) de raios gama, é possível, em geral, identificar os isótopos dos elementos. A quantidade desse elemento na amostra é considerada como diretamente proporcional a taxa de contagens de raios gama.

Sendo, amostra e padrões irradiados juntos sob as mesmas condições de tempo de irradiação e fluxo de nêutrons, a concentração de um elemento particular de interesse é obtida comparando-se as taxas de contagens dos espectros de amostra e padrão.

Para apurar os resultados foram utilizados espectros reais que foram cedidos pelos usuários do LAN-IPEN, para efeito de comparação e validação dos resultados.

6.2.1 – Resultados do processamento dos espectros

Após o processamento dos espectros no sistema de contagem são gerados os arquivos contendo contagens por canais.

Para efeito de comparação e validação dos cálculos efetuados pelo novo software SAANI, foram processados os espectros no software VISPECT/VERSÃO 2, que gerou os resultados impressos de cada espectro e os mesmos espectros foram processados no SAANI.

Após coleta dos resultados nos dois softwares foi feita a comparação entre os resultados obtidos. Nas Tabelas 12 e 13 são apresentados os resultados do processamento do espectro de uma amostra denominada “112-1B.CHN” e do espectro de um padrão denominado “MT4-B.CHN”. Os dois arquivos foram escolhidos por apresentar uma boa quantidade de elementos para a comparação, mostrando as áreas e as atividades que foram calculadas pelos dois softwares.

Tabela 12 - Comparação do espectro: 112-1B.CHN

Amostra:112-1B Elementos	Área			Atividade (CPS)		
	Vispect/ Versão 2	SAANI	Dif. (%)	Vispect/ Versão 2	SAANI	Dif. (%)
Eu-152(121,8)	12549	12549	0,00%	0,349	0,349	0,00%
Se-75 (136,01)	22825	22825	0,00%	0,634	0,634	0,00%
Sc-47 (159,4)	5598	5598	0,00%	0,156	0,156	0,00%
Se-75 (264,66)	16753	16753	0,00%	0,465	0,465	0,00%
Cr-51(320,08)	3357	3357	0,00%	0,093	0,093	0,00%
Eu-152(344,3)	3001	3001	0,00%	0,083	0,083	0,00%
Se-75 (400,7)	4328	4520	4,25%	0,120	0,126	4,76%
Cs-134(604,7)	1501	1501	0,00%	0,042	0,042	0,00%
Ag-110m(657,76)	8501	8501	0,00%	0,236	0,236	0,00%
Cs-134(795,85)	1710	1710	0,00%	0,047	0,048	2,08%
Sc-46(889,28)	51601	51415	0,36%	1,433	1,428	0,35%
Rb-86(1076,6)	2007	2007	0,00%	0,056	0,056	0,00%
Fe-59(1099,25)	15677	15677	0,00%	0,435	0,435	0,00%
Zn-65(1115,55)	52100	52106	0,01%	1,447	1,447	0,00%
Sc-46 (1120,5)	43631	43560	0,16%	1,212	1,210	0,17%
Co-60(1173,24)	9883	9883	0,00%	0,275	0,275	0,00%
Fe-59(1291,6)	10357	10357	0,00%	0,288	0,288	0,00%
Co-60(1332,5)	9015	9015	0,00%	0,250	0,250	0,00%
Eu-152(1408,0)	875	875	0,00%	0,024	0,024	0,00%

Tabela 13 - Comparação do espectro: MT4-B.CHN

Padrão: MT4-B	Área			Atividade (CPS)		
	Vispect/ Versão 2	SAANI	Dif. (%)	Vispect/ Versão 2	SAANI	Dif. (%)
Elementos						
Eu-152(121,8)	3322	3322	0,00%	0,092	0,092	0,00%
Se-75 (136,01)	9259	9259	0,00%	0,257	0,257	0,00%
Sc-47 (159,4)	10531	10531	0,00%	0,293	0,293	0,00%
Se-75 (264,66)	7469	7469	0,00%	0,207	0,207	0,00%
Cr-51(320,08)	1671	1671	0,00%	0,046	0,046	0,00%
Se-75 (400,7)	2081	2081	0,00%	0,058	0,058	0,00%
Cs-134(604,7)	531	531	0,00%	0,015	0,015	0,00%
Sc-46(889,28)	3598	3598	0,00%	0,100	0,100	0,00%
Rb-86(1076,6)	1659	1658	0,06%	0,046	0,046	0,00%
Fe-59(1099,25)	4037	4037	0,00%	0,112	0,112	0,00%
Zn-65(1115,55)	60137	60135	0,00%	1,670	1,670	0,00%
Sc-46 (1120,5)	3535	3535	0,00%	0,098	0,098	0,00%
Co-60(1173,24)	7405	7405	0,00%	0,206	0,206	0,00%
Fe-59(1291,6)	2838	2838	0,00%	0,079	0,079	0,00%
Co-60(1332,5)	6611	6611	0,00%	0,184	0,184	0,00%
Eu-152(1408,0)	169	169	0,00%	0,005	0,005	0,00%

Na Tabela 12 são comparadas as áreas e as atividades para 19 fotopicos presentes no espectro da amostra “112-1B”, sendo que para 15 fotopicos não apresentaram nenhuma diferença e 4 deles apresentaram uma pequena diferença no cálculo da área e da atividade. Esta diferença ocorre devido à precisão do cálculo realizado pelos softwares no algoritmo de busca da região onde estão os picos. Esta é uma diferença percentual muito pequena, que não é relevante, pois a localização das energias é efetuada com sucesso.

Na Tabela 13 são comparados 16 fotopicos presentes no padrão “MT4-B.CHN” e não foram encontradas diferenças significativas em nenhuma área ou atividade.

Os resultados obtidos com o processamento dos espectros nos dois softwares foram excelentes, pois ambos apresentaram resultados satisfatórios, validando as rotinas dos cálculos desenvolvidas no novo software.

6.2.2 – Resultados do cálculo das concentrações

O cálculo de concentrações dos elementos presentes nas amostras pode ser feito através de planilhas do Excel. Este é um dos procedimentos utilizados para este cálculo pelos pesquisadores do LAN-IPEN, conforme mencionado anteriormente. Estas planilhas contêm as fórmulas para os cálculos das concentrações dos elementos. Neste ponto, os usuários através dos relatórios dos resultados dos espectros do software VISPECT/VERSÃO 2 e dos dados referentes as datas das contagens, alimentam as planilhas do Excel para obter os resultados das concentrações.

Os dados foram alimentados na planilha do Excel e comparados com os resultados obtidos pelo novo software SAANI. Na Tabela 14, são mostrados os resultados obtidos através dos dois procedimentos.

Tabela 14 - Comparação das concentrações dos elementos

Amostra: 112-1B						
Elementos	Concentração (mg Kg ⁻¹)			Desvio Padrão		
Padrão: MT4-B	Excel	SAANI	Dif. (%)	1s(%)	1s(%)	Dif. (%)
Se-75 (136,01)	3,92	3,92	0,00%	0,42	0,42	0,00%
Se-75 (264,66)	3,57	3,56	0,28%	0,35	0,35	0,00%
Cr-51(320,08)	0,88	0,87	1,15%	0,31	0,31	0,00%
Se-75 (400,7)	3,29	3,45	4,64%	0,44	0,46	4,35%
Sc-46(889,28)	0,18	0,18	0,00%	0,01	0,01	0,00%
Rb-86(1076,6)	4,33	4,30	0,70%	0,28	0,28	0,00%
Fe-59(1099,25)	581,00	581,07	0,01%	21,78	21,66	0,55%
Zn-65(1115,55)	105,00	105,01	0,01%	9,99	9,96	0,30%
Co-60(1173,24)	0,72	0,72	0,00%	0,03	0,03	0,00%
Fe-59(1291,6)	545,43	546,00	0,10%	20,92	20,87	0,24%
Co-60(1332,5)	0,74	0,74	0,00%	0,03	0,03	0,00%
Eu-152(1408,0)	0,01	0,01	0,00%	0,00	0,00	0,00%

Comparando os resultados da amostra obtidos pelo SAANI e pelos cálculos no programa Excel, observa-se que foram localizados 12 fotopicos em comum

entre estes espectros. Houve uma maior variação da concentração no elemento Se-75 na energia de 400,7keV, que teve sua área e atividade com diferença na precisão do cálculo dos resultados do espectro. As demais concentrações ficaram abaixo de 1,15% de diferença.

Na comparação dos resultados das concentrações, verificou-se que os resultados foram satisfatórios nos dois processos de cálculos, validando os cálculos do novo software SAANI.

CAPÍTULO 7 - CONCLUSÕES

A proposta deste trabalho foi criar um software livre para as análises que são realizadas pelo Laboratório de Análise por Ativação com Nêutrons (LAN) do Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (IPEN).

Para o desenvolvimento do software foi realizado um levantamento de todos os processos e softwares que envolvem a AAN e foi elaborado um projeto utilizando diversas metodologias durante o seu desenvolvimento.

A implantação deste software propicia um crescimento de produtividade, padronização dos procedimentos e uma interface gráfica amigável para os usuários do LAN-IPEN.

O objetivo inicialmente proposto foi alcançado, agregando os dois processos: a obtenção dos resultados do software VISPECT/VERSÃO 2 e os cálculos das concentrações em um só software.

Para efeito de validação dos resultados foram executados vários testes, nos quais os resultados gerados pelo novo software SAANI foram comparados com os resultados e procedimentos atualmente utilizados no LAN-IPEN, comprovando assim as rotinas de cálculos implementadas no novo software SAANI, bem como a interface gráfica.

Este trabalho ainda poderá ser explorado, tornando-se base para novas implementações ou extensões de métodos matemáticos e estatísticos, execução em ambiente de rede, através de interface WEB ou modelo Cliente/Servidor, entre outras melhorias que possam surgir, pois toda a documentação e programas fontes desenvolvidos estarão disponíveis para este fim.

ANEXOS

Anexo A – Listagem do software SAANI: espectro MT4-B.CHN

Resultados Arquivo: MT4-B,CHN - Padrão qua, 16/jul/08

Tempo Total: 36398,46 seg, Massa: 1 Data contagem: 18/6/2008 16:25:00

Tempo Vivo : 36000 seg, Nível sensibilidade: 15

Seq.	Energia	Area	BG	Resol,	Can,Final	Can,Inic	LP	CPS	1S(%)
1	5,20	-1028	133861	-11,20	24,67	51,00	8	0,0286	-50,2
2	72,33	1390	164368	1,44	294,16	287	13	0,0386	41,3
3	75,00	3221	144370	1,18	304,84	299	11	0,0895	16,8
4	121,26	3322	189293	1,57	490,55	484	16	0,0923	18,6
5	136,10	9259	142051	1,35	550,11	544	14	0,2572	5,8
6	144,72	71	18341	0,10	584,73	585	2	0,0020	268,8
7	145,83	1809	98842	1,58	589,17	586	11	0,0502	24,7
8	159,51	10531	122408	1,29	644,09	637	16	0,2925	4,8
9	238,72	1641	37380	1,30	962,02	956	12	0,0456	16,8
10	264,78	7469	44394	1,52	1066,62	1058	19	0,2075	4,2
11	279,64	4022	37095	1,61	1126,27	1117	18	0,1117	7,0
12	300,59	386	15342	0,84	1210,39	1206	9	0,0107	45,7
13	320,13	1671	21715	1,62	1288,81	1281	15	0,0464	12,7
14	338,48	667	15034	1,93	1362,45	1358	12	0,0185	26,3
15	352,00	1083	15629	1,39	1416,74	1409	14	0,0301	16,6
16	400,74	2081	15324	1,67	1612,36	1604	19	0,0578	8,7
17	411,71	630	8323	1,60	1656,40	1652	11	0,0175	20,9
18	511,01	6428	7274	1,32	2055,00	2041	35	0,1785	2,3
19	514,00	3311	6982	1,32	2067,00	2041	35	0,0920	4,0
20	554,54	3176	6378	1,60	2229,74	2222	17	0,0882	4,0
21	583,40	1546	6365	1,65	2345,56	2337	19	0,0429	7,7
22	604,44	531	5982	1,68	2430,04	2425	19	0,0148	21,0
23	609,52	1594	5295	1,72	2450,41	2443	18	0,0443	6,9
24	619,39	1801	4637	1,62	2490,03	2482	16	0,0500	5,8
25	626,70	179	2813	1,43	2519,38	2515	10	0,0050	42,6
26	698,73	753	4276	1,35	2808,49	2801	17	0,0209	12,8
27	727,49	253	2569	0,98	2923,95	2919	11	0,0070	29,1
28	756,53	162	2786	0,85	3040,50	3036	13	0,0045	46,8
29	776,79	2709	4088	1,72	3121,86	3113	19	0,0752	3,9
30	828,13	748	4148	2,01	3327,91	3319	19	0,0208	12,7
31	860,84	254	2534	1,63	3459,21	3454	11	0,0071	28,7
32	889,59	3598	5047	1,79	3574,62	3566	21	0,0999	3,3
33	911,58	1806	3983	1,83	3662,90	3654	21	0,0502	5,5
34	965,26	152	1876	0,79	3878,36	3873	12	0,0042	41,1
35	969,46	1179	2653	1,75	3895,21	3888	21	0,0328	6,8
36	1044,40	719	1503	1,77	4196,03	4187	18	0,0200	8,5
37	1077,23	1658	1761	1,82	4327,79	4317	21	0,0461	4,3
38	1090,57	96	623	0,74	4381,37	4378	9	0,0027	38,3
39	1099,67	4037	1852	1,83	4417,88	4407	23	0,1121	2,2
40	1115,89	60135	1817	1,93	4483,00	4469	47	1,6704	0,0
41	1120,88	3535	1448	1,84	4503,00	4469	47	0,0982	0,0
42	1173,66	7405	1202	1,95	4714,87	4700	27	0,2057	1,3
43	1201,98	82	427	0,88	4828,53	4824	11	0,0023	37,4

44	1238,54	288	669	1,77	4975,32	4969	17	0,0080	14,0
45	1280,67	38	305	1,35	5144,41	5140	8	0,0010	67,6
46	1291,92	2838	656	2,10	5189,56	5178	24	0,0788	2,3
47	1297,40	867	605	2,19	5211,58	5201	21	0,0241	5,3
48	1318,11	682	616	2,03	5294,72	5284	21	0,0189	6,4
49	1333,00	6611	743	2,06	5354,48	5342	27	0,1836	1,4
50	1378,15	119	394	1,57	5535,69	5529	13	0,0033	25,4
51	1402,27	50	282	0,81	5632,51	5628	11	0,0014	49,9
52	1408,72	169	390	1,70	5658,41	5652	15	0,0047	18,2
53	1432,46	23	170	1,67	5753,69	5750	7	0,0006	84,1
54	1461,39	2176	549	2,17	5869,83	5855	27	0,0604	2,6
55	1475,33	291	390	2,09	5925,78	5917	18	0,0081	11,2
56	1496,42	16	170	0,73	6010,42	6008	6	0,0004	117,9
57	1501,56	30	201	0,68	6031,06	6027	9	0,0008	69,3
58	1509,54	135	339	1,81	6063,09	6054	16	0,0038	21,1
59	1516,37	67	174	1,16	6090,51	6086	11	0,0019	30,5
60	1588,87	370	340	1,92	6381,51	6373	17	0,0103	8,8
61	1593,00	424	509	2,22	6398,11	6389	19	0,0118	9,0
62	1621,64	166	243	1,60	6513,09	6507	14	0,0046	15,3
63	1638,84	42	187	1,32	6582,12	6577	11	0,0012	48,6
64	1661,52	15	173	0,24	6673,14	6669	9	0,0004	130,8
65	1730,14	223	222	2,50	6948,59	6941	18	0,0062	11,6
66	1758,82	45	81	0,85	7063,73	7060	8	0,0012	32,2
67	1765,32	1040	357	2,19	7089,81	7079	23	0,0289	4,0
68	1848,37	136	190	1,96	7423,17	7416	15	0,0038	16,7
69	1871,76	10	59	0,84	7517,03	7515	5	0,0003	115,1
70	1872,94	49	100	1,08	7521,78	7519	8	0,0014	32,4
71	1994,89	518	795	2,03	8011,27	8004	16	0,0144	8,9

Anexo B – Listagem do software VISPECT/VERSAO 2: espectro MT4-B.CHN

Mt4-b.chn desde o canal 0 ate o canal 8191
Contagem - inicio...: 18/jun/08 16:25

Tempo total = 36398.5 segundos
Tempo vivo = 36000.0 segundos

Pk	It	Energia	Área	BG	Resol	Canal	Cini	LP	Cps	1S%
1	0	17,55	-296	133129	10,30	74,25	51	8	-0,008	-174,0
2	0	13,09	-942	243607	-0,50	56,34	58	17	-0,026	-74,0
3	0	72,79	1390	164368	1,58	295,97	287	13	0,039	41,3
4	0	75,00	3221	144370	1,18	304,84	299	11	0,089	16,8
5	0	121,26	3322	189293	1,57	490,55	484	16	0,092	18,6
6	0	136,10	9259	142051	1,35	550,11	544	14	0,257	5,8
7	0	144,79	71	18341	0,22	585,00	585	2	0,002	268,8
8	0	145,83	1809	98842	1,58	589,17	586	11	0,050	24,7
9	0	159,51	10531	122408	1,29	644,09	637	16	0,293	4,8
10	0	238,72	1641	37380	1,30	962,02	956	12	0,046	16,8
11	0	264,78	7469	44394	1,52	1066,62	1058	19	0,207	4,2
12	0	279,64	4022	37095	1,61	1126,27	1117	18	0,112	7,0
13	0	300,59	386	15342	0,84	1210,39	1206	9	0,011	45,7
14	0	320,13	1671	21715	1,62	1288,81	1281	15	0,046	12,7
15	0	338,48	667	15034	1,93	1362,45	1358	12	0,019	26,3
16	0	352,00	1083	15629	1,39	1416,74	1409	14	0,030	16,6
17	0	400,74	2081	15324	1,67	1612,36	1604	19	0,058	8,7
18	0	411,71	630	8323	1,60	1656,40	1652	11	0,017	20,9
19	3	511,08	6454	7266	1,32	2055,29	2041	35	0,179	2,2
20	3	514,04	3314	6978	1,32	2067,17	2041	35	0,092	4,0
21	0	554,54	3176	6378	1,60	2229,74	2222	17	0,088	4,0
22	0	583,40	1546	6365	1,65	2345,56	2337	19	0,043	7,7
23	0	605,02	531	5982	2,15	2432,36	2425	19	0,015	21,0
24	0	609,52	1594	5295	1,72	2450,41	2443	18	0,044	6,9
25	0	619,39	1801	4637	1,62	2490,03	2482	16	0,050	5,8
26	0	626,70	179	2813	1,43	2519,38	2515	10	0,005	42,6
27	0	698,73	753	4276	1,35	2808,49	2801	17	0,021	12,8
28	0	727,49	253	2569	0,98	2923,95	2919	11	0,007	29,1
29	0	756,53	162	2786	0,85	3040,50	3036	13	0,004	46,8
30	0	776,79	2709	4088	1,72	3121,86	3113	19	0,075	3,9
31	0	828,13	748	4148	2,01	3327,91	3319	19	0,021	12,7
32	0	860,84	254	2534	1,63	3459,21	3454	11	0,007	28,7
33	0	889,59	3598	5047	1,79	3574,62	3566	21	0,100	3,3
34	0	911,58	1806	3983	1,83	3662,90	3654	21	0,050	5,5
35	0	965,26	152	1876	0,79	3878,36	3873	12	0,004	41,1
36	0	969,46	1179	2653	1,75	3895,21	3888	21	0,033	6,8
37	0	1044,40	719	1503	1,77	4196,03	4187	18	0,020	8,5
38	0	1077,23	1659	1761	1,82	4327,79	4317	21	0,046	4,3
39	0	1090,57	96	623	0,74	4381,37	4378	9	0,003	38,3
40	0	1099,67	4037	1852	1,83	4417,88	4407	23	0,112	2,2

41	4	1115,96	60137	1802	1,92	4483,28	4469	47	1,670	0,4
42	4	1120,93	3535	1441	1,83	4503,21	4469	47	0,098	2,3
43	0	1173,66	7405	1202	1,95	4714,87	4700	27	0,206	1,3
44	0	1201,98	82	427	0,88	4828,53	4824	11	0,002	37,4
45	0	1238,54	288	669	1,77	4975,32	4969	17	0,008	14,0
46	0	1280,67	38	305	1,35	5144,41	5140	8	0,001	67,6
47	0	1292,11	2838	656	2,15	5190,35	5178	24	0,079	2,3
48	0	1297,40	867	605	2,19	5211,58	5201	21	0,024	5,3
49	0	1318,11	682	616	2,02	5294,72	5284	21	0,019	6,4
50	0	1333,00	6611	743	2,06	5354,48	5342	27	0,184	1,4
51	0	1378,15	119	394	1,57	5535,69	5529	13	0,003	25,4
52	0	1402,27	50	282	0,81	5632,51	5628	11	0,001	49,9
53	0	1408,72	169	390	1,70	5658,41	5652	15	0,005	18,2
54	0	1432,46	23	170	1,67	5753,69	5750	7	0,001	84,1
55	0	1461,39	2176	549	2,17	5869,83	5855	27	0,060	2,6
56	0	1475,33	291	390	2,09	5925,78	5917	18	0,008	11,2
57	0	1496,42	16	170	0,73	6010,42	6008	6	0,000	117,9
58	0	1501,56	30	201	0,68	6031,06	6027	9	0,001	69,3
59	0	1509,54	135	339	1,81	6063,09	6054	16	0,004	21,1
60	0	1516,37	67	174	1,16	6090,51	6086	11	0,002	30,5
61	0	1588,88	370	340	1,95	6381,56	6373	17	0,010	8,8
62	0	1593,00	424	509	2,22	6398,11	6389	19	0,012	9,0
63	0	1621,64	166	243	1,60	6513,09	6507	14	0,005	15,3
64	0	1638,84	42	187	1,32	6582,12	6577	11	0,001	48,6
65	0	1661,52	15	173	0,24	6673,14	6669	9	0,000	130,8
66	0	1730,14	223	222	2,50	6948,59	6941	18	0,006	11,6
67	0	1758,82	45	81	0,85	7063,73	7060	8	0,001	32,2
68	0	1765,32	1040	357	2,19	7089,81	7079	23	0,029	4,0
69	0	1848,37	136	190	1,96	7423,17	7416	15	0,004	16,7
70	0	1871,94	10	59	0,57	7517,75	7515	5	0,000	115,1
71	0	1872,94	49	100	1,08	7521,78	7519	8	0,001	32,4
72	0	1994,89	518	795	2,03	8011,27	8004	16	0,014	8,9

Anexo C – Listagem do software SAANI: espectro 112-1B.CHN

Resultados Arquivo: 112-1B.CHN - Padrão qua, 16/jul/08

Tempo Total: 36716,86 seg, Massa: 0,14848 Data contagem: 17/6/2008 19:41:00

Tempo Vivo : 36000 seg, Nível sensibilidade: 15

Seq,	Energia	Area	BG	Resol,	Can,Final	Can,I nic	LP	CPS	1S(%)
1	7,36	-2481	236093	-7,44	33,35	51	8	-0,0689	-27,6
2	75,09	2755	261811	1,03	305,20	300	11	0,0765	26,3
3	98,67	3307	355115	1,24	399,85	395	14	0,0919	25,5
4	121,52	12549	343192	1,61	491,59	484	16	0,3486	6,7
5	136,11	22825	274915	1,34	550,15	543	15	0,6340	3,3
6	145,51	11231	263704	1,33	587,89	581	16	0,3120	6,5
7	159,48	5598	179296	1,28	643,95	638	13	0,1555	10,8
8	192,49	3101	139803	1,23	776,47	771	15	0,0862	17,1
9	238,83	2177	83670	1,70	962,47	956	15	0,0605	18,9
10	264,78	16753	89726	1,53	1066,65	1058	21	0,4654	2,6
11	279,59	9015	74523	1,54	1126,09	1115	20	0,2504	4,4
12	299,91	2851	56367	2,56	1207,65	1199	18	0,0792	11,9
13	312,03	10116	61538	1,58	1256,28	1245	22	0,2810	3,6
14	320,22	3357	40028	1,53	1289,18	1282	15	0,0932	8,6
15	340,50	586	18303	0,86	1370,58	1367	8	0,0163	32,9
16	344,41	3001	37278	1,62	1386,28	1379	17	0,0834	9,3
17	351,78	242	16823	0,77	1415,87	1413	8	0,0067	76,0
18	400,56	4520	30908	1,56	1611,66	1604	21	0,1255	5,7
19	404,39	480	13918	1,45	1627,04	1624	10	0,0133	35,1
20	447,06	322	12478	0,92	1798,32	1794	11	0,0090	49,3
21	482,37	1308	13960	1,55	1940,04	1932	15	0,0363	13,1
22	497,61	318	7893	0,84	2001,21	1997	9	0,0088	39,9
23	510,99	6961	22960	2,46	2054,93	2042	24	0,1934	3,3
24	554,55	4693	14410	1,66	2229,76	2219	21	0,1303	3,9
25	569,97	546	8487	1,71	2291,68	2285	13	0,0152	24,2
26	583,44	1454	11403	1,72	2345,72	2337	18	0,0404	10,7
27	604,99	1501	10083	1,53	2432,25	2425	16	0,0417	9,8
28	609,52	1110	9087	1,58	2450,41	2443	15	0,0308	12,5
29	619,49	2569	11520	1,86	2490,45	2481	20	0,0714	6,2
30	658,04	8501	11645	1,76	2645,17	2635	21	0,2361	2,1
31	676,89	147	3260	0,65	2720,86	2718	6	0,0041	55,5
32	677,90	207	3370	0,50	2724,89	2723	6	0,0057	40,3
33	687,09	570	8355	1,91	2761,79	2754	16	0,0158	23,0
34	698,61	1327	7735	2,05	2808,04	2800	17	0,0369	9,8
35	707,11	1448	8967	1,68	2842,16	2833	20	0,0402	9,6
36	727,60	217	3951	1,00	2924,38	2921	9	0,0060	41,5
37	744,92	559	5845	1,89	2993,90	2987	15	0,0155	19,8
38	764,26	2208	7517	2,08	3071,54	3062	20	0,0613	5,9
39	776,85	3368	8393	1,78	3122,08	3111	20	0,0935	4,2
40	796,12	1710	7676	2,10	3199,44	3188	21	0,0475	7,6
41	802,04	38	1903	1,85	3223,18	3223	5	0,0010	164,6
42	819,04	383	5495	2,40	3291,45	3285	15	0,0106	27,8

43	828,14	1196	7213	1,97	3327,96	3318	20	0,0332	10,5
44	861,08	172	3833	0,67	3460,17	3456	10	0,0048	51,6
45	879,70	275	4609	1,53	3534,91	3530	11	0,0076	35,4
46	884,95	5319	9906	2,09	3556,00	3544	44	0,1478	3,0
47	889,44	51415	9458	1,97	3574,00	3544	44	1,4282	0,0
48	911,70	1992	6261	1,83	3663,38	3653	19	0,0553	6,0
49	937,95	2038	5467	1,84	3768,72	3759	20	0,0566	5,6
50	969,65	908	3584	1,73	3895,96	3890	16	0,0252	9,9
51	1044,50	851	2476	2,00	4196,42	4187	17	0,0236	9,0
52	1077,32	2007	2514	2,04	4328,18	4319	19	0,0557	4,2
53	1099,80	15677	3625	2,10	4418,39	4402	30	0,4355	1,0
54	1115,89	52106	3693	2,22	4483,00	4466	54	1,4474	0,0
55	1120,88	43560	2987	2,18	4503,00	4466	54	1,2100	0,0
56	1173,81	9883	2330	2,19	4715,48	4700	30	0,2745	1,2
57	1221,57	123	768	1,52	4907,19	4902	12	0,0034	33,1
58	1238,78	130	908	1,14	4976,27	4969	13	0,0036	33,9
59	1272,41	102	539	1,37	5111,26	5106	11	0,0028	33,7
60	1281,87	68	456	0,92	5149,21	5145	9	0,0019	46,0
61	1292,24	10357	1515	2,32	5190,87	5176	30	0,2877	1,1
62	1298,16	96	638	1,50	5214,63	5210	10	0,0027	38,7
63	1318,12	952	1092	2,35	5294,73	5283	26	0,0264	5,9
64	1333,18	9015	1300	2,37	5355,18	5341	30	0,2504	1,2
65	1349,54	80	335	1,12	5420,86	5417	10	0,0022	34,2
66	1377,41	4	160	0,12	5532,73	5532	3	0,0001	450,0
67	1378,52	111	438	1,45	5537,17	5534	10	0,0031	28,2
68	1384,95	1555	873	2,51	5562,97	5550	27	0,0432	3,7
69	1408,81	875	725	2,25	5658,76	5649	21	0,0243	5,5
70	1461,60	2154	873	2,41	5870,67	5858	27	0,0598	2,9
71	1475,97	713	700	2,72	5928,34	5917	25	0,0198	6,4
72	1505,82	588	755	2,44	6048,17	6038	23	0,0163	7,8
73	1510,85	60	315	0,96	6068,36	6064	10	0,0017	43,8
74	1543,25	124	450	1,64	6198,43	6189	15	0,0034	25,8
75	1588,58	387	500	2,54	6380,36	6369	21	0,0107	9,6
76	1593,34	412	720	2,30	6399,48	6389	20	0,0114	10,4
77	1621,86	89	348	1,64	6513,96	6508	12	0,0025	31,5
78	1630,84	23	578	1,94	6550,00	6543	18	0,0006	151,0
79	1631,59	103	572	1,94	6553,00	6543	18	0,0029	34,2
80	1662,89	19	155	0,41	6678,65	6676	6	0,0005	95,5
81	1730,15	114	397	2,12	6948,62	6939	16	0,0032	26,5
82	1765,55	1085	490	2,58	7090,71	7078	26	0,0301	4,2
83	1849,32	44	203	1,21	7426,97	7423	10	0,0012	48,6
84	1949,61	34	121	1,02	7829,53	7823	11	0,0009	48,9
85	1994,64	484	847	1,65	8010,29	8005	14	0,0134	9,6

Anexo D – Listagem do software VISPECT/VERSAO 2: espectro 112-1B.CHN

112-1b.chn desde o canal 0 ate o canal 8191

Contagem - inicio...: 17JUN08 19:41

Tempo total = 36398.5 segundos

Tempo vivo = 36000.0 segundos

Pk	It	Energia	Área	BG	Resol	Canal	Cini	LP	Cps	1S%
1	0	7,36	-2481	236093	-7,44	33,35	51	8	-27,669	
2	0	75,09	2755	261811	1,03	305,20	300	11	0,077	26,3
3	0	98,67	3307	355115	1,24	399,85	395	14	0,092	25,5
4	0	121,52	12549	343192	1,61	491,59	484	16	0,349	6,7
5	0	136,11	22825	274915	1,34	550,15	543	15	0,634	3,3
6	0	145,51	11231	263704	1,33	587,89	581	16	0,312	6,5
7	0	159,48	5598	179296	1,28	643,95	638	13	0,156	10,8
8	0	192,49	3102	139803	1,23	776,47	771	15	0,086	17,1
9	0	238,83	2177	83670	1,70	962,47	956	15	0,060	18,9
10	0	264,78	16753	89726	1,53	1066,65	1058	21	0,465	2,6
11	0	279,59	9015	74523	1,54	1126,09	1115	20	0,250	4,4
12	0	299,91	2851	56367	2,56	1207,65	1199	18	0,079	11,9
13	0	312,03	10116	61538	1,58	1256,28	1245	22	0,281	3,6
14	0	320,22	3357	40028	1,53	1289,18	1282	15	0,093	8,6
15	0	340,50	586	18303	0,86	1370,58	1367	8	0,016	32,9
16	0	344,41	3001	37278	1,62	1386,28	1379	17	0,083	9,3
17	0	351,78	242	16823	0,77	1415,87	1413	8	0,007	76,0
18	0	400,76	4328	29697	1,58	1612,44	1604	20	0,120	5,8
19	0	447,06	322	12478	0,92	1798,32	1794	11	0,009	49,3
20	0	482,37	1308	13960	1,55	1940,04	1932	15	0,036	13,1
21	0	497,61	318	7893	0,84	2001,21	1997	9	0,009	39,9
22	0	510,99	6961	22960	2,46	2054,93	2042	24	0,193	3,3
23	0	554,55	4693	14410	1,66	2229,76	2219	21	0,130	3,9
24	0	569,97	546	8487	1,71	2291,68	2285	13	0,015	24,2
25	0	583,44	1454	11403	1,72	2345,72	2337	18	0,040	10,7
26	0	604,99	1501	10083	1,53	2432,25	2425	16	0,042	9,8
27	0	609,52	1110	9088	1,58	2450,41	2443	15	0,031	12,5
28	0	619,49	2569	11520	1,86	2490,45	2481	20	0,071	6,2
29	0	658,04	8501	11645	1,76	2645,17	2635	21	0,236	2,1
30	0	676,99	147	3260	0,72	2721,23	2718	6	0,004	55,5
31	0	677,90	207	3370	0,50	2724,89	2723	6	0,006	40,3
32	0	687,09	570	8355	1,91	2761,79	2754	16	0,016	23,0
33	0	698,61	1327	7735	2,05	2808,04	2800	17	0,037	9,8
34	0	707,11	1448	8967	1,68	2842,16	2833	20	0,040	9,6
35	0	727,60	217	3951	1,00	2924,38	2921	9	0,006	41,5
36	0	744,92	559	5845	1,89	2993,90	2987	15	0,016	19,8
37	0	764,26	2208	7517	2,08	3071,54	3062	20	0,061	5,9
38	0	776,85	3368	8393	1,78	3122,08	3111	20	0,094	4,2
39	0	796,12	1710	7676	2,10	3199,44	3188	21	0,047	7,6
40	0	802,04	38	1903	1,85	3223,18	3223	5	0,001	164,6

41	0	819,04	383	5495	2,40	3291,45	3285	15	0,011	27,8
42	0	828,14	1196	7213	1,97	3327,96	3318	20	0,033	10,5
43	0	861,08	172	3833	0,67	3460,17	3456	10	0,005	51,6
44	0	879,70	275	4609	1,53	3534,91	3530	11	0,008	35,4
45	5	885,15	4934	7990	1,68	3556,80	3544	44	0,137	2,9
46	5	889,67	51601	9047	1,88	3574,95	3544	44	1,433	0,5
47	0	911,70	1992	6261	1,83	3663,39	3653	19	0,055	6,0
48	0	937,95	2038	5467	1,84	3768,72	3759	20	0,057	5,6
49	0	969,65	908	3584	1,73	3895,96	3890	16	0,025	9,9
50	0	1044,50	851	2476	2,00	4196,42	4187	17	0,024	9,0
51	0	1077,32	2007	2514	2,04	4328,18	4319	19	0,056	4,2
52	0	1099,80	15677	3625	2,10	4418,39	4402	30	0,435	1,0
53	5	1116,09	52100	3526	2,14	4483,80	4466	54	1,447	0,5
54	5	1121,10	43631	2882	2,12	4503,90	4466	54	1,212	0,5
55	0	1173,81	9883	2330	2,19	4715,48	4700	30	0,275	1,2
56	0	1221,57	123	768	1,52	4907,19	4902	12	0,003	33,1
57	0	1238,78	130	908	1,14	4976,27	4969	13	0,004	33,9
58	0	1272,41	102	539	1,37	5111,26	5106	11	0,003	33,7
59	0	1281,87	68	456	0,92	5149,21	5145	9	0,002	46,0
60	0	1292,24	10357	1515	2,32	5190,87	5176	30	0,288	1,1
61	0	1298,16	96	638	1,50	5214,63	5210	10	0,003	38,7
62	0	1318,12	952	1092	2,35	5294,73	5283	26	0,026	5,9
63	0	1333,18	9015	1300	2,37	5355,18	5341	30	0,250	1,2
64	0	1349,54	80	335	1,12	5420,86	5417	10	0,002	34,2
65	0	1377,47	4	160	0,24	5532,95	5532	3	0,000	450,0
66	0	1378,52	111	438	1,45	5537,17	5534	10	0,003	28,2
67	0	1384,94	1555	873	2,51	5562,97	5550	27	0,043	3,7
68	0	1408,81	875	725	2,25	5658,76	5649	21	0,024	5,5
69	0	1461,60	2154	873	2,41	5870,67	5858	27	0,060	2,9
70	0	1475,97	713	700	2,72	5928,34	5917	25	0,020	6,4
71	0	1505,82	588	755	2,44	6048,17	6038	23	0,016	7,8
72	0	1510,85	60	315	0,96	6068,36	6064	10	0,002	43,8
73	0	1543,25	124	450	1,64	6198,43	6189	15	0,003	25,8
74	0	1588,87	387	500	2,64	6381,54	6369	21	0,011	9,6
75	0	1593,34	412	720	2,30	6399,48	6389	20	0,011	10,4
76	0	1621,86	89	348	1,64	6513,96	6508	12	0,002	31,5
77	10	1631,03	23	576	1,94	6550,77	6543	18	0,001	150,8
78	10	1631,66	103	572	1,94	6553,28	6543	18	0,003	34,2
79	0	1662,89	19	155	0,41	6678,65	6676	6	0,001	95,5
80	0	1730,15	114	397	2,12	6948,62	6939	16	0,003	26,5
81	0	1765,55	1085	490	2,58	7090,71	7078	26	0,030	4,2
82	0	1849,32	44	203	1,21	7426,97	7423	10	0,001	48,6
83	0	1949,61	34	121	1,02	7829,53	7823	11	0,001	48,9
84	0	1994,64	484	847	1,65	8010,29	8005	14	0,013	9,6

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ALFASSI, Activation Analysis, Boca Raton, Fla.: CRC Press, 1990, v.1.

BAEDECKER, P. A. Digital methods of photopeak integration in activation analysis. Anal. Chem., v.43, n.3, p.405-410, 1971

BONA, C. Avaliação de Processos de Software: Um estudo de caso em XP e Iconix. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Santa Catarina, 2002. Disponível em: <<http://teses.eps.ufsc.br/defesa/pdf/10816.pdf>>. Acesso em: Novembro 2004.

CANBERRA: Genie-2000. Disponível em <<http://www.canberra.com>>. Acesso em: Janeiro 2006.

COSTA, M. T. C. da. Processo de Desenvolvimento de Software com UML. São José, SC: [s.n.], 2001. Apud in (7).

GUSTAFSON, D. A. Teoria e Problemas de Engenharia de Software. Porto Alegre: Bookman, 2003. (Coleção Schaum). Trad. Fernanda Cláudia Alves Campos.

IAEA. Guidelines for radioelement mapping using gamma ray spectrometry data. Viena, Austria, IAEA-TECDOC-1363, July 2003.

IAEA. Intercomparison of Gamma Ray Analysis Software Packages. Viena, Austria, IAEA-TECDOC-1011, April 1998.

Joseph Feller, Brian FitzGerald - Understanding Open Source Software Development. 2002.

PRESSMAN, R. Engenharia de Software. 5a. ed. [S.l.]: McGraw-Hill Interame, 2002. 872 pág, ISBN 8586804258.

Open Source Initiative - Disponível em: <<http://www.opensource.org>>. Acesso em: 29/07/2007.

ORTEC: GammaVision-32. Disponível em <<http://www.ortec-online.com>>. Acesso em: Janeiro 2006.

PYTHON Programming Language. Disponível em: <<http://www.python.org>>. Acesso em: Setembro 2004.

RAYMOND, E. S. The Cathedral and The Bazaar. In: The Cathedral and TheBazaar. 1st ed. Sebastopol: O'Reilly and Associates, 1999. p. 27–78. Disponível em: <<http://www.tuxedo.org/esr/writings/cathedral-bazaar/>>. Acesso em 07 de Abril de 2007.

REZENDE, D. A. Engenharia de Software e Sistemas de Informação. [S.l.]: Basport, 2002. 358 pág, ISBN 8574520942.

RIVERBANK: PyQt. Disponível em: <http://www.riverbankcomputing.co.uk/pyqt/index.php>. Acesso em: Dezembro 2005.

SIMONITS A. et al. Hyperlab: A new concept in gamma-ray spectrum analysis. Jornal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry, v. 257, n. 3, p. 589–595, 2003.

SOLÉ, V.A.; PAPILLON, E.; COTTE, M.; WALTER, PH.; SUSINI, J. A multiplatform code for the analysis of energy-dispersive X-ray fluorescence spectra, Spectrochim. Acta Part B 62 (2007) 63-68.

SOMMERVILLE, I. Engenharia de Software. 6a. ed. [S.l.]: Prentice Hall Brasil, 2003. 608 pág, ISBN 8588639076.

TROLLTECH. Disponível em: <<http://www.trolltech.com>>. Acesso em: Dezembro 2005.