



INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES

Autarquia associada à Universidade de São Paulo

**DESENVOLVIMENTO DE UM CÓDIGO COMPUTACIONAL ABERTO DE
ANÁLISE QUANTITATIVA PARA DETERMINAÇÃO DE RADIONUCLÍDEOS
POR ESPECTROMETRIA GAMA COM DETECTORES SEMICONDUTORES**

MARCELO FRANCIS MÁDUAR

**Tese apresentada como parte dos
requisitos para obtenção do Grau de
Doutor em Ciências na Área de
Tecnologia Nuclear – Aplicações.**

Orientadora:

Dra. Brigitte Roxana Soreanu Pecequilo

SÃO PAULO

2010

À Vida

e a meus pais, que a Ela me trouxeram.

AGRADECIMENTOS

À minha orientadora, Brigitte Pecequilo, pelo incentivo, apoio, ricas conversas, troca de ideias, histórias e filmes contados, durante todos esses anos em que temos trabalhado juntos. E especialmente pela bibliografia, tanto a principal como a não menos importante bibliografia complementar!

A todo o pessoal da Radiometria Ambiental, pelo apoio, pela amizade, pelas necessárias críticas e sugestões – e pelos insistentes pedidos para a rápida liberação do software que é fruto deste trabalho...

Ao IPEN, pela oportunidade e infra-estrutura para a realização deste projeto.

Aos amigos, que são muitos (ainda bem!), e por isso não tenho como agradecer aqui a cada um. Estão sempre presentes (mesmo aqueles que há tempos não encontro), e as palavras são poucas para expressar a força, cobranças, companheirismo, momentos inesquecíveis e por tudo que só eles podem nos oferecer.

*Para ser grande, sê inteiro: nada
Teu exagera ou exclui.
Sê todo em cada coisa. Põe quanto és
No mínimo que fazes.
Assim em cada lago a lua toda
Brilha, porque alta vive.*

Ricardo Reis

DESENVOLVIMENTO DE UM CÓDIGO COMPUTACIONAL ABERTO DE ANÁLISE QUANTITATIVA PARA DETERMINAÇÃO DE RADIONUCLÍDEOS POR ESPECTROMETRIA GAMA COM DETECTORES SEMICONDUTORES

Marcelo Francis Máduar

RESUMO

A quantificação da atividade de radionuclídeos emissores de raios gama em amostras medidas por espectrometria gama com detectores HPGe depende da análise dos fotopicos presentes no espectro, especialmente da determinação exata das suas áreas líquidas. Tal análise é geralmente realizada com o auxílio de ferramentas de software proprietário.

Este trabalho apresenta uma metodologia, descrição de algoritmos e um aplicativo de código aberto, denominado OpenGamma, para a busca e análise de fotopicos a fim de se obter seus parâmetros relevantes e as atividades dos radionuclídeos na amostra. A implementação computacional é distribuída sob licença aberta para o código principal e com o uso de pacotes de software aberto para o projeto da interface e para bibliotecas matemáticas.

O procedimento para a busca de picos é realizado em três etapas. Primeiramente, executa-se uma pesquisa preliminar com o método da segunda diferença, que consiste na geração de um espectro derivado para a busca de picos candidatos. Na segunda etapa, calculam-se as larguras experimentais dos picos, dos quais escolhem-se aqueles bem formados e isolados para a obtenção da função de ajuste da largura vs. canal, por meio do método de Levenberg-Marquardt para ajustes não-lineares. Por fim, regiões do espectro com picos agrupados são delimitadas e novo ajuste não-linear é aplicado a cada região para a obtenção dos termos da linha de base e dos fotopicos. A partir destes termos, são calculadas as áreas líquidas dos picos.

Para a determinação da atividade, curvas de calibração de eficiência previamente obtidas, bem como dados de transições gama dos radionuclídeos, são incorporadas ao código e aplicadas.

O código foi escrito em linguagem C++ e a interface foi desenvolvida com a ferramenta Qt. Para as funções matemáticas e procedimentos de ajuste, foi usada a biblioteca científica GNU (GSL). A validação de código foi feita por meio da análise de: 1) espectros sintéticos de teste da AIEA, especialmente desenhados para a avaliação de desempenho de software; 2) espectros obtidos com amostras de exercícios de intercomparação e 3) espectros da rotina de trabalho do Laboratório de Radiometria Ambiental (LRA) do IPEN e analisados com o aplicativo comercial InterWinner.

Os resultados obtidos são consistentes com os valores de referência e com aqueles obtidos pelo aplicativo citado, sugerindo que o código OpenGamma pode ser utilizado com segurança na espectrometria de raios gama de uso geral.

DEVELOPMENT OF AN OPEN SOURCE SOFTWARE OF QUANTITATIVE ANALYSIS FOR RADIONUCLIDE DETERMINATION BY GAMMA-RAY SPECTROMETRY USING SEMICONDUCTOR DETECTORS

Marcelo Francis Máduar

ABSTRACT

Radioactivity quantification of gamma-ray emitter radionuclides in samples measured by HPGe gamma-ray spectrometry relies on the analysis of the photopeaks present in the spectra, especially on the accurate determination of their net areas. Such a task is usually performed with the aid of proprietary software tools.

This work presents a methodology, algorithm descriptions and an open source application, called OpenGamma, for the peak search and analysis in order to obtain the relevant peaks parameters and radionuclides activities. The computational implementation is released entirely in open-source license for the main code and with the use of open software packages for interface design and mathematical libraries.

The procedure for the peak search is performed on a three step approach. Firstly a preliminary search is done by using the second-difference method, consisting in the generation of a derived spectrum in order to find candidate peaks. In the second step, the experimental peaks widths are assessed and well formed and isolated ones are chosen to obtain a FWHM vs. channel relationship, by application of the Levenberg-Marquardt minimization method for non-linear fitting. Lastly, regions of the spectrum with grouped peaks are marked and a non-linear fit is again applied to each region to obtain baseline and photopeaks terms; from these terms, peaks net areas are then assessed.

For the activity determination, previously obtained efficiency calibration curves, as well as nuclides gamma-ray data, are incorporated in the code and applied.

The code was developed in C++ language and the interface was developed with Qt GUI software toolkit. GNU scientific library, GSL, was employed to perform fitting procedures as needed.

Validation of code was done by analyzing: 1) synthetic test spectra from IAEA, especially designed for software performance evaluation; 2) spectra obtained from samples of intercomparison exercises and 3) spectra from routine activities of the Environmental Radiometric Laboratory (LRA) at IPEN and analyzed with the commercial software package InterWinner.

Results obtained are consistent with the reference values and with those obtained by the aforementioned package. The results suggest that the OpenGamma code could be safely used in general-purpose gamma-ray spectrometry.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	CONSIDERAÇÕES GERAIS	1
1.2	OBJETIVOS	3
2	ESPECTROMETRIA GAMA COM DETECTORES SEMICONDUTORES	5
2.1	PRINCÍPIOS	5
2.1.1	<i>Interação da radiação gama com a matéria</i>	5
2.1.2	<i>Decaimento radioativo e radionuclídeos</i>	7
2.2	CARACTERÍSTICAS DE ESPECTROS GAMA	8
3	MÉTODOS	11
3.1	ANÁLISE DE ESPECTROS GAMA	11
3.1.1	<i>Identificação dos componentes de um espectro</i>	13
3.1.2	<i>Identificação de radionuclídeos</i>	15
3.1.3	<i>Análise quantitativa</i>	17
3.2	PROJETO E DESENVOLVIMENTO DE CÓDIGOS COMPUTACIONAIS	20
3.3	INTERCOMPARAÇÕES DE MEDIDAS ANALÍTICAS E DE CÓDIGOS COMPUTACIONAIS	21
4	O CÓDIGO OPENGAMMA	24
4.1	DESCRIÇÃO GERAL	24
4.2	ARQUITETURA E IMPLEMENTAÇÃO	26
4.2.1	<i>Ambiente de desenvolvimento</i>	26
4.2.2	<i>Estruturas de dados</i>	27
4.3	BIBLIOTECAS DE CÓDIGO ABERTO	28
4.3.1	<i>GSL (GNU Scientific Library)</i>	28
4.3.2	<i>Qwt (Qt Widgets for Technical Applications)</i>	30
4.3.3	<i>Portabilidade e plataformas</i>	30
4.4	INTERNACIONALIZAÇÃO	31
4.5	HOSPEDAGEM E DISTRIBUIÇÃO DO CÓDIGO	32
4.6	BUSCA DE FOTOPICOS	32
4.6.1	<i>Fluxograma geral</i>	32
4.6.2	<i>Método da segunda diferença</i>	35
4.7	ANÁLISE E FUNÇÕES DE AJUSTE	37
4.7.1	<i>Calibração canal vs. energia</i>	37
4.7.2	<i>Determinação da linha base</i>	38
4.7.3	<i>Função de ajuste dos fotopicos</i>	39
4.7.4	<i>Resolução (largura) de pico</i>	41

4.7.5	<i>Linha-base e resolução de multipletos</i>	44
4.7.6	<i>Algoritmo de Levenberg-Marquardt</i>	45
4.8	DETERMINAÇÃO DA ATIVIDADE	46
4.8.1	<i>Curvas de eficiência de detecção</i>	46
4.8.2	<i>Bibliotecas de transições gama de radionuclídeos</i>	48
4.8.3	<i>Determinação da atividade em amostras</i>	50
5	RESULTADOS	53
5.1	ANÁLISE DE AMOSTRAS DE REFERÊNCIA	53
5.2	COMPARAÇÃO COM O APLICATIVO INTERWINNER	56
5.3	ANÁLISE DE ESPECTROS DE TESTE	60
6	DISCUSSÃO E CONCLUSÕES	63
6.1	VALIDAÇÃO	63
6.2	CONTRIBUIÇÃO À ANÁLISE POR ESPECTROMETRIA GAMA.....	65
6.3	PROPOSTAS PARA TRABALHOS FUTUROS.....	65
	APÊNDICE A – REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	68
	APÊNDICE B – LISTA DE ARQUIVOS	70
	APÊNDICE C – LISTA DE CLASSES	72
	APÊNDICE D – DIAGRAMAS E MEMBROS DA CLASSE COUNTSPLOTTERWIDGET	73
	APÊNDICE E – DIAGRAMAS E MEMBROS DA CLASSE SPECTRUMFORM	76
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	84

LISTA DE TABELAS

Tabela 5.1. Valores de referência das concentrações de atividade das amostras e valores obtidos com o aplicativo OpenGamma.....	54
Tabela 5.2. Resultados da comparação dos softwares OpenGamma e InterWinner.....	58
Tabela 5.3. Espectros de teste utilizados na validação de software (IAEA, 1998a).	60
Tabela 5.4. Correspondência entre canais e energias gama nos espectros de teste utilizados na validação de software (IAEA, 1998a).	61

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 Espectro gama onde são identificados um fotopico, um patamar Compton e a linha base.	10
Figura 3.1 Espectro gama com alguns dos fotopicos associados aos radionuclídeos correspondentes.	17
Figura 4.1. Interface principal do aplicativo OpenGamma com 2 espectros abertos.	25
Figura 4.2. Aba de contagens de uma janela de espectro.	25
Figura 4.3. Aba de dados de amostra e de aquisição de uma janela de espectro.	26
Figura 4.4. Fluxograma geral de busca e análise de fotopicos	34
Figura 4.5. Tela do aplicativo OpenGamma com o gráfico do espectro e da respectiva segunda diferença. Observa-se a virtual eliminação da linha-base, ao mesmo tempo em que se mantém a informação da localização dos picos.	37
Figura 4.6. Gráficos das funções de ajuste de curvas às contagens de uma região do espectro com 3 picos gama. (a) Funções $g(x)$ (total) e $B(x)$ (linha-base). (b) Função $F(x)$ (fotopicos gama líquidos).	41
Figura 4.7. Gráfico da segunda derivada de uma gaussiana genérica.	42
Figura 4.8. Aba para ajuste da função largura do pico (FWHM) vs. energia.	43
Figura 4.9. Tela para entrada dos dados de eficiência e ajuste da função. O gráfico apresenta os valores de eficiência em função da energia da radiação gama (keV) e a função ajustada.	48
Figura 4.10. Telas de dados das transições gama da biblioteca padrão.	49
Figura 4.11. Tela para entrada das bibliotecas de análise.	50
Figura 4.12. Tela do OpenGamma com o relatório de picos.	51
Figura 4.13. Tela do OpenGamma com as atividades dos radionuclídeos	52
Figura 5.1. Espectro analisado da amostra GH (gamma-high) da intercomparação do NPL em 2008.	55
Figura 5.2. Espectro analisado da amostra de espinafre da intercomparação da AIEA em 2007.	55
Figura 5.3. Espectro analisado da amostra de solo da intercomparação da AIEA em 2007.	56

Figura 5.4. Valores de z para as áreas líquidas, na análise dos espectros dos grupos A e B analisados pelo OpenGamma, em comparação com o InterWinner.	59
Figura 5.5. Valores de z para as áreas líquidas, na análise dos espectros dos grupos C e D analisados pelo OpenGamma, em comparação com o InterWinner.	59
Figura 5.6. Valores de z para as áreas líquidas, na análise do espectro de teste ADD1N1.ASC.....	61
Figura 5.7. Valores de z para as áreas líquidas, na análise do espectro de teste ADD3N1.ASC.....	62
Figura 5.8. Valores de z para as áreas líquidas, na análise do espectro de teste ADD1N3.ASC.....	62

1 INTRODUÇÃO

1.1 Considerações gerais

A espectrometria gama com o uso de detectores semicondutores de alta resolução é, atualmente, a técnica mais empregada para determinação qualitativa e quantitativa de radionuclídeos emissores gama (Gilmore & Hemingway, 1995; Knoll, 2000). Entre suas vantagens, destacam-se a sensibilidade da técnica, a possibilidade de se analisar amostras geralmente com mínima necessidade de pré-tratamento físico-químico das mesmas, a utilização de diversas configurações geométricas e a determinação de vários radionuclídeos numa única medida. É também uma análise não-destrutiva, no sentido em que a amostra não sofre alteração em sua integridade, durante a medida.

Por tais razões, vem sendo utilizada para a análise de uma ampla variedade de tipos de amostras, tais como: amostras ambientais, no escopo de programas de monitoração radiológica ambiental; amostras decorrentes da operação rotineira de instalações radiativas e nucleares; amostras de alimentos e matérias-primas para atendimento a exigências legais e como ferramenta de pesquisa para outras áreas, notadamente a física nuclear, a geologia e estudos ambientais em geral.

A utilização desta técnica envolve duas etapas distintas: a aquisição dos espectros gama na medição das amostras e, posteriormente, a análise propriamente dita destes espectros (Knoll, 2000). No entanto, esta análise tem sido realizada com o concurso de programas computacionais proprietários de alto custo (Aarnio et al, 2001; ORTEC, 2004; Canberra Inc, 2005). Na situação mais comum, tais programas podem ser empregados somente com determinadas linhas de equipamentos e formatos de arquivos. Além disso, são adotadas

restrições, tais como o uso de chaves de hardware, que limitam a utilização destes programas a apenas uma estação de trabalho.

Por outro lado, nos países em desenvolvimento, e em particular, no Brasil, o desenvolvimento de código aberto encontrou um campo ideal para sua aplicação. Tal fato é decorrente principalmente do potencial humano disponível na área de informática e da restrição cada vez maior a soluções de alto custo (Dibbell, 2004). Aqui, a utilização de código aberto tem ocorrido no meio acadêmico, já há bastante tempo, e de forma crescente na iniciativa privada (Ashurst, 2005). Especificamente na área de aplicações da tecnologia nuclear, foi recentemente desenvolvido no IPEN (De Lúcia, 2008) um aplicativo de código aberto, SAANI, para uso em análise instrumental por ativação com nêutrons.

Paralelamente, o uso e desenvolvimento de código aberto têm sido crescentemente incentivados por parte dos organismos governamentais, com o duplo objetivo de diminuição de custos e de regularização da base instalada de programas, com a adoção de medidas de coibição do uso ilegal de programas computacionais (SLTI, 2004).

Em tal contexto, neste trabalho foi desenvolvido o aplicativo computacional OpenGamma, um código aberto de análise qualiquantitativa para determinação de radionuclídeos por espectrometria gama com detectores semicondutores.

O aplicativo tem como características fundamentais o uso de ferramentas de desenvolvimento de código aberto (“open source”) e aplicabilidade em uma ampla variedade de ambientes de utilização, particularmente em pesquisa e como ferramenta na prestação de serviços de análise.

Existem na literatura várias referências a códigos para análise de espectros gama (Ruellan et al, 1995; IAEA, 1998b; Brutscher et al, 2001; Sima et al, 2001; Gulam Razul et al, 2003); no entanto, não se encontraram disponíveis ferramentas com a finalidade específica aqui proposta que estejam sendo

desenvolvidas nos termos preconizados pela comunidade de desenvolvimento de código livre.

1.2 Objetivos

Do exposto, este trabalho de doutoramento é uma contribuição à técnica de análise por espectrometria gama, por meio do desenvolvimento de um aplicativo computacional completo. O trabalho atende aos seguintes objetivos básicos:

- Codificação de um aplicativo para espectrometria gama tendo como recursos e características fundamentais:
 - busca e localização de picos em espectros gama
 - análise de espectros com determinação da área líquida dos picos gama, identificação dos radionuclídeos e determinação da atividade
 - uso de algoritmos abertos na análise
 - capacidade gráfica
 - pronta disponibilidade e aplicabilidade para a comunidade e para o usuário final.

- Validação do aplicativo, por meio de:
 - análise de espectros de teste especialmente gerados para a validação de códigos de análise
 - determinação da atividade em espectros de referência.
 - comparação com ferramentas de análise existentes similares.

Como objetivo complementar, foram desenvolvidos recursos técnicos do aplicativo, incluindo

- Interface gráfica para a entrada de todas as informações referentes à amostra, parâmetros de calibração, parâmetros de análise e opções definíveis pelo usuário
- Compatibilidade com formatos comuns de arquivos gerados por outros softwares de espectrometria gama
- Apresentação dos resultados em forma gráfica e tabular.

Finalmente, cabe ressaltar o aspecto original deste trabalho, que é a disponibilização de um código para análise de espectros gama segundo os princípios do software livre, ou seja:

- Disponibilização do código em repositórios de livre acesso à comunidade
- licença para o usuário e desenvolvedor utilizar, modificar e adaptar o código, de forma livre, para seus próprios fins e necessidades.

2 ESPECTROMETRIA GAMA COM DETECTORES SEMICONDUTORES

2.1 Princípios

A espectrometria gama de alta resolução (Knoll, 2000) é uma metodologia que se baseia na coleta e medida de cargas elétricas produzidas pela interação da radiação gama incidente sobre um cristal semiconductor de germânio de alta pureza, conhecido como HPGe (“High Purity Germanium”).

Existe uma relação bem definida entre a energia cedida pelo fóton gama incidente e a carga liberada no cristal. O cristal é mantido sob baixa temperatura e alta tensão elétrica, o que permite a coleta da carga por meio de equipamentos eletrônicos apropriados. A carga coletada resulta em pulsos que, após amplificação, são classificados em canais de acordo com sua amplitude e gerando, após um tempo suficiente de medida, um espectro de altura de pulsos (Bärg Filho, 2000).

Uma vez que cada radionuclídeo emissor gama possui um espectro característico de energias de emissão, torna-se possível a identificação do(s) radionuclídeo(s) presente(s) numa amostra a partir da análise do espectro gerado.

2.1.1 Interação da radiação gama com a matéria

São conhecidos diversos mecanismos de interação da radiação gama na matéria, dos quais três tipos principais desempenham papel importante na detecção deste tipo de radiação: a absorção fotoelétrica, o espalhamento Compton e a produção de pares (Brandl, 2000; Knoll, 2000). Em todos esses processos, há a transferência, total ou parcial, de energia dos fótons gama para elétrons.

Na absorção fotoelétrica, a energia do fóton gama é totalmente absorvida por um elétron, necessariamente ligado a um átomo, já que, devido à conservação de momento, um elétron livre não pode absorver totalmente um fóton. O elétron anteriormente ligado é então ejetado, desligando-se do átomo e tornando-se um elétron livre, o fotoelétron. A energia do fotoelétron será

$$E = h\nu - E_b \quad (2.1)$$

onde E_b é a energia de ligação do elétron no seu nível de energia original no átomo, no caso mais comum na camada K. A vacância no átomo causa uma imediata absorção de um elétron livre do meio e/ou um rearranjo dos elétrons nos níveis atômicos. Conseqüentemente, pode ocorrer a emissão de raios-X característicos, para núcleos atômicos pesados, ou emissão de elétrons Auger, no caso de núcleos leves. Os raios-X característicos comumente são dos tipos K- α e K- β .

A interação por efeito fotoelétrico predomina para raios-X e para energias gama até cerca de 0,5 MeV, para materiais com alto número atômico. Particularmente para o germânio, predomina até aproximadamente 0,2 MeV.

No espalhamento Compton, o fóton incidente transfere parte de sua energia a um elétron do meio, resultando num elétron de recuo e um fóton de menor energia que o original, que é desviado com um ângulo θ de espalhamento. A energia do fóton espalhado é dada por

$$h\nu' = \frac{h\nu}{1 + \frac{h\nu}{m_0c^2}(1 - \cos\theta)} \quad (2.2)$$

Esse processo é o predominante para energias gama intermediárias, embora os limites da faixa de predominância variem com o número atômico (Z) do

elemento. Especificamente para o germânio ($Z=32$), o efeito Compton predomina na faixa aproximada de 0,2 a 8 MeV.

Para fótons com energia superior a 1,022 MeV, ou seja, o dobro da energia de repouso do elétron, pode ocorrer um terceiro processo de interação: a produção de pares. O fóton gama converte-se num par elétron-pósitron, onde o excesso de energia aparece na forma de energia cinética compartilhada entre as duas partículas resultantes. O pósitron, após sofrer desaceleração no meio, é prontamente aniquilado dando origem a dois fótons de 511 keV emitidos em sentidos opostos.

Em consequência dos processos descritos, a energia total ou parcial dos fótons gama é depositada na matéria. Quando essa transferência ocorre integralmente no volume do cristal detector, a acumulação de contagens decorrentes de determinada transição gama forma, no espectro gama, o pico de absorção total. Para os objetivos do presente trabalho, é fundamental a determinação dos parâmetros matemáticos que caracterizam cada um desses picos.

2.1.2 Decaimento radioativo e radionuclídeos

Grande parte das espécies atômicas existentes sofre desintegração nuclear espontânea, com a emissão de uma ou mais partículas sub-atômicas e/ou radiação eletromagnética. Estas espécies, denominadas radionuclídeos, ocorrem largamente na natureza; são também produzidas artificialmente, como subproduto da utilização de combustível nuclear ou por meio de aceleradores de partículas.

Existem vários tipos de decaimento radioativo. No presente trabalho, são abordados aqueles que resultam na emissão de radiação gama, radiação eletromagnética emitida pelo núcleo atômico num estado excitado de energia metaestável ou imediatamente após a desintegração do núcleo com a emissão de uma partícula subatômica.

Os radionuclídeos, tanto naturais como artificiais, têm vasta aplicação técnica nas ciências exatas, ambientais, na engenharia e medicina. Em todas estas áreas, existe a necessidade de se determinar a atividade de radionuclídeos em amostras dos mais diversos tipos e para os mais diversos fins. Consequentemente, é vasta a aplicabilidade da espectrometria gama de alta resolução, como técnica adequada para análise quantitativa de radioatividade.

A espectrometria gama é também utilizada na área de pesquisa básica; um exemplo é a identificação de fótons gama produzidos em experimentos de física nuclear, tais como reações (n, γ) em estudos de estrutura nuclear.

2.2 Características de espectros gama

Os fótons gama emitidos pelos núcleos que se desintegram são chamados fótons primários. Estes sofrem uma variedade de processos de interação com a matéria circundante podendo ser totalmente absorvidos ou gerar fótons espalhados e radiação de aniquilação. Quando toda a energia de um fóton primário é depositada no volume ativo de um detector, em uma ou mais interações, o pulso formado contribui para a formação do fotopico, ou pico de absorção total (Evans, 1958; Knoll, 2000).

Na prática, haverá eventos em que apenas parte da energia inicial é depositada no volume ativo, uma vez que fótons espalhados podem escapar sem interagir no detector. Os pulsos assim gerados, no caso geral, contribuirão na formação da linha-base, ou *continuum* Compton, do espectro. No entanto, podem também contribuir na formação de outras características do espectro.

Picos de escape podem surgir quando a fonte medida emite fótons primários com energia superior a 1022 keV. Estes podem interagir no detector produzindo pares elétron-pósitron; o pósitron tem alta probabilidade de sofrer aniquilação no interior do detector, gerando dois fótons de 511 keV em oposição.

Um deles, ou ambos, podem escapar do detector sem interagir. Neste caso, aparecem picos em valores de energia que são 511 keV (quando um dos fótons de aniquilação escapa) e 1022 keV (quando ambos escapam) inferiores à energia do fóton primário (Knoll, 2000).

Quando a aniquilação ocorre no meio circundante ao detector, a energia de um dos fótons assim produzidos pode ser integralmente depositada no detector, contribuindo para a formação de um pico na energia de 511 keV, presente praticamente em qualquer espectro gama.

O pico de retroespalhamento é originado a partir de fótons emitidos pela fonte que, após terem sofrido interação Compton no meio circundante ao detector, resultam em fótons espalhados na direção do detector.

A dependência da energia dos fótons espalhados com o ângulo de espalhamento é tal que qualquer ângulo superior a cerca de $110^\circ - 120^\circ$ até o valor máximo de 180° resulta em fótons gama espalhados com energia próxima a um valor mínimo (Knoll, 2000). Assim, a energia do pico de retroespalhamento será dada por

$$h\nu'_{\theta=\pi} = \frac{h\nu}{1 + \frac{2h\nu}{m_0c^2}} \quad (2.3)$$

A Figura 2.1 mostra um espectro em que podem ser identificadas algumas das características citadas.

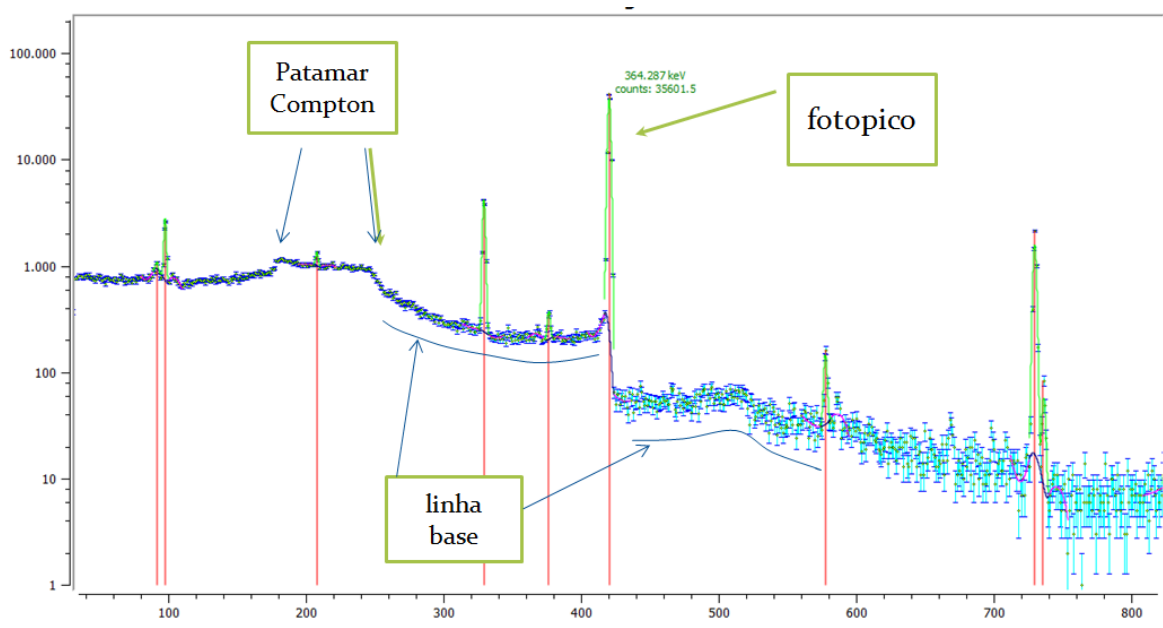


Figura 2.1 Espectro gama onde são identificados um fotopico, um patamar Compton e a linha base.

3 MÉTODOS

3.1 Análise de espectros gama

Na análise de espectros gama e, em particular, em análise quantitativa, interessa fundamentalmente a determinação da área líquida de cada um dos picos de absorção total (fotopicos), uma vez que esta área está diretamente relacionada à atividade gama dos radionuclídeos presentes na amostra. Cada pico pode ser ajustado por uma função gaussiana, o que é feito quase sempre com o uso do algoritmo de Levenberg-Marquardt (Gill et al, 1981) ou uma de suas variantes (Vanden Berghen, 2004). É um procedimento iterativo para o ajuste de funções não lineares nos parâmetros a um conjunto de dados experimentais. Por sua robustez e rapidez na convergência, tem sido o método mais utilizado nesta aplicação específica.

A determinação da relação entre a eficiência do sistema de detecção e a energia da radiação gama é também essencial. Para tanto, são empregadas fontes de radiação com valores de referência de atividade. Periodicamente, são feitas medidas e, a partir destas, constroem-se curvas de calibração (Lépy et al, 2001; Castro, 2003). Em situações onde há significativa probabilidade de detecção de gamas em coincidência são necessárias correções adicionais (Piton et al, 2000).

Dependendo dos radionuclídeos presentes, é comum a situação em que vários picos de origens distintas apresentam-se total ou parcialmente superpostos. Nesse caso, deve-se definir algum procedimento numérico para se fazer a separação (deconvolução) dos picos, de forma a se atribuir corretamente as contagens a cada um dos componentes. O algoritmo citado anteriormente pode utilizar, no ajuste dos dados, a soma de várias gaussianas com parâmetros diferentes para cada componente.

Além dos fotopicos, o espectro gama apresenta picos originados por outros processos de interação (Knoll, 2000). O programa de análise pode usar as características dos picos para classificá-los, identificando se dado pico é um fotopico ou se é originado por outro processo.

Para a obtenção da área líquida do pico, é necessário um procedimento adequado para se descontar a linha base. Em geral, inicialmente definem-se no espectro, antes e após cada pico ou multipletto, regiões consideradas como representativas da linha de base do espectro. Entre ambas, define-se a chamada região de interesse (ROI), onde encontra(m)-se o(s) pico(s). No entanto, ainda não há consenso sobre a forma mais adequada de se atribuir a linha base na própria região de interesse. Uma abordagem é utilizar os limites inferior e superior da ROI e se fazer uma interpolação polinomial para estimar as contagens correspondentes à radiação de fundo. Outra abordagem é utilizar um procedimento iterativo gerando uma sequência de funções-degrau cujas alturas são proporcionais às alturas das componentes do multipletto, ao longo do mesmo (Luca & Morel, 2004).

A razão para tal dificuldade na estimativa da linha base é a existência de várias características num espectro gama, difíceis de eliminar ou minimizar por serem inerentes ao próprio processo de interação da radiação gama com a matéria, ou ainda à própria tecnologia utilizada na medida. Dentre estas, além dos picos de retroespalhamento e de escape simples e duplo, existem ainda os patamares e degraus Compton, picos soma e pico de aniquilação elétron-pósitron (Knoll, 2000; García-Talavera et al, 2002). Acresce que a intensidade de cada um de tais efeitos é fortemente dependente não só dos parâmetros do equipamento utilizado na medida, mas também da atividade e variedade dos núclídeos presentes em dada amostra.

Do exposto, conclui-se que qualquer código para análise quantitativa de atividade gama, e ainda mais quando se busca a identificação automatizada de radionuclídeos, deve implementar ferramentas para a correta identificação e tratamento das características de um espectro.

Um mesmo radionuclídeo pode apresentar vários modos de decaimento, com diferentes probabilidades, originando assim fótons gama em cascata. A análise de tais espectros lança mão de bibliotecas digitalizadas, que tipicamente contêm, para cada radionuclídeo, seu tempo de meia-vida e a relação das transições gama presentes, com as respectivas probabilidades de emissão por desintegração, I_γ (Firestone et al, 1996; Brutscher et al, 2001). Uma vez que as bibliotecas primárias normalmente disponíveis contêm milhares de transições gama listadas, para fins de análise utilizam-se subconjuntos das mesmas contendo os nuclídeos ou transições relevantes para uma análise particular.

Como em geral é o próprio espectroscopista que irá definir tais bibliotecas derivadas, de acordo com as especificidades da análise a ser feita, é essencial que o programa computacional forneça de forma integrada ferramentas para a criação e modificação destas bibliotecas.

3.1.1 Identificação dos componentes de um espectro

A complexidade e variedade de características que se apresentam num espectro gama demanda usuários qualificados no processo de análise.

Contudo, antes mesmo de se proceder à análise de dado espectro, o primeiro passo deve ser sempre a visualização do espectro propriamente dito, ou seja, as contagens em função dos canais. Deformações óbvias no conjunto dos picos podem ser evidenciadas por essa simples inspeção, indicando que o espectro não deve ser utilizado para a análise.

A título de exemplos: se um espectro apresenta uma deformação de um ou de todos os fopicos, há várias origens possíveis, que podem indicar uma amostra muito ativa, inadequada para a medida direta; pode haver algum problema no equipamento eletrônico associado ou mesmo no cristal detector semicondutor.

Uma amostra altamente ativa pode produzir saturação no detector, produzindo “caudas” (deformações laterais ao fotopico). Por outro lado, um alargamento ou outra deformação geral nos fotopicos pode indicar um deslocamento no ganho de amplificação do sinal ocorrido durante a medida. Quando há ruído eletrônico de baixa intensidade que não seja eliminado pela eletrônica associada ao sistema, pode formar-se uma rampa descendente a partir do início do espectro (Gehrke e Davidson, 2005).

Há ainda características que aparecem em circunstâncias especiais relacionadas ao conteúdo de radioatividade gama da amostra; por exemplo, picos de escape simples ou duplo, quando há contagem significativa de fótons com energia superior a 1022 keV.

A detecção de dois ou mais fótons em coincidência pode aparecer no espectro na forma de picos adicionais. A situação mais comum envolve radionuclídeos que emitem múltiplos fótons gama em cascata, ou seja, a emissão de um fóton com energia $E_{\gamma 1}$ com a formação de um estado intermediário que emite por sua vez um fóton com energia $E_{\gamma 2}$. Quando o estado intermediário possui meia-vida que seja da ordem ou menor que a resolução temporal do sistema de detecção, a energia de ambos os fótons é depositada e coletada formando um único pulso. Se a taxa de ocorrência dessas coincidências for suficiente, há a formação de um pico em energia correspondente à soma das energias dos fótons coletados em coincidência.

No processo descrito, os fótons pertencem a cadeias do mesmo evento de decaimento, e portanto são detectados em coincidência verdadeira. Mas podem ocorrer também coincidências aleatórias, onde fótons de diferentes eventos de decaimento são detectados acidentalmente dentro do tempo de resolução do sistema, processo denominado empilhamento de pulsos. Para altas taxas de contagem, esse efeito pode ser significativo, mesmo para amplificadores de sinal com opção de rejeição de empilhamento.

Os processos de soma, além de produzir picos adicionais no espectro, têm como efeito a remoção de eventos individuais que de outra forma contribuiriam para os fotopicos, causando uma diminuição na eficiência efetiva de detecção para as energias em questão.

Do exposto, conclui-se que são necessários anos de experiência para que um analista possa interpretar corretamente um espectro. No entanto, na situação em que esse analista especializado se depare com um espectro, ele pode, até mesmo visualmente, identificar de imediato a origem de vários tipos de características que aparecem num espectro gama.

Uma vez que dado espectro passe por essa avaliação preliminar, ele pode então ser submetido a um aplicativo para análise automatizada de espectros. Nessa etapa, é desejável que o aplicativo ofereça recursos para que se possa avaliar a qualidade do ajustes efetuados e, por conseguinte, a qualidade do espectro.

3.1.2 Identificação de radionuclídeos

A identificação de radionuclídeos ou, mais precisamente, a associação unívoca de cada fotopico de um espectro gama a dada transição gama de um radionuclídeo, não é um procedimento trivial, por razões descritas a seguir.

Inicialmente, deve-se lembrar que há milhares de transições gama conhecidas na faixa de energia de interesse da espectrometria gama, de modo que um dado fotopico às vezes pode ser, em princípio, atribuído a várias transições. Assim, deve-se lançar mão de vários critérios para se associar corretamente o pico à determinada transição gama.

Um critério básico e excludente é verificar se o mesmo radionuclídeo apresenta outras transições gama com energia e probabilidade de emissão tais que necessariamente deveriam estar presentes no espectro.

Uma situação semelhante é aquela em que há radionuclídeos na amostra que decaem com meia-vida curta o suficiente para que se possa afirmar com certeza que o radionuclídeo descendente também está contido na amostra e deverá portanto apresentar seus fotopicos no espectro.

Existe atualmente a abordagem do uso de redes neurais conceitualmente bastante diferente. Nessa abordagem, procura-se simular computacionalmente uma rede de neurônios, que são elementos discretos com funções de ativação e de resposta características (Kovács, 1996). Tais redes devem ser condicionadas por um processo de “treinamento” para reconhecer padrões em conjuntos de dados. Seu uso tem potencial para aplicação na análise de espectros gama (Yoshida et al, 2002), especialmente na identificação de radionuclídeos com múltiplas emissões gamas. Essa aplicação é, no entanto, ainda incipiente.

Assim, no presente projeto é usada a abordagem tradicional e bem estabelecida para a identificação dos picos. Após a pesquisa no espectro, estes são comparados com os parâmetros das transições gama na biblioteca especificada pelo usuário. Os valores de energia dessas transições serão utilizados para identificar, além dos fotopicos, características adicionais que possam ocorrer no espectro, segundo os critérios já descritos.

A Figura 3.1 apresenta um espectro submetido à análise qualitativa, onde podem ser observados os fotopicos associados aos radionuclídeos presentes na amostra.

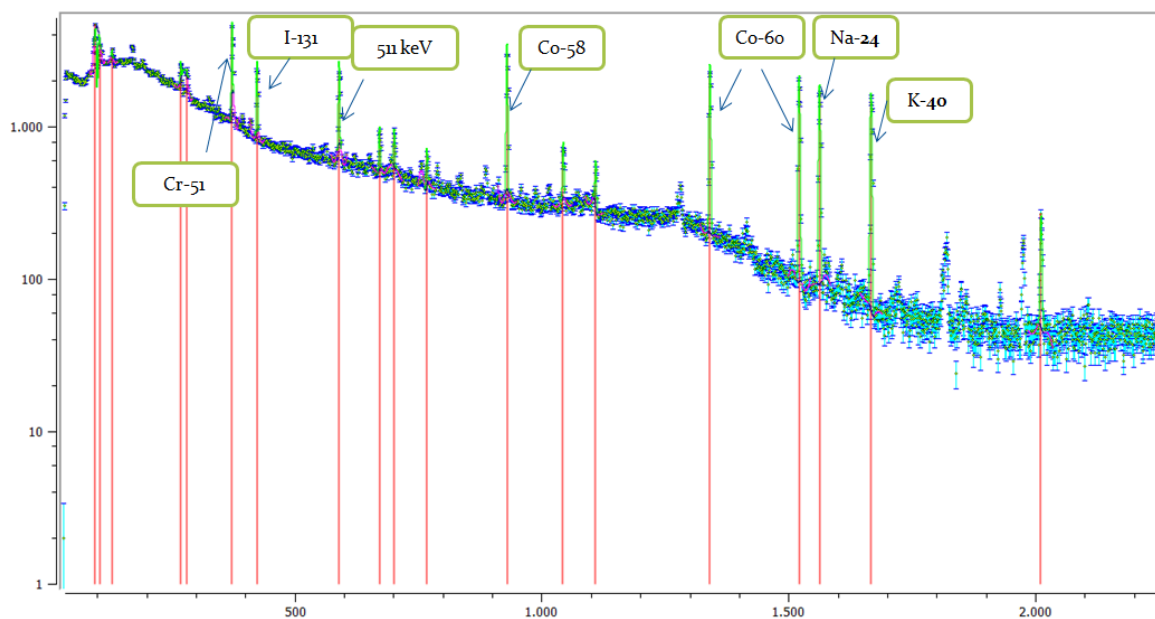


Figura 3.1 Espectro gama com alguns dos fotopicos associados aos radionuclídeos correspondentes.

3.1.3 Análise quantitativa

Após a identificação de características de interesse do espectro, o próximo passo é a determinação, para cada fotopico, dos parâmetros da função matemática de ajuste. Os parâmetros permitem determinar a área líquida sob o pico de absorção total, que é, por sua vez, diretamente relacionada à atividade do radionuclídeo por meio da eficiência de detecção do sistema para a energia em questão.

São também necessárias bibliotecas com dados relativos à meia-vida e energias das transições gama, bem como as probabilidades de emissão correspondentes, para os radionuclídeos de interesse. Tais informações são disponíveis em bancos de dados nucleares.

A eficiência de detecção do sistema é dependente da energia da radiação gama. É, portanto, necessário construir a curva de calibração de

eficiência em função da energia para cada um dos sistemas de detecção e para cada geometria padronizada de contagem.

Mesmo detectores do mesmo modelo, com as mesmas especificações técnicas e eficiência absoluta nominal, apresentarão diferenças individualmente, decorrentes da idade e da história de utilização, daí a necessidade de se construir curvas para cada sistema em particular.

A determinação das curvas de eficiência é feita por meio de medidas de padrões radioativos com atividade conhecida. São determinados experimentalmente os valores de eficiência para energias E_γ selecionadas dentre as emitidas pelos radionuclídeos dos padrões. É feito então um ajuste relacionando os valores (Dias et al, 2004). Uma expressão comumente utilizada para o ajuste tem a forma

$$\ln \varepsilon(E_\gamma) = \sum_{i=0}^n a_i \ln(E_\gamma)^i \quad (3.1)$$

onde os parâmetros a_i são obtidos por regressão linear.

Devido ao decaimento radioativo, a atividade de qualquer radionuclídeo numa amostra diminui com o tempo, sendo necessário corrigi-la para um determinado instante de referência, levando em conta o tempo real de medida da amostra e o intervalo entre o instante de referência e o início da medida.

De posse destes dados, pode-se determinar – numa amostra que foi medida no mesmo sistema de contagem, numa geometria padronizada – a concentração da atividade do radionuclídeo emissor de dada transição γ por meio da expressão

$$A = \frac{C}{\varepsilon_\gamma \cdot I_\gamma \cdot t_u \cdot m} \cdot f_e \cdot f_m \quad (3.2)$$

onde

A é a concentração de atividade da amostra, no instante de referência, do radionuclídeo na transição γ considerada (Bq por unidade de massa ou volume)

C é a área líquida do pico de absorção total

ε_γ é a eficiência de detecção para a energia E_γ obtida pelo ajuste $\varepsilon(E_\gamma)$

I_γ é a probabilidade de emissão do fóton de energia E_γ por desintegração

t_u é o intervalo de tempo útil (*live time*) de medida (s)

m é a massa ou volume da amostra

f_e é o fator de correção para o decaimento durante o tempo de espera, dado por

$$f_e = \exp(\lambda \cdot t_e) \quad (3.3)$$

f_m é o fator de correção para o decaimento durante a medida, dado por

$$f_m = \frac{\lambda \cdot t_r}{1 - \exp(-\lambda \cdot t_r)} \quad (3.4)$$

λ é a constante de desintegração do radionuclídeo (s^{-1})

t_e é o tempo de espera entre o instante de referência e o início da medida (s)

t_r é o intervalo de tempo real (*real time*) de medida (s)

Para radionuclídeos com mais de uma transição gama detectável, é conveniente considerar várias transições na obtenção da atividade do radionuclídeo na amostra, procedimento que reduz a incerteza no resultado final.

A média ponderada \bar{A} da atividade do radionuclídeo é calculada a partir das atividades A_i das transições consideradas e das incertezas σ_i correspondentes obtidas por propagação, por meio da expressão

$$\bar{A} = \sum_i \frac{A_i}{\sigma_i^2} \cdot \left(\sum_i \frac{1}{\sigma_i^2} \right)^{-1} \quad (3.5)$$

com a incerteza da média

$$\sigma_{\bar{A}} = \left(\sum_i \frac{1}{\sigma_i^2} \right)^{-1/2} \quad (3.6)$$

É importante ressaltar que a atividade assim obtida pressupõe que os fotopicos analisados originam-se somente de radionuclídeos presentes na amostra. Cabe ao operador avaliar a validade dessa suposição, já que pode haver contribuições externas à amostra, como no caso da radiação de fundo.

Além disso, deve-se verificar se a contribuição para cada pico provém unicamente de fótons correspondentes ao radionuclídeo considerado. Quando há interferência de fótons gama de energia muito próxima, mas correspondentes a outros radionuclídeos que não o considerado, a atividade obtida segundo a expressão 3.2 não pode ser utilizada diretamente no cálculo da média das atividades pela expressão 3.5.

3.2 Projeto e desenvolvimento de códigos computacionais

No que diz respeito à distribuição ou, eventualmente, à comercialização de programas computacionais, existem essencialmente duas estratégias adotadas. Na produção de software proprietário, em geral, o usuário não tem o direito de modificar ou redistribuir além da margem permitida pelo próprio aplicativo, por meio da interface disponibilizada. No software aberto, o código é disponibilizado, sem prejuízo da propriedade intelectual do autor.

O questionamento mais frequente feito à comunidade que desenvolve software livre é a suposta ausência de um modelo de negócios que viabilize a continuidade na evolução do produto. Ocorre que quem desenvolve, ou mesmo terceiros, podem a seu critério comercializar suporte ao software livre. Nesse sentido, o código aberto não é necessariamente gratuito. No entanto, o custo tende a ser menor do que o que se teria com o uso de uma ferramenta proprietária equivalente.

Na situação específica de programas gerados pela comunidade científica, existem pelo menos dois fatores a considerar. De início, o público potencial para a utilização de determinada ferramenta tende a ser muito mais restrito, pela especificidade de utilização que em geral caracteriza o software científico. Além disso, esse mesmo público alvo frequentemente tem o conhecimento e a capacidade de fazer alterações, adaptações e mesmo acréscimos ao mesmo, para adequá-lo às suas próprias necessidades.

Isso significa que um fator fundamental para a aceitação de um software é a licença de uso sob a qual o mesmo é distribuído. Nesse sentido, o software livre, pela sua própria definição, mostra-se mais adequado, já que o código-fonte é livremente disponibilizado e portanto suscetível de modificações nos termos inicialmente descritos.

3.3 Intercomparações de medidas analíticas e de códigos computacionais

Uma das abordagens para se avaliar determinado código para espectrometria é verificar seu desempenho na medida de amostras, no sentido de quantificar corretamente as atividades contidas nas mesmas. Neste caso, amostras são enviadas por um organismo credenciado e os participantes determinam as atividades presentes, sendo os resultados posteriormente avaliados contra os valores de referência (Tauhata et al, 2002). Usualmente, são

medidas amostras com características diversificadas em termos de ordem de grandeza das atividades e das matrizes em que são preparadas. Deve-se levar em conta, porém, que nessa situação avalia-se a cadeia de análise como um todo, incluindo a preparação da amostra e os parâmetros de medida, sendo portanto necessário isolar a avaliação do software dos outros fatores do processo.

Outra maneira para avaliar o desempenho de um código computacional é a participação em intercomparações de códigos, quando um organismo credenciado envia um mesmo espectro previamente coletado aos participantes do exercício, onde cada um destes usará um código diferente na análise (Blaauw et al, 1997; IAEA, 1998a; Lépy et al, 2001).

Tais espectros podem conter ou não desvios intencionalmente incorporados, de forma a avaliar o desempenho do programa na correta identificação e quantificação dos nuclídeos presentes, mesmo com espectros problemáticos ou com estatística pobre de medida. A característica evidente de tal tipo de intercomparação é que se avalia exclusivamente o código utilizado.

A Agência Internacional de Energia Atômica realizou um exercício dessa natureza, descrito em seu documento TEC-DOC-1011 (IAEA, 1998a), utilizando espectros sintéticos, obtido pela soma de espectros com picos em canais deslocados entre si.

O Laboratório de Radiometria Ambiental (LRA) tem instalados e licenciados para uso os aplicativos de análise de espectros gama Ganaas (IAEA, 1991), InterWinner (ORTEC, 2004) e GeniePC (Canberra Inc, 2005). Estes aplicativos, entre outros, participaram daquela intercomparação, tendo sido obtidos resultados satisfatórios por todos. Os programas testados reportaram áreas líquidas para os picos compatíveis dentro de uma margem de 1%, independentemente da função empregada para o ajuste de picos (IAEA, 1998a).

Estes aplicativos podem, portanto, ser considerados validados e uma avaliação sistemática do desempenho do código OpenGamma, em comparação com resultados obtidos com os mesmos, fornecerá subsídios para sua validação.

Tal avaliação tem potencial para ser bastante abrangente, dada a expressiva quantidade e variedade de espectros adquiridos historicamente pelo LRA, com amostras de variadas matrizes, incluindo amostras com valores de referência, tanto oriundas de intercomparações analíticas como de padrões certificados.

4 O CÓDIGO OPENGAMMA

4.1 Descrição geral

O projeto OpenGamma foi desenvolvido com interface gráfica multidocumentos e com um conjunto básico de recursos, relacionados a seguir:

- Busca e análise de fotopicos gama, com determinação de linha-base e resolução de picos superpostos (multipletos);
- Curvas de calibração em energia e eficiência;
- Entrada de parâmetros físicos da amostra;
- Gerenciamento de bibliotecas com dados de decaimento de nuclídeos;
- Cálculo da atividade presente nas amostras.

A Figura 4.1 mostra a tela de abertura do OpenGamma, com dois espectros abertos para ilustrar a interface multi-documentos. As Figuras 4.2 e 4.3 mostram diferentes abas de uma dada janela de espectro, por meio das quais se seleciona a visualização desejada.

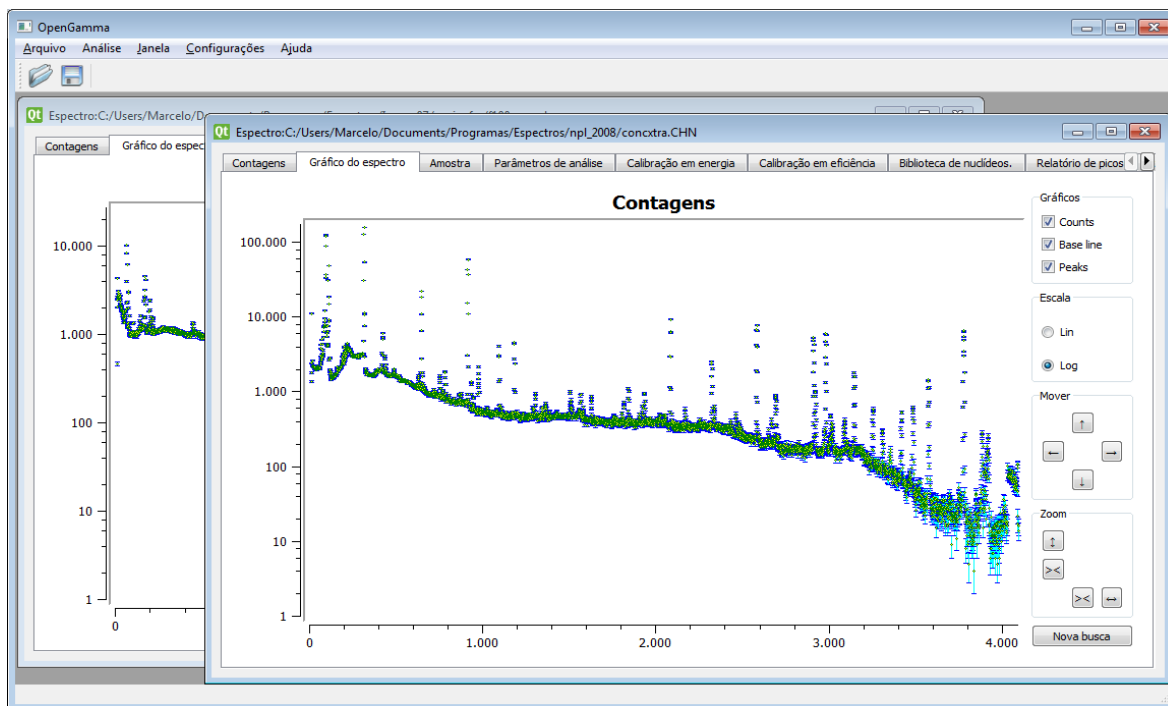


Figura 4.1. Interface principal do aplicativo OpenGamma com 2 espectros abertos.

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	
0 - 9	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
10 - 19	0	70	1500	106	193	221	200	193	188	1
20 - 29	186	201	188	191	148	166	174	181	186	2
30 - 39	153	168	156	159	157	135	169	162	150	1
40 - 49	157	169	142	169	142	166	148	152	145	1
50 - 59	135	147	131	143	128	158	120	160	134	1
60 - 69	156	129	156	153	148	141	151	160	198	1
70 - 79	156	152	171	161	159	165	174	192	174	1
80 - 89	185	244	572	313	313	882	299	163	170	1
90 - 99	173	140	152	203	209	155	153	291	380	1
100 - 109	142	278	190	141	160	234	208	131	117	1
110 - 119	113	122	120	135	131	117	107	120	115	1
120 - 129	134	138	105	117	120	131	110	94	103	1
130 - 139	120	106	106	135	104	119	111	95	115	1
140 - 149	124	111	121	91	107	120	95	124	100	1

Figura 4.2. Aba de contagens de uma janela de espectro.

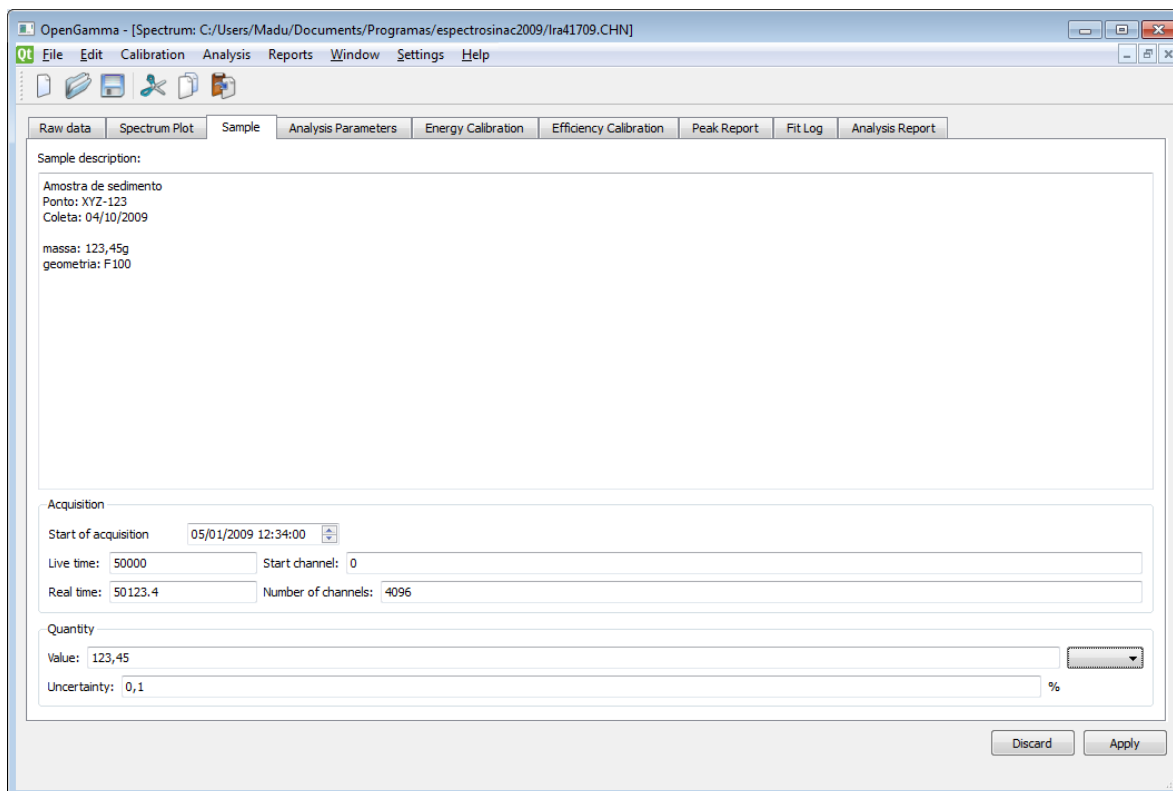


Figura 4.3. Aba de dados de amostra e de aquisição de uma janela de espectro.

4.2 Arquitetura e implementação

4.2.1 Ambiente de desenvolvimento

De acordo com a abordagem predominante na atualidade para o desenvolvimento de aplicativos computacionais, o projeto OpenGamma foi desenvolvido com o uso da programação orientada a objetos (OOP). Nessa abordagem, os elementos fundamentais no desenvolvimento do aplicativo são os objetos, que podem ser definidos resumidamente como elementos que incorporam estruturas de dados e código numa única entidade.

Quando um aplicativo OOP é executado, os diferentes tipos de objetos são criados e destruídos sob demanda, mas sempre de acordo com a estrutura descrita pelas classes definidas no código-fonte. As classes, por sua vez, são

descritas e documentadas com o uso de uma ferramenta padronizada, que é a linguagem de modelagem unificada, conhecida como UML (*Unified Modeling Language*).

O código foi desenvolvido com o uso da linguagem C++ e a interface gráfica com o uso do kit de desenvolvimento Qt 4. Para a construção de gráficos foi utilizado o kit complementar Qwt 5. O aplicativo como um todo está disponibilizado para uso sob licença GPL, “General Public License” (Free Software Foundation, 2007), em conformidade com as respectivas licenças de uso das ferramentas já citadas.

4.2.2 Estruturas de dados

O código OpenGamma implementa um formato próprio (extensão *ogamm*) para a armazenagem de espectros. Neste formato, todos os dados de um espectro, incluindo calibrações em energia, largura, eficiência, parâmetros de análise, bibliotecas de linhas gama e resultados, são gravados em um único arquivo.

Este formato é essencialmente uma serialização das instâncias das classes criadas no momento da abertura de um arquivo e atualizadas dinamicamente no decorrer da análise.

O código, na versão atual de desenvolvimento, faz a importação de arquivos de espectros dos seguintes formatos:

- Formato nativo da ORTEC (extensão *chn*), utilizado no programa de aquisição de dados Maestro;
- Formato definido no documento IEC 1455 (IEC, 1995), com extensão *iec*;
- Espectros codificados em ASCII, extensão *asc*.

A conversão dos dados é feita no momento da carga; o aplicativo OpenGamma faz a leitura dos dados disponíveis em cada formato externo de arquivo.

A gravação dos arquivos é sempre feita no formato *ogamm*, a partir dos dados carregados na memória. O espectro é gravado neste formato nativo independentemente do formato de origem do arquivo, uma vez que a conversão para as estruturas de dados internas do OpenGamma é feita já na importação dos espectros em formatos externos.

4.3 Bibliotecas de código aberto

Na ciência da computação, bibliotecas são coleções de sub-programas utilizados no desenvolvimento de software, mas que são desenvolvidos de forma independente por terceiros.

Na atualidade, o desenvolvimento de código faz amplo uso de bibliotecas, prática que é estimulada por duas razões principais. A primeira é que o desenvolvimento é focado nas funções centrais do código, enquanto que as funções auxiliares são executadas com vantagem pelas bibliotecas, já que as mesmas são especializadas e proveem código já testado. Além disso, essa prática facilita a manutenção e evolução do aplicativo, evitando as dificuldades que existem na manutenção de um código monolítico.

O código OpenGamma, além das bibliotecas nativas do ambiente de desenvolvimento Qt 4, faz uso ainda das bibliotecas *GNU Scientific Library* (GSL) e *Qt Widgets for Technical Applications* (Qwt).

4.3.1 GSL (GNU Scientific Library)

O aplicativo OpenGamma, como ferramenta de análise especializada, executa naturalmente uma quantidade expressiva de cálculos matemáticos no

processo de análise de espectros. Estes incluem ajustes de funções matemáticas a pontos experimentais, avaliação de incertezas e variados procedimentos de ordenação e buscas em estruturas de dados variadas, tais como listas de registros e árvores.

Embora o processo de análise de um espectro seja bastante especializado, as etapas de análise em geral usam algoritmos matemáticos padronizados, existindo portanto muitas soluções abertas para sua execução.

No presente projeto, adotou-se, para a execução dos cálculos matemáticos, a biblioteca GSL (*GNU Scientific Library*). A GSL é bem documentada e é codificada em linguagem C, o que possibilita sua utilização praticamente direta em projetos baseados em C++, com necessidade mínima de adaptação. A GSL é também um projeto bastante ativo, o que se traduz no frequente lançamento de versões atualizadas.

A biblioteca GSL oferece um amplo conjunto de ferramentas de análise. No presente projeto, são utilizadas variadas ferramentas, especialmente aquelas relacionadas a ajuste de funções a dados experimentais.

Os cálculos que envolvem funções matemáticas especiais e algoritmos de ajuste são executados com a biblioteca GSL, que é escrita em C. Para utilizá-la dentro da estrutura do OpenGamma, que é escrito em C++, foi adotada a estratégia de se implementar uma classe contêiner intermediária para encapsular as chamadas à GSL

Esse papel é desempenhado por *GslContainer*, subclasse de *QObject*. No seu cabeçalho são incluídos, via diretiva *#include*, os diversos cabeçalhos das funções utilizadas da biblioteca GSL. As declarações que usam tipos da GSL são todas definidas de forma privada, inclusive os protótipos das funções de ajuste, como membros estáticos. Na seção pública, são declaradas apenas umas poucas funções para a chamada das funções de ajuste e para a recuperação dos resultados gerados por GSL.

4.3.2 Qwt (Qt Widgets for Technical Applications)

A biblioteca Qwt fornece diversos tipos de estruturas de dados para o traçado de gráficos para uso técnico-científico, com ênfase em gráficos bidimensionais. Estes incluem escalas, controles deslizantes, botões giratórios e outras ferramentas para o controle da visualização dos dados.

De forma análoga à adotada para a adaptação da biblioteca GSL ao aplicativo, foi desenvolvida uma classe para implementar os objetos gráficos da biblioteca Qwt. Essa classe, denominada *PlotterWidget*, tem como supertipo a classe *QWidget* da biblioteca Qt.

Além dos tipos preexistentes, foi desenvolvida uma nova classe, *QwtPlotCurveWithUncert*, para incorporar a visualização de barras de erro verticais, necessárias em várias instâncias gráficas do aplicativo.

4.3.3 Portabilidade e plataformas

A linguagem computacional empregada (C++), bem como as bibliotecas gráficas e matemáticas, estão disponíveis para as plataformas mais utilizadas atualmente em aplicações técnico-científicas, entre as quais se situam o Linux e o Windows.

O código principal é distribuído com as bibliotecas externas (Qt, Qwt e GSL) pré-compiladas. Dessa forma, não há necessidade de se instalar as ferramentas completas utilizadas, já que são bibliotecas usadas em tempo de execução (arquivos de extensão *so* no Linux e *dll* no Windows).

O projeto foi desenvolvido paralelamente em Linux (distribuição Ubuntu 8.10) e em Windows (versão Vista Ultimate). Todas as ferramentas

descritas têm o código-fonte disponível. Por conseguinte, o aplicativo *OpenGamma* pode ser recompilado para utilização em outras plataformas, tanto livres como proprietárias, sem prejuízo da licença de distribuição adotada.

4.4 Internacionalização

A internacionalização, ou seja, a disponibilização de um aplicativo com interface em vários idiomas, é especialmente importante por várias razões. O desenvolvimento de software aberto é tipicamente uma atividade colaborativa com o concurso de participante de variadas origens. O idioma inglês é um padrão *de facto* para o desenvolvimento de código, o que é patente ao se analisar um trecho de um programa qualquer, onde os nomes de estruturas, variáveis ou comentários, no corpo do código, são invariavelmente escritos nesse idioma. Essa prática é de fato recomendável, para que os desenvolvedores do software, a despeito de suas diferentes origens, possam compreender a lógica interna do aplicativo.

No entanto, se determinado aplicativo, especialmente de código livre, pretende atingir um público alvo em escala mundial, deve-se procurar disponibilizar a interface em diversos idiomas. Para tanto, atualmente os ambientes de desenvolvimento possuem ferramentas padronizadas para a tradução de interfaces. Em geral, desenvolvedores montam tabelas de tradução, semelhantes a dicionários, para cada idioma desejado. Para os tipos de interface mais comuns, como menus de arquivo, edição, janelas, caixas de ferramentas e outros, esse material é bastante padronizado.

Para o usuário, a opção de idioma da interface pode ser feita no momento da instalação do aplicativo ou, o que é mais adequado, essa opção pode ser invocada e registrada numa janela de diálogo com opções de inicialização.

O aplicativo OpenGamma foi desenvolvido e distribuído com interface em português do Brasil (PT_BR) e em inglês (EN).

4.5 Hospedagem e distribuição do código

O projeto OpenGamma está hospedado no sítio SourceForge.net, sob a página inicial <http://sourceforge.net/projects/opengamma>. O SourceForge.net oferece um ambiente integrado para o desenvolvimento de código aberto, com um amplo conjunto de recursos. Além da característica básica de provedor de armazenamento do código-fonte do aplicativo e servidor de downloads, há também recursos como controle de versões, ambiente de depuração de software, ambiente de testes em variadas plataformas, ferramentas colaborativas como listas de discussão e fóruns e muitos outros.

Além do código-fonte, o arquivo executável para instalação automática na plataforma Windows, construído com o utilitário para empacotamento de software *Nullsoft Scriptable Install System* (NSIS, 2009), é também disponível no sítio citado.

Em conformidade com a Licença Pública Geral de software (Free Software Foundation, 2007), estão disponíveis o código-fonte em C++ e os arquivos Qt, o que permite ao usuário a compilação em outras plataformas, em particular na plataforma Linux, para a qual existem também todas as ferramentas utilizadas no desenvolvimento do código.

4.6 Busca de fopicos

4.6.1 Fluxograma geral

A Figura 4.4 mostra o fluxograma geral de busca e análise de fopicos. É feita uma busca inicial de picos, de caráter qualitativo, onde são

definidos picos candidatos. A partir da mesma, determinam-se a largura experimental e a incerteza associada, para cada pico candidato.

Na etapa de calibração em largura, são selecionados picos que sejam suficientemente isolados para que sua largura experimental não seja afetada por picos vizinhos. Estes picos selecionados são então utilizados para se determinar a função que relaciona largura com o canal centroide.

No espectro são selecionadas as regiões para ajuste, agora com o parâmetro descritor da largura já restrito, obtido pela calibração largura versus centroide. Nessa etapa, é feito um ajuste simultâneo de todos os picos contidos em cada região. São então obtidos os parâmetros de interesse de cada pico, ou seja, a altura e o canal centroide, num único processo de ajuste para cada região. Deste modo, picos com superposição são analisados conjuntamente de modo a permitir sua separação matemática (deconvolução).

No ajuste, existe a possibilidade de que alguns picos pouco intensos não sejam detectados, especialmente se sua ordem de grandeza da altura for muito menor que a de um pico próximo, ou seja, quando há algum pico pequeno que esteja superposto à cauda de um pico maior na mesma região. Para detectá-los, subtraem-se os picos já ajustados na iteração corrente da análise, obtendo-se assim regiões com contagens residuais. Aplica-se novamente o método da segunda diferença às regiões residuais, em busca de novos picos.

No caso de novos picos serem efetivamente detectados, o aplicativo executa a iteração, definindo novas regiões e assim sucessivamente, até que não sejam detectados picos adicionais. Neste ponto, o processo é interrompido e o algoritmo monta a lista consolidada de picos com os respectivos valores ajustados dos parâmetros.

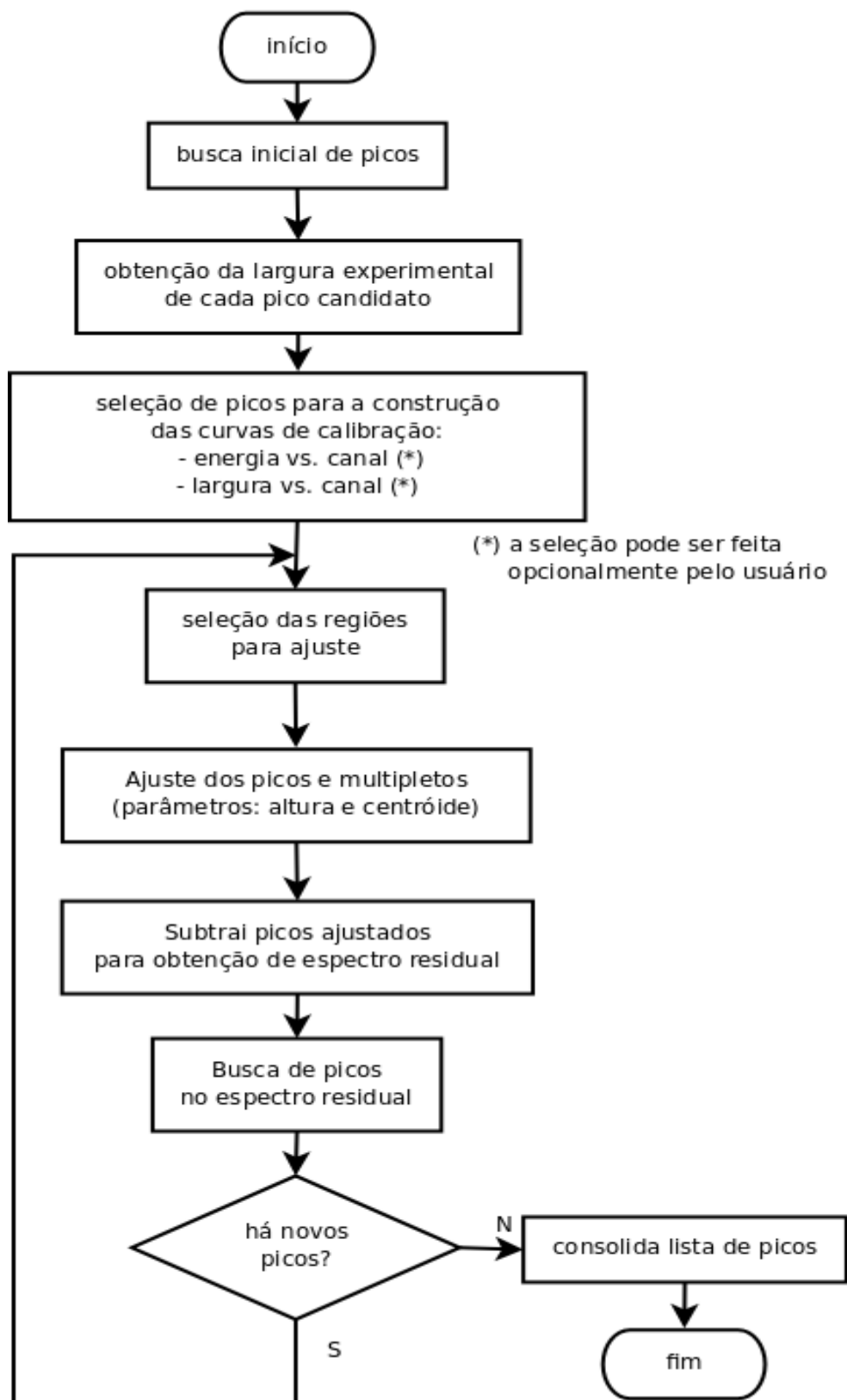


Figura 4.4. Fluxograma geral de busca e análise de fotopicos

4.6.2 Método da segunda diferença

O procedimento mais utilizado para a pesquisa de picos presentes em espectros baseia-se na chamada segunda diferença, que corresponde à segunda derivada de uma função no domínio discreto. O algoritmo foi proposto por Mariscotti (1967) e dada sua simplicidade e eficácia é até hoje utilizado na pesquisa preliminar de picos. Consiste na obtenção de um espectro derivado em que o novo valor atribuído a cada canal é a soma das contagens nos canais laterais subtraída do dobro das contagens no canal central

Matematicamente, sendo $c(i)$ o espectro de contagem em função do parâmetro discreto i correspondente ao canal, o espectro de segunda diferença é definido como

$$d(i) = c(i-1) + c(i+1) - 2 \cdot c(i) \quad (4.1)$$

Os valores $c(i)$ expressam contagens, portanto obedecem à distribuição estatística de Poisson. Assim, a incerteza $\sigma c(i)$ associada à contagem $c(i)$ é

$$\sigma c(i) = \sqrt{c(i)} \quad (4.2)$$

A incerteza associada a $d(i)$ é obtida por propagação, sendo dada por

$$\sigma d(i) = \sqrt{c(i-1) + c(i+1) + 2 \cdot c(i)} \quad (4.3)$$

Para que o canal i contenha um pico, o espectro $d(i)$ deve ser um mínimo local, negativo e com valor absoluto significativamente superior à incerteza estatística local, ou seja,

$$|d(i)| > q \cdot \sigma_i \quad (4.4)$$

onde q é um parâmetro fornecido pelo usuário que define a sensibilidade da pesquisa de picos.

Devido à variabilidade estatística do processo de contagem, podem ocorrer contagens altas em canais isolados, quando comparadas às dos canais vizinhos, o que pode levar à identificação incorreta de picos no espectro. Para minimizar este efeito, recomenda-se fazer algum tipo de suavização do espectro original $c(i)$, especificamente com o uso de um filtro binomial (Marchand & Marmet, 1983; López-Camacho et al, 2006). O cálculo da segunda diferença é então aplicado ao espectro suavizado $s(i)$.

A suavização é feita pela média ponderada das contagens no canal de referência i , em n canais à esquerda e n canais à direita do canal i . Os fatores de ponderação são dados pela sequência composta pelos números binomiais $\binom{j}{2n}$ para $j = 0, 1, \dots, 2n$, cuja soma dos termos é 2^{2n}

Define-se então o espectro suavizado por

$$s(i) = \sum_{j=0}^{2n} \frac{\binom{2n}{j} \cdot c(i+j-n)}{2^{2n}} \quad (4.5)$$

Para ilustração, a Figura 4.5 mostra um espectro bastante populado com picos, juntamente com o gráfico de sua segunda diferença. A segunda diferença praticamente elimina a informação da linha-base do espectro original.

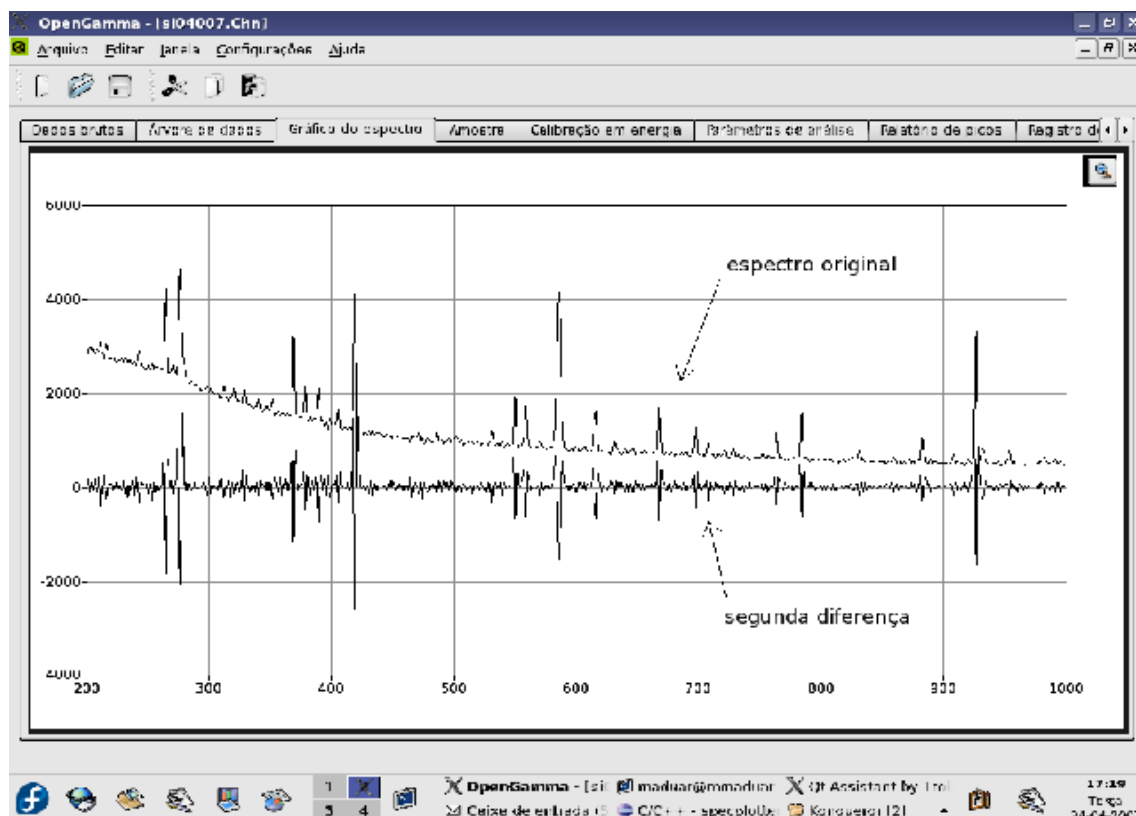


Figura 4.5. Tela do aplicativo OpenGamma com o gráfico do espectro e da respectiva segunda diferença. Observa-se a virtual eliminação da linha-base, ao mesmo tempo em que se mantém a informação da localização dos picos.

4.7 Análise e funções de ajuste

4.7.1 Calibração canal vs. energia

A calibração do espectro que relaciona os canais à energia gama dos fotopicos é um procedimento relativamente simples, por várias razões. Os valores de energia de milhares de transições gama são amplamente disponíveis e conhecidas com bastante exatidão, tipicamente da ordem de 0,01%.

Em geral, medidas com detectores sempre apresentam alguma radiação de fundo, o que possibilita o uso das transições gama oriundas de radionuclídeos naturais na calibração. Nos casos em que a radiação de fundo é muito baixa e portanto não sendo viável seu uso na calibração em energia, esta é facilmente exequível com o uso de fontes artificiais de radionuclídeos.

A relação canal vs. energia é aproximadamente linear. No entanto, desvios consideráveis da linearidade podem ocorrer em sistemas de medida de energias gama altas, superiores a 2 MeV, introduzidos pela presença de componentes eletrônicos com resposta não linear (Pecequilo, 1978).

Em virtude dessa não-linearidade, atualmente os aplicativos empregam como função de ajuste uma função de 2º grau, que oferece resultados bastante satisfatórios. A linearidade da função pode ser avaliada pela razão entre os coeficientes dos termos de 2º grau e de 1º grau. O código OpenGamma adota também essa função para a calibração canal vs. energia.

4.7.2 Determinação da linha base

A linha-base pode ser qualitativamente diferente à esquerda e à direita do pico. Chamando as funções correspondentes respectivamente de $B_e(x)$ e $B_d(x)$, é fisicamente razoável supor uma transição suave da função $B_e(x)$ para a função $B_d(x)$ ao longo dos picos de uma região do espectro. Chamando tal função de transição de $B_i(x)$ há diversas abordagens para a determinação da mesma.

Pode-se definir $B_i(x)$ a partir das alturas dos picos, definindo pesos para as funções $B_d(x)$ ao longo da região. Introduce-se uma função de ponderação $p_d(x)$ como fator multiplicativo para $B_d(x)$. A função de ponderação para $B_e(x)$ deverá ser $1 - p_d(x)$, para garantir que o peso total seja unitário em cada ponto x .

Define-se então a função geral para a linha base, $B_x(x)$, como sendo

$$B(x) = p_d(x)B_d(x) + (1 - p_d(x))B_e(x) \quad (4.6)$$

A função de ponderação $p_d(x)$ adequada deverá ser tal que $\lim_{x \rightarrow -\infty} p_d(x) = 0$ e $\lim_{x \rightarrow \infty} p_d(x) = 1$, bem como ser proporcional à integral da função gaussiana do fotopico. A função com tais características é

$$p_d(x) = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \operatorname{erf} \left[\sqrt{k_i} (x - c_i) \right] \right\} \quad (4.7)$$

onde

$$\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z \exp(-t^2) dt \quad (4.8)$$

Assim, a função geral $g(x)$ a ser ajustada para uma região do espectro conterá uma parcela $F(x)$ para os fotopicos e outra parcela $B(x)$ para a linha-base, ou seja,

$$g(x) = B(x) + F(x) \quad (4.9)$$

4.7.3 Função de ajuste dos fotopicos

A intensidade do sinal eletrônico das contagens correspondentes a dada transição gama é afetada de variabilidade estatística e por outros fatores aleatórios. Conseqüentemente, a distribuição das contagens nos canais de um pico pode ser aproximada por uma distribuição normal que, no caso contínuo, torna-se uma gaussiana. Superposta ao fotopico há a linha-base do espectro que possui localmente curvatura suave.

Assim, no caso geral a função adequada para o ajuste de um fotopico isolado, sem considerar a linha base, tem a forma

$$F_i(x) = a_i \exp \left[-k_i (x - c_i)^2 \right] \quad (4.10)$$

onde

a_i é a altura da gaussiana do pico i

k_i é um parâmetro relacionado à largura à meia-altura (FWHM) do pico i

c_i é o canal centroide do pico i

x é o canal do espectro

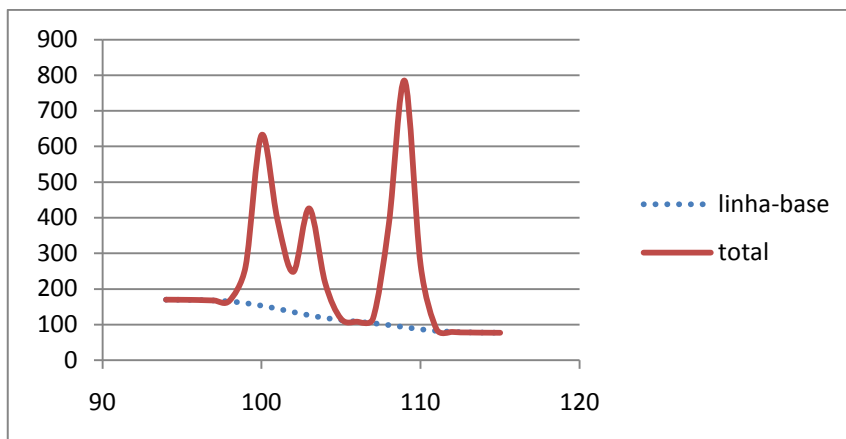
A largura à meia-altura (FWHM) é definida com a largura do pico medida na altura média entre a base e o topo do pico. O parâmetro k relaciona-se a FWHM pela expressão

$$\text{FWHM} = 2\sqrt{\ln(2)} \cdot k^{-1/2} \quad (4.11)$$

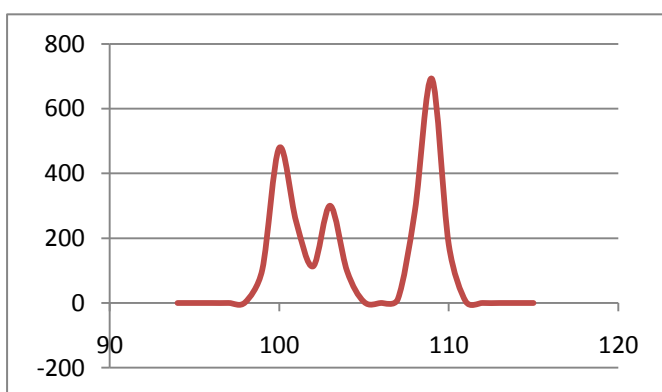
No caso de picos com alguma superposição, de tal forma que seja necessário um ajuste simultâneo para os vários picos, a função será a soma de vários fotopicos, ou seja,

$$F(x) = \sum_i F_i(x) \quad (4.12)$$

A Figura 4.6 ilustra os gráficos das funções de ajuste numa região do espectro com 3 picos gama. Em (a), é mostrada a função total $g(x)$ e a linha-base ajustada $B(x)$. Em (b), é mostrada a função dos fotopicos $F(x)$ da mesma região, após a subtração.



(a)



(b)

Figura 4.6. Gráficos das funções de ajuste de curvas às contagens de uma região do espectro com 3 picos gama. **(a)** Funções $g(x)$ (total) e $B(x)$ (linha-base). **(b)** Função $F(x)$ (fotopicos gama líquidos).

4.7.4 Resolução (largura) de pico

Para que seja possível o ajuste de uma função que relacione a largura com a energia do pico, devem ser escolhidos picos suficientemente isolados. Tendo sido definidos, a solução proposta foi fazer um ajuste sobre a segunda derivada da função gaussiana. Como a curvatura da linha-base é muito suave, a segunda derivada retém os parâmetros de interesse do pico, ao mesmo tempo em que elimina a linha-base.

No domínio contínuo, a segunda diferença corresponde à segunda derivada da função de ajuste do pico. Sendo então $F_i(x)$ como definida na Eq. 4.10, sua segunda derivada é dada por

$$F_i''(x) = 2a_i k_i [2k_i(x - c_i)^2 - 1] \cdot \exp[-k_i(x - c_i)^2] \quad (4.13)$$

A Figura 4.7 apresenta o gráfico da função $F_i''(x)$ com parâmetros $a_i = 1$, $k_i = 0,1$ e $c_i = 10$, para ilustração.

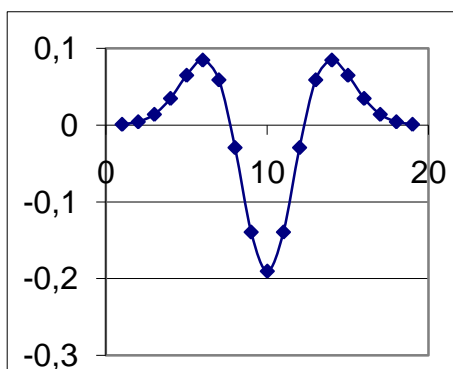


Figura 4.7. Gráfico da segunda derivada de uma gaussiana genérica.

Assim, dado um conjunto de pontos (x, y) onde x é o canal e y a contagem correspondente, o objetivo é encontrar os parâmetros a_i , k_i e c_i por meio de um ajuste de curva. A função $F_i''(x)$ não pode ser linearizada nestes parâmetros, portanto adota-se um ajuste não-linear. Para tanto, são obtidas as derivadas parciais de $F_i''(x)$ em relação aos parâmetros:

$$\frac{\partial}{\partial a_i} F_i''(x) = 2k_i [2k_i(x-c_i)^2 - 1] \cdot \exp[-k_i(x-c_i)^2] \quad (4.14a)$$

$$\frac{\partial}{\partial k_i} F_i''(x) = -2a_i [2k_i^2(x-c_i)^4 - 5k_i(x-c_i)^2 + 1] \cdot \exp[-k_i(x-c_i)^2] \quad (4.14b)$$

$$\frac{\partial}{\partial c_i} F_i''(x) = 4a_i k_i^2 (x-c_i) [2k_i(x-c_i)^2 - 3] \cdot \exp[-k_i(x-c_i)^2] \quad (4.14c)$$

Tais derivadas são utilizadas na aplicação do algoritmo de Levenberg-Marquardt, descrito no item 4.7.6.

Uma vez obtidos os valores c_i dos canais centroides e os respectivos k_i , os valores $FWHM$ são calculados por meio da expressão 4.11 e é feito um ajuste quadrático sobre os pares $(c_i, FWHM_i)$. A Figura 4.8 mostra a janela correspondente do aplicativo OpenGamma para a execução do ajuste descrito.

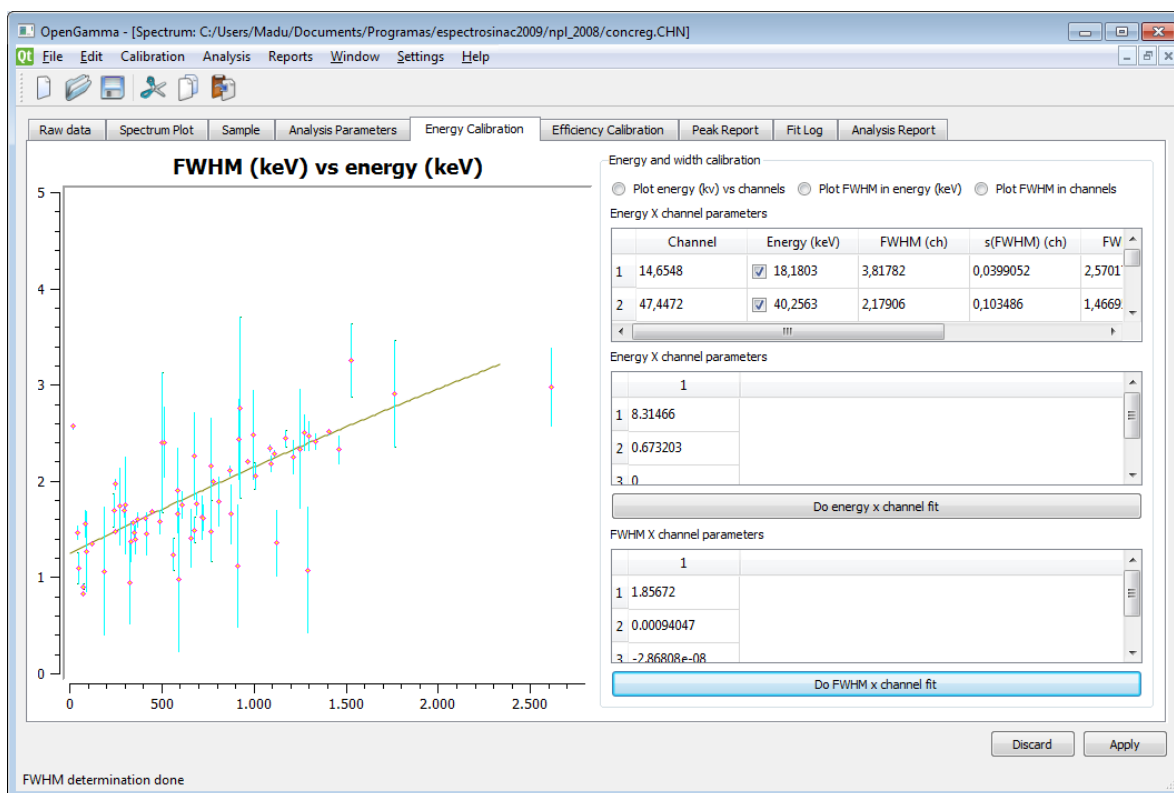


Figura 4.8. Aba para ajuste da função largura do pico (FWHM) vs. energia.

4.7.5 Linha-base e resolução de multipletos

A função $g(x)$ para ajustar dada região do espectro não é linearizável nos parâmetros c_i (centroídes) e a_i (alturas), assim, adota-se um ajuste não-linear. Para tanto, obtêm-se as derivadas parciais de $g(x)$ em relação a c_i e a_i . Estas derivadas são definidas pelo conjunto de expressões a seguir, onde se omitiu a dependência em x para maior clareza:

$$\frac{\partial g}{\partial c_i} = \frac{\partial p_d}{\partial c_i} B_d + p_d \frac{\partial B_d}{\partial c_i} - \frac{\partial p_d}{\partial c_i} B_e + (1 - p_d) \frac{\partial B_e}{\partial c_i} + \frac{\partial F}{\partial c_i} \quad (4.15)$$

$$= \frac{\partial p_d}{\partial c_i} (B_d - B_e) + p_d \frac{\partial B_d}{\partial c_i} + (1 - p_d) \frac{\partial B_e}{\partial c_i} + \frac{\partial F}{\partial c_i} \quad (4.16)$$

$$\frac{\partial p_d}{\partial c_i} = -\sqrt{\frac{k_i}{\pi}} \cdot \frac{a_i}{\sum_k^n a_k} \exp[-k_i(x - c_i)^2] \quad (4.17)$$

$$\frac{\partial B_d}{\partial c_i} = \frac{\partial B_e}{\partial c_i} = 0 \quad (4.18)$$

$$\frac{\partial F}{\partial c_i} = 2k_i(x - c_i)F_i \quad (4.19)$$

O que leva à expressão

$$\frac{\partial g}{\partial c_i} = \sqrt{\frac{k_i}{\pi}} \cdot (B_e - B_d) \cdot \frac{a_i}{\sum_k^n a_k} \exp[-k_i(x - c_i)^2] + 2k_i(x - c_i)F_i \quad (4.20)$$

$$\frac{\partial g}{\partial a_i} = \frac{\partial p_d}{\partial a_i} B_d + p_d \frac{\partial B_d}{\partial a_i} - \frac{\partial p_d}{\partial a_i} B_e + (1 - p_d) \frac{\partial B_e}{\partial a_i} + \frac{\partial F}{\partial a_i} \quad (4.21)$$

$$\frac{\partial p_d}{\partial a_i} = \frac{erf_i}{\sum_k^n a_k} - \left(\sum_k^n a_k \right)^2 \cdot \sum_j^n a_j erf_j \quad (4.22)$$

$$\frac{\partial B_d}{\partial a_i} = \frac{\partial B_e}{\partial a_i} = 0 \quad (4.23)$$

$$\frac{\partial F}{\partial a_i} = \frac{F_i}{a_i} \quad (4.24)$$

Portanto,

$$\frac{\partial g}{\partial a_i} = (B_e - B_d) \left[\left(\sum_k^n a_k \right)^2 \cdot \sum_j^n a_j erf_j - \frac{erf_i}{\sum_k^n a_k} \right] + \frac{F_i}{a_i} \quad (4.25)$$

O cálculo direto das expressões anteriores foi implementado no código OpenGamma, especificamente para uso das rotinas de ajuste não-linear pelo método iterativo de Levenberg-Marquardt, disponível na biblioteca GSL.

4.7.6 Algoritmo de Levenberg-Marquardt

O ajuste de funções não-lineares nos parâmetros pelo método dos mínimos quadrados é feito pela minimização de n funções f_i a p parâmetros x_i por meio da função

$$\Phi(x) = \frac{1}{2} \|F(x)\|^2 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n [f_i(x_1, \dots, x_p)]^2 \quad (4.26)$$

Os valores iniciais dos parâmetros são obtidos a partir da aproximação linear

$$\Psi(p) = \|F(x+p)\| \approx \|F(x) + Jp\| \quad (4.27)$$

onde x é o ponto inicial, p é o passo proposto para a iteração e J é a matriz jacobiana de elementos

$$J_{ij} = \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \quad (4.28)$$

No presente trabalho, o método será sempre aplicado ao ajuste de pontos experimentais na forma (t_i, x_i) com incertezas independentes na variável y_i dadas por σ_i . Neste caso as funções componentes assumirão a forma

$$f_i = \frac{Y(x, t_i) - y_i}{\sigma_i} \quad (4.29)$$

que levam à definição do elemento da matriz jacobiana

$$J_{ij} = \frac{1}{\sigma_i} \frac{\partial Y_i}{\partial x_j} \quad (4.30)$$

onde

$$Y_i = Y(x, t_i) \quad (4.31)$$

4.8 Determinação da atividade

4.8.1 Curvas de eficiência de detecção

De acordo com o exposto no item 3.1.3, a determinação da atividade depende da aplicação de curvas de eficiência de contagem em função da energia da radiação gama.

Um procedimento para se obter os pontos (ε_j, E_j) envolve o uso de padrões radioativos preparados em réplicas, na geometria de contagem para a qual se pretende obter a curva de eficiência. Os padrões são contados e os espectros analisados para se obter as áreas líquidas C dos picos a utilizar na calibração.

Para cada raio gama γ de energia E_γ obtém-se a eficiência ε_γ por meio da expressão (Knoll, 2000)

$$\varepsilon_\gamma = \frac{C}{A \cdot I_\gamma \cdot t_u} \quad (4.32)$$

onde

ε_γ é a eficiência de detecção para a energia E_γ

C é a área líquida do pico de absorção total correspondente ao raio gama γ

A é a atividade de referência (dps), no momento da medida, do radionuclídeo emissor do gama de energia E_γ

I_γ é a probabilidade de emissão do fóton γ por desintegração

t_u é o intervalo de tempo útil (*live time*) de medida (s)

Tendo sido assim obtidos os pontos experimentais (ε_j, E_j) , é feito um ajuste de curva para se obter a relação $\varepsilon(E_\gamma)$. O código OpenGamma implementa o ajuste por meio de uma função da forma

$$\ln \varepsilon(E_\gamma) = \sum_i a_i \ln(E_\gamma)^i \quad (4.33)$$

Pela aplicação das mudanças de variáveis $y_j = \ln \varepsilon_j$ e $x_j = \ln(E_j)$, a função 4.33 é linearizada e o ajuste pode ser feito por uma simples função polinomial dada por

$$y = \sum_{i=0}^n a_i x^i \quad (4.34)$$

No aplicativo, o usuário, tendo determinado previamente os pares (ε_j, E_j) , entra com os mesmos, as incertezas em (ε_j) e com o grau n desejado

para o polinômio. Após o ajuste, o aplicativo calcula e apresenta os parâmetros (a_i) da função 4.33.

A Figura 4.9 apresenta a tela de entrada de dados com o gráfico e os parâmetros ajustados.

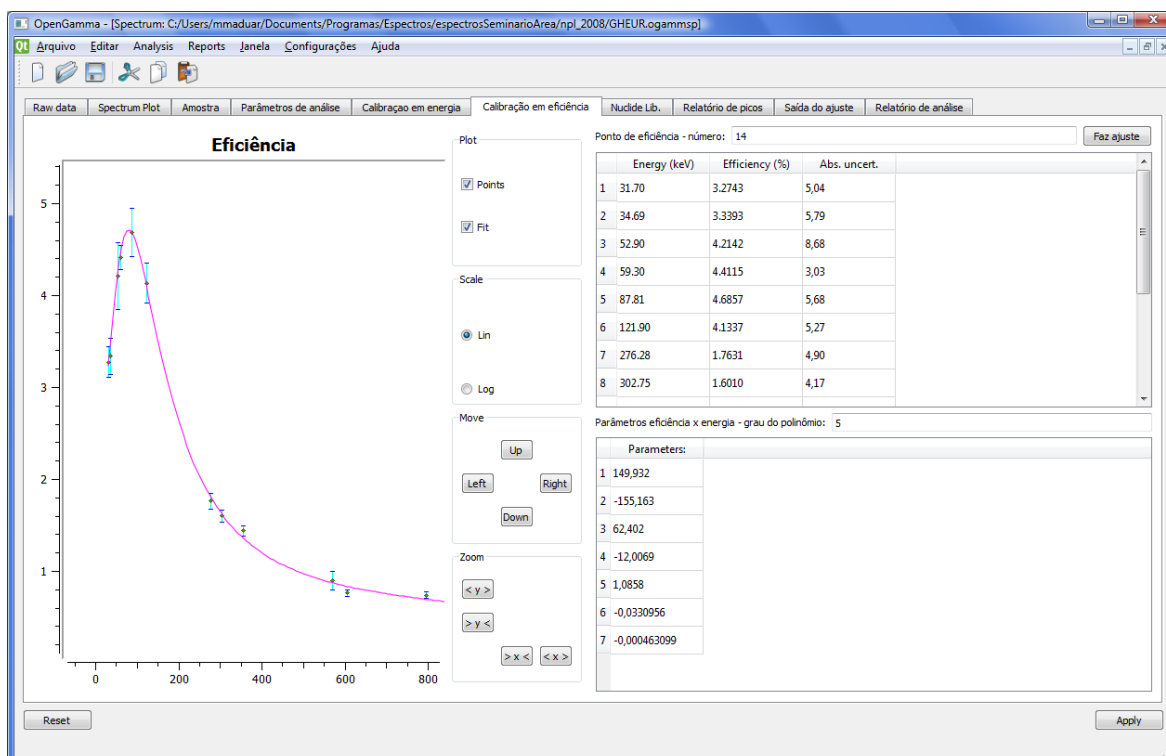


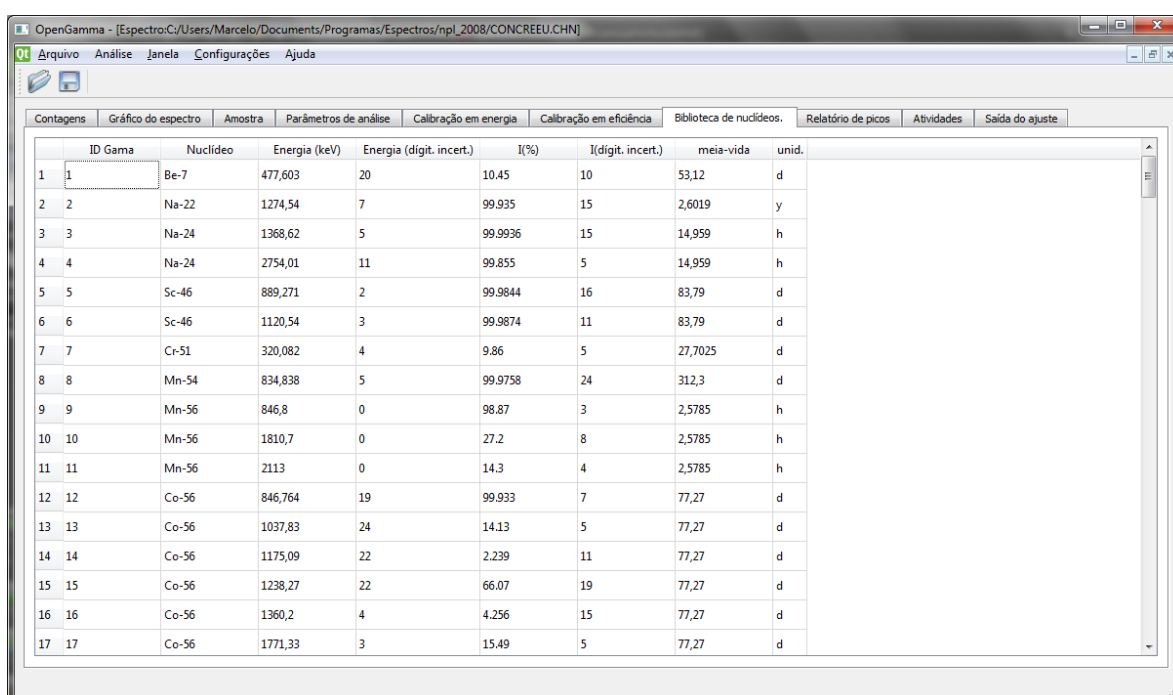
Figura 4.9. Tela para entrada dos dados de eficiência e ajuste da função. O gráfico apresenta os valores de eficiência em função da energia da radiação gama (keV) e a função ajustada.

4.8.2 Bibliotecas de transições gama de radionuclídeos

O aplicativo OpenGamma obtém os dados de um determinado conjunto de transições gama a partir de arquivos texto. Uma biblioteca padrão é fornecida com o OpenGamma, construída a partir de dados de transições gama disponíveis livremente. Foram escolhidas transições usadas frequentemente na calibração de sistemas de espectrometria gama.

Tais arquivos podem ser abertos e gravados com o uso de qualquer editor simples (*Notepad* ou semelhante). A biblioteca padrão serve como modelo para o usuário editar e construir outras bibliotecas de acordo com suas necessidades.

Na abertura de um espectro, é feita a carga da biblioteca padrão ou de alguma outra que tenha sido definida anteriormente. A Figura 4.10 apresenta a biblioteca padrão após a leitura e já tabulada no aplicativo.



ID Gama	Nuclídeo	Energia (keV)	Energia (digit. incert.)	I(%)	I(digit. incert.)	meia-vida	unid.
1	Be-7	477,603	20	10,45	10	53,12	d
2	Na-22	1274,54	7	99,935	15	2,6019	y
3	Na-24	1368,62	5	99,9936	15	14,959	h
4	Na-24	2754,01	11	99,855	5	14,959	h
5	Sc-46	889,271	2	99,9844	16	83,79	d
6	Sc-46	1120,54	3	99,9874	11	83,79	d
7	Cr-51	320,082	4	9,86	5	27,7025	d
8	Mn-54	834,838	5	99,9758	24	312,3	d
9	Mn-56	846,8	0	98,87	3	2,5785	h
10	Mn-56	1810,7	0	27,2	8	2,5785	h
11	Mn-56	2113	0	14,3	4	2,5785	h
12	Co-56	846,764	19	99,933	7	77,27	d
13	Co-56	1037,83	24	14,13	5	77,27	d
14	Co-56	1175,09	22	2,239	11	77,27	d
15	Co-56	1238,27	22	66,07	19	77,27	d
16	Co-56	1360,2	4	4,256	15	77,27	d
17	Co-56	1771,33	3	15,49	5	77,27	d

Figura 4.10. Telas de dados das transições gama da biblioteca padrão.

Outras bibliotecas com dados de transições gama e radionuclídeos podem ser escolhidas na aba de parâmetros de análise, como mostra a Figura 4.11.

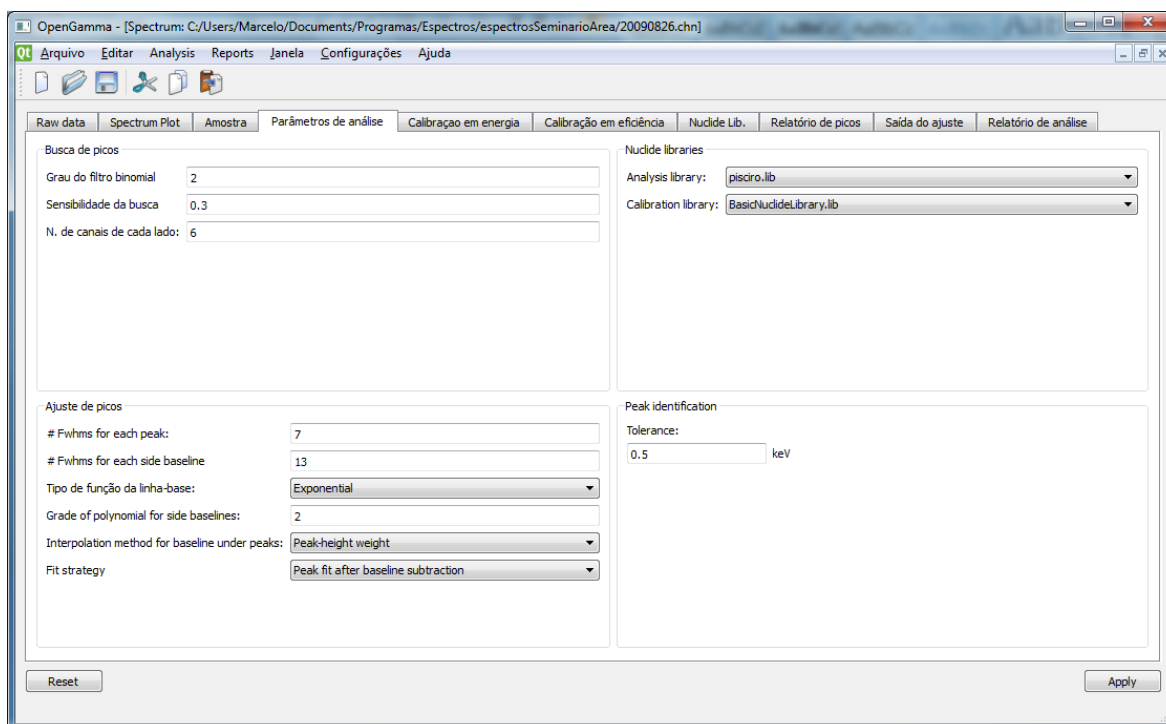


Figura 4.11. Tela para entrada das bibliotecas de análise.

4.8.3 Determinação da atividade em amostras

Para a determinação das atividades, a amostra preparada na geometria padronizada é contada e o espectro obtido é carregado no aplicativo OpenGamma. Deve-se então definir nas telas correspondentes os parâmetros de análise, especialmente a curva de eficiência correspondente à geometria e a biblioteca de radionuclídeos. Outros parâmetros apresentam valores default e podem ser modificados a qualquer momento.

No cálculo das atividades, o aplicativo OpenGamma implementa essencialmente o conjunto de expressões 3.2 a 2.6. Tendo sido feita a análise, os resultados em atividade são apresentados em duas abas no aplicativo.

A aba “Relatório de picos” apresenta os parâmetros de cada pico gama analisado, que incluem:

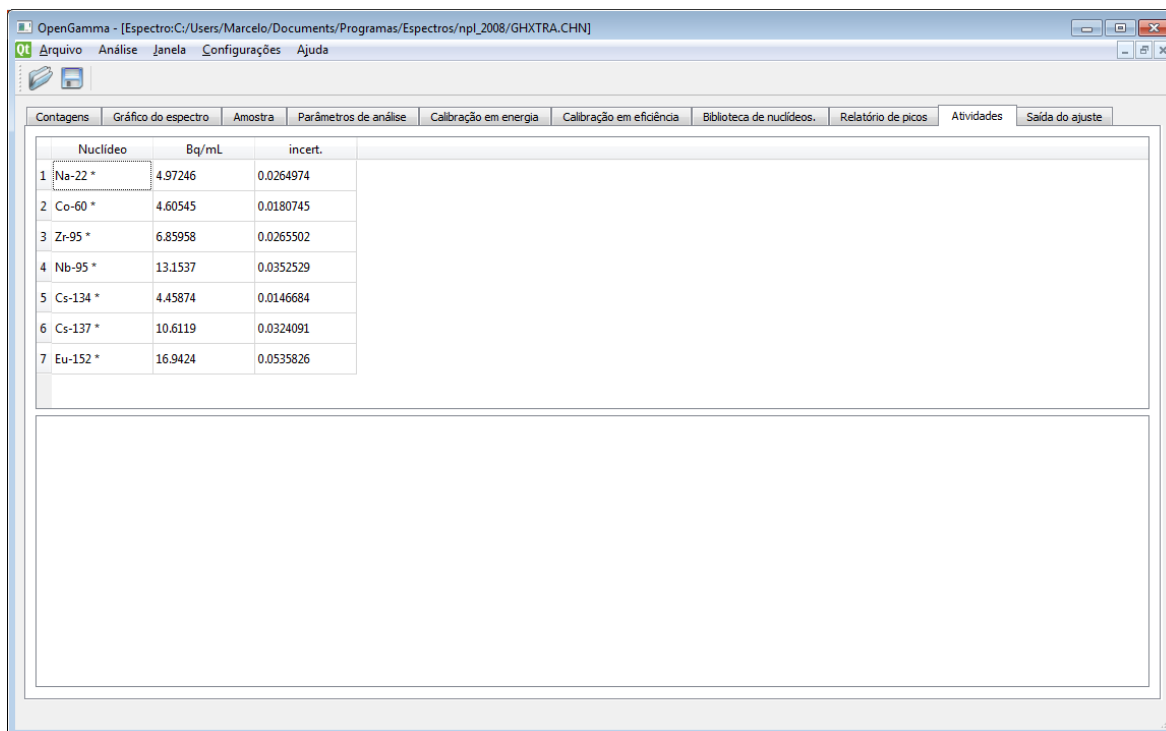
- Canal centroide
- Energia gama obtida pelo ajuste canal vs. energia
- Largura experimental
- Largura obtida pelo ajuste FWHM vs. energia
- Área líquida
- Radionuclídeo provável
- Atividade correspondente ao pico gama

A aba “Atividades” apresenta a atividade final de cada radionuclídeo na amostra e respectivas incertezas, obtidas pela média das atividades correspondentes aos picos individuais, de acordo com as Eqs. 3.5 e 3.6.

As telas de saída do relatório de picos e das atividades são mostradas nas Figuras 4.12 e 4.13, respectivamente.

unc.	net area	unc.	En. encontr.	Nuclídeo	meia vida	unid.	I%	Efic	Ativ (Bq)	unc.
39 90,1819	144770	387,993	765.803	Nb-95 *	34.975	d	99.81	1.16303	1312.84	3.5185
40 39,5701	25044,5	171,25	778.904	Eu-152 *	13.537	y	12.97	1.14649	1773.13	12.1244
41 48,7904	40646,1	212,731	795.8	Cs-134 *	2.0648	y	85.4	1.12583	445.413	2.33117
42 19,1307	3090,39	83,6321	801.9	Cs-134 *	2.0648	y	8.69	1.11856	334.972	9.06501
43 21,6865	6195,37	97,3699	867.38	Eu-152 *	13.537	y	4.214	1.04666	1478.78	23.2414
44 34,13	21525	158,632	964.1	Eu-152 *	13.537	y	14.63	0.95739	1617.88	11.9233
45 14,2063	1779,48	66,8692								
46 28,2949	16344,4	136,334	1085.84	Eu-152 *	13.537	y	10.13	0.868006	1956.93	16.3234
47 14,4689	3027,21	69,7855	1089.74	Eu-152 *	13.537	y	1.731	0.865565	2127.08	49.035
48 29,7605	17808,8	144,364	1112.08	Eu-152 *	13.537	y	13.54	0.851567	1626.05	13.1814
49 39,972	35792,9	196,705	1173.23	Co-60 *	5.2714	y	99.857	0.816573	462.228	2.54024
50 10,3156	1384,82	51,1892	1212.95	Eu-152 *	13.537	y	1.412	0.796207	1296.79	47.9353
51 38,4542	36222,9	193,026	1274.54	Na-22 *	2.6019	y	99.935	0.767871	497.246	2.64974
52 35,8963	32437,5	181,855	1332.49, 1333.11	Co-60 *, Ga-66 *						
53 29,6871	23787,9	151,875	1408.01	Eu-152 *	13.537	y	20.85	0.718663	1671.33	10.6707
54 8,05485	705,586	41,3796								

Figura 4.12. Tela do OpenGamma com o relatório de picos



The screenshot shows the OpenGamma software interface. The title bar reads "OpenGamma - [Espectro:C:/Users/Marcelo/Documents/Programas/Espectros/npl_2008/GHXTRA.CHN]". The menu bar includes "Arquivo", "Análise", "Janela", "Configurações", and "Ajuda". The main window has several tabs: "Contagens", "Gráfico do espectro", "Amostra", "Parâmetros de análise", "Calibração em energia", "Calibração em eficiência", "Biblioteca de núcleos", "Relatório de picos", "Atividades", and "Saída do ajuste". The "Atividades" tab is active, displaying a table with the following data:

	Núcleo	Bq/mL	incert.
1	Na-22 *	4.97246	0.0264974
2	Co-60 *	4.60545	0.0180745
3	Zr-95 *	6.85958	0.0265502
4	Nb-95 *	13.1537	0.0352529
5	Cs-134 *	4.45874	0.0146684
6	Cs-137 *	10.6119	0.0324091
7	Eu-152 *	16.9424	0.0535826

Figura 4.13. Tela do OpenGamma com as atividades dos radionuclídeos

As atividades reportadas são obtidas diretamente a partir da área líquida dos picos, ou seja, a área bruta da qual foi descontada a contribuição da linha base do espectro. Não é feita correção para a radiação de fundo (BG). Ou seja, supõe-se que a contribuição à área de cada pico é decorrente unicamente da radiação gama da própria amostra.

Para fazer a correção para BG, o usuário pode efetuar a contagem da amostra sob análise e de outra amostra sem radionuclídeos detectáveis ("branco"), na mesma geometria e sistema de medida; em seguida, obter as diferenças, pico a pico, entre as taxas de contagem obtidas a partir das áreas líquidas dos picos da amostra e do branco e aplicar a curva de eficiência pertinente.

5 RESULTADOS

5.1 Análise de amostras de referência

Para avaliar o desempenho do código OpenGamma na análise de espectros, foram escolhidos 3 espectros de amostras de referência. As amostras são:

- Amostra *gamma-high* da intercomparação coordenada pelo National Physical Laboratory (NPL) em 2008 (Harms & Gilligan, 2009)
- Amostra de material de referência certificado pela AIEA: radionuclídeos em espinafre (IAEA, 2009a)
- Amostra de solo da intercomparação da AIEA em 2007 (IAEA, 2009b)

A escolha dessas amostras para uso como amostras de referência baseou-se em dois critérios: 1) Valores de incerteza bastante reduzidos; e 2) Características distintas, em relação aos espectros gerados.

Para comparar os resultados do OpenGamma com os valores de referência, foi empregado o parâmetro estatístico z (*z-score*), de acordo com a expressão

$$z_{rep} = \frac{A_{rep} - A_{ref}}{\sqrt{\sigma_{rep}^2 + \sigma_{ref}^2}} \quad (5.1)$$

onde A e σ representam respectivamente o valor e a incerteza da variável. O índice *rep* refere-se ao resultado obtido pelo código e *ref* corresponde ao valor de referência.

A Tabela 5.1 apresenta os valores de referência das atividades das amostras e os resultados obtidos neste trabalho com o uso do OpenGamma. As incertezas que afetam os últimos dígitos significativos dos valores são reportadas entre parênteses. A última coluna apresenta a avaliação dos resultados pelo critério $|z| < 3$. A letra “A” indica que o resultado foi aprovado segundo o critério adotado.

Tabela 5.1. Valores de referência das concentrações de atividade das amostras e valores obtidos com o aplicativo OpenGamma.

GH (NPL 2008)	Atividade (Bq/g)		z-score	Desvio (%)	Avaliação $ z < 3$
	Valor de referência	Resultado do OpenGamma			
²² Na	5,529(20)	4,99(26)	-2,07	-9,7%	A
⁶⁰ Co	4,641(14)	4,60(5)	-0,79	-0,9%	A
⁹⁵ Zr	7,35(8)	8,02(23)	2,75	9,1%	A
¹³³ Ba	2,754(19)	2,82(14)	0,47	2,4%	A
¹³⁴ Cs	4,63(4)	4,59(11)	-0,34	-0,9%	A
¹³⁷ Cs	9,56(7)	9,60(24)	0,16	0,4%	A
¹⁵² Eu	17,86(12)	16,7(5)	-2,26	-6,5%	A

Espinafre (AIEA 2007)	Atividade (Bq/g)		z-score	Desvio (%)	Avaliação $ z < 3$
	Valor de referência	Resultado do OpenGamma			
¹³⁷ Cs	1,235(35)	1,21(8)	-0,29	-2,0%	A
⁴⁰ K	1,188(30)	1,20(7)	0,16	1,0%	A

Solo (AIEA 2007)	Atividade (Bq/kg)		z-score	Desvio (%)	Avaliação $ z < 3$
	Valor de referência	Resultado do OpenGamma			
²⁴¹ Am	55,6(16)	49,8(42)	-1,29	-10,4	A
¹⁰⁹ Cd	248,7(52)	234(21)	-0,68	-5,9	A
⁶⁰ Co	82,6(20)	81,4(22)	-0,40	-1,5	A
¹³⁴ Cs	59,4(17)	59,5(15)	0,04	0,2	A
¹³⁷ Cs	68,5(14)	71,2(25)	0,95	3,9	A
⁵⁴ Mn	61,0(12)	67,2(26)	2,15	10,2	A
⁶⁵ Zn	29,9(9)	33,3(35)	0,93	11,4	A

As Figuras 5.1, 5.2 e 5.3 mostram os respectivos espectros com o ajuste realizado pelo OpenGamma sobre os fotopicos. Os fotopicos visíveis e não marcados são aqueles que não passaram no critério definido pela expressão 4.4.

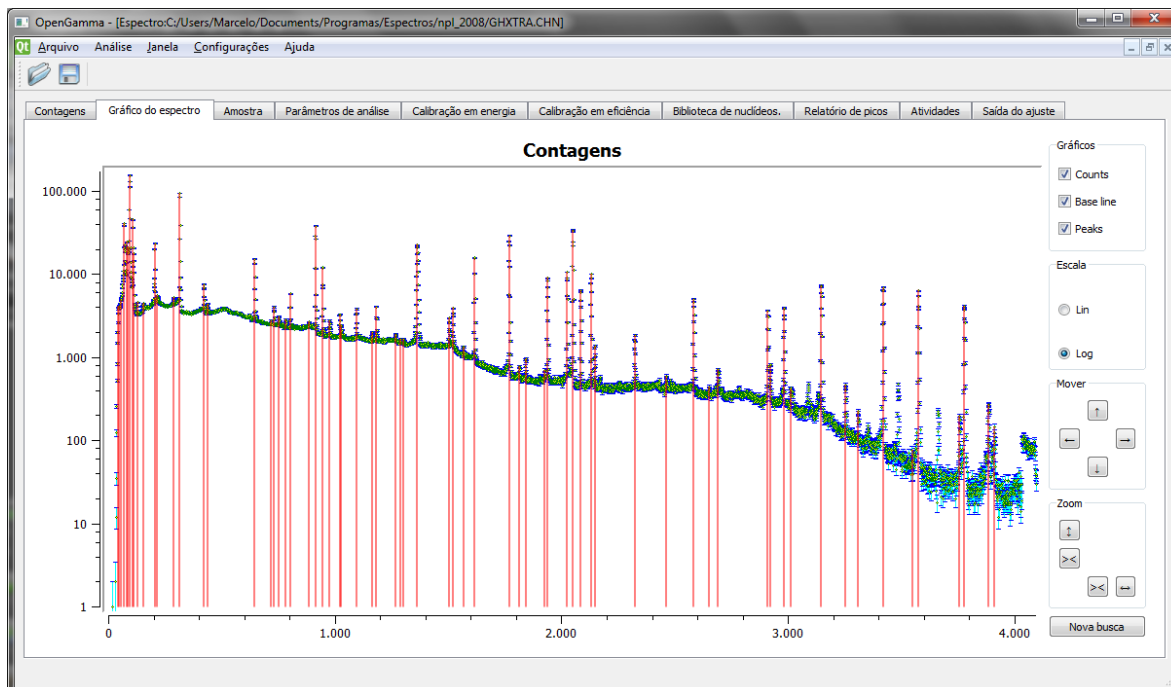


Figura 5.1. Espectro analisado da amostra GH (gamma-high) da intercomparação do NPL em 2008.

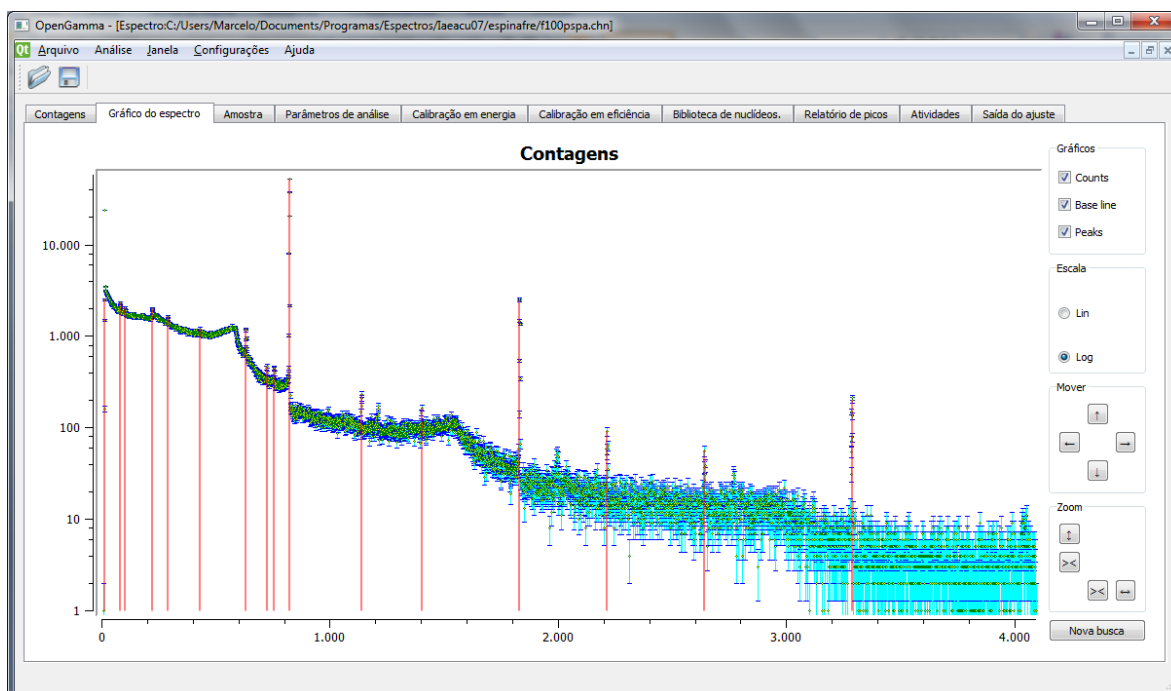


Figura 5.2. Espectro analisado da amostra de espinafre da intercomparação da AIEA em 2007

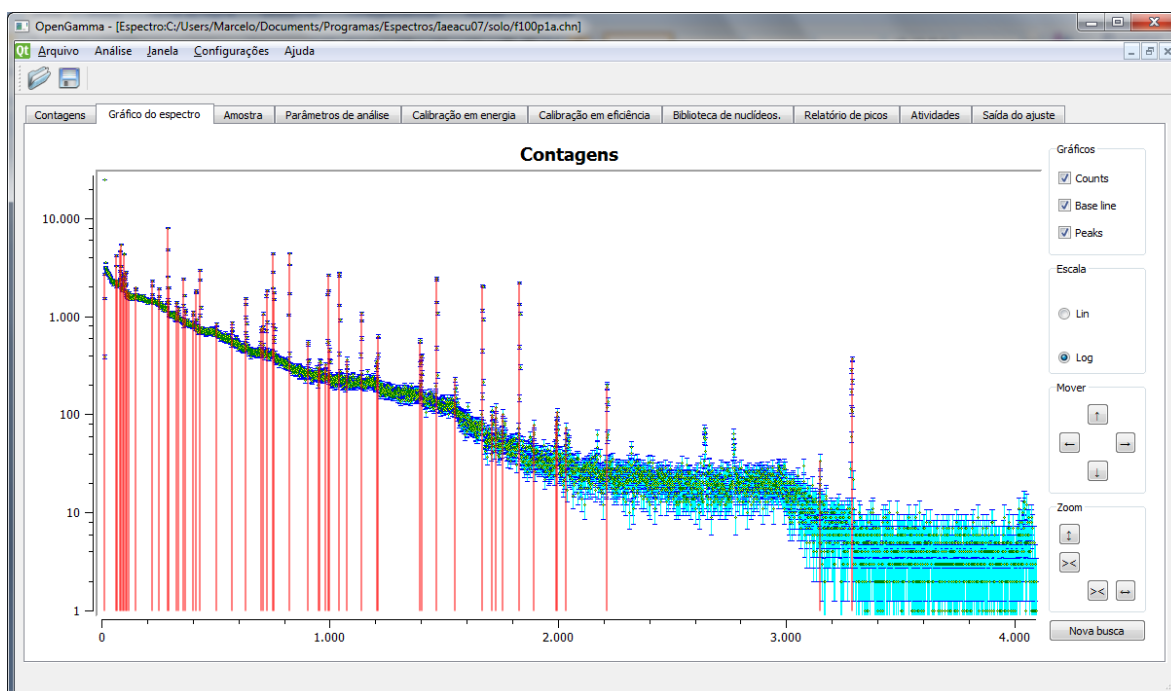


Figura 5.3. Espectro analisado da amostra de solo da intercomparação da AIEA em 2007.

5.2 Comparação com o aplicativo InterWinner

O Laboratório de Radiometria Ambiental (LRA) tem instalados e licenciados para uso os seguintes aplicativos de análise de espectros gama: Ganaas (IAEA, 1991), InterWinner (ORTEC, 2004) e GeniePC (Canberra Inc, 2005). Estes aplicativos, entre outros, obtiveram resultados satisfatórios na intercomparação de códigos computacionais coordenada pela Agência Internacional de Energia Atômica (IAEA, 1998a).

Estes aplicativos podem portanto ser considerados validados e uma avaliação sistemática do desempenho do código OpenGamma, em comparação com resultados obtidos com os mesmos, fornecerá subsídios para sua validação.

Vários espectros anteriormente gerados no LRA foram analisados com o uso do código OpenGamma e pelo pacote comercial InterWinner. Para comparar ambos os resultados, foi empregado o critério adotado pela AIEA no exercício de intercomparação descrito no TEC-DOC-1011 (IAEA, 1998a), que inclui o InterWinner. O desempenho de cada código na determinação dos parâmetros dos fotopicos foi avaliado pelo cálculo do parâmetro estatístico z , conforme a expressão 5.1, para cada variável relevante calculada pelos pacotes em conjuntos de espectros.

Uma vez que no presente caso a variável de interesse é a área líquida do pico, esta foi calculada para todos os picos do conjunto de espectros avaliado, onde *rep* refere-se aos resultados do OpenGamma e *ref* aos resultados correspondente do InterWinner.

Para identificar eventuais desvios sistemáticos relacionados com características gerais dos espectros, estes foram agrupados da seguinte forma:

- **Grupo A:** *Baixas taxas de contagem e tempos longos de contagem (2 ou mais dias);* foram analisados 29 espectros do PNI (PNI – IRD)
- **Grupo B:** *Baixas taxas de contagem e tempos curtos de contagem, resultando em estatísticas pobres de contagem;* foram analisados 22 espectros de efluentes e de amostras de análise por ativação.
- **Grupo C:** *Altas taxas de contagem, com boa estatística, porém linha-base elevada;* foram usados 24 espectros de filtros de monitoração do ar com alto teor de ^{131}I .
- **Grupo D:** *Vários radionuclídeos (10 ou mais) na mesma amostra;* foram analisados 16 espectros de amostras de processo do Reator IEA-R1.

O mesmo conjunto de parâmetros (sensibilidade na busca do pico e largura das regiões para definição da linha base) foi empregado para todos os conjuntos de espectros, tanto para o presente programa como para o InterWinner.

A função de ajuste não levou em conta coleta incompleta de carga no volume do detector, já que o efeito característico desse fenômeno, o surgimento de cauda à esquerda dos fotopicos (Knoll, 2000), não foi observado em praticamente nenhum dos espectros analisados, em todos os grupos.

A Tabela 5.2 sumariza os resultados obtidos para cada grupo. O número de picos corresponde aos que foram detectados tanto pelo presente código como pelo InterWinner. O critério de avaliação adotado foi a comparação do valor da variável χ_{red}^2 com a unidade (IAEA, 1998a), em que χ_{red}^2 foi calculada, para cada conjunto de espectros, pela expressão

$$\chi_{red}^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N z_i^2 \quad (5.2)$$

onde N é o número total de picos detectados em cada conjunto de espectros e z_i é o valor z_{rep} calculado para cada pico i do conjunto.

Tabela 5.2. Resultados da comparação dos softwares OpenGamma e InterWinner.

Grupo	N , Número de picos no grupo	χ_{red}^2
A	898	7,61
B	624	7,70
C	212	1,34
D	435	1,41

Os valores individuais de z_i são mostrados como pontos no gráfico de dispersão, em função da energia gama correspondente, de forma a identificar alguma possível correlação. Para melhor visualização, foram utilizados os seguintes limites da escala do eixo y: -20 a 20 para os grupos A e B (Figura 5.4) e -10 a 10 para os grupos C e D (Figura 5.5). No grupo B, o máximo da escala do

eixo x (energia gama) foi limitado em 1800 keV, pois o detector empregado foi um HPGe de baixa energia.

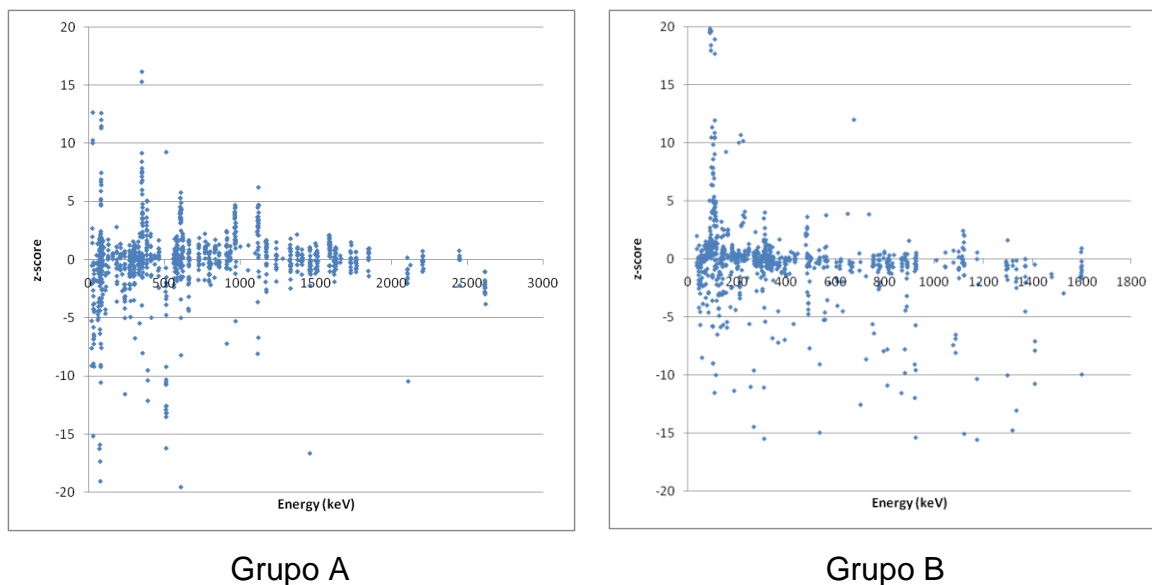


Figura 5.4. Valores de z para as áreas líquidas, na análise dos espectros dos grupos A e B analisados pelo OpenGamma, em comparação com o InterWinner.

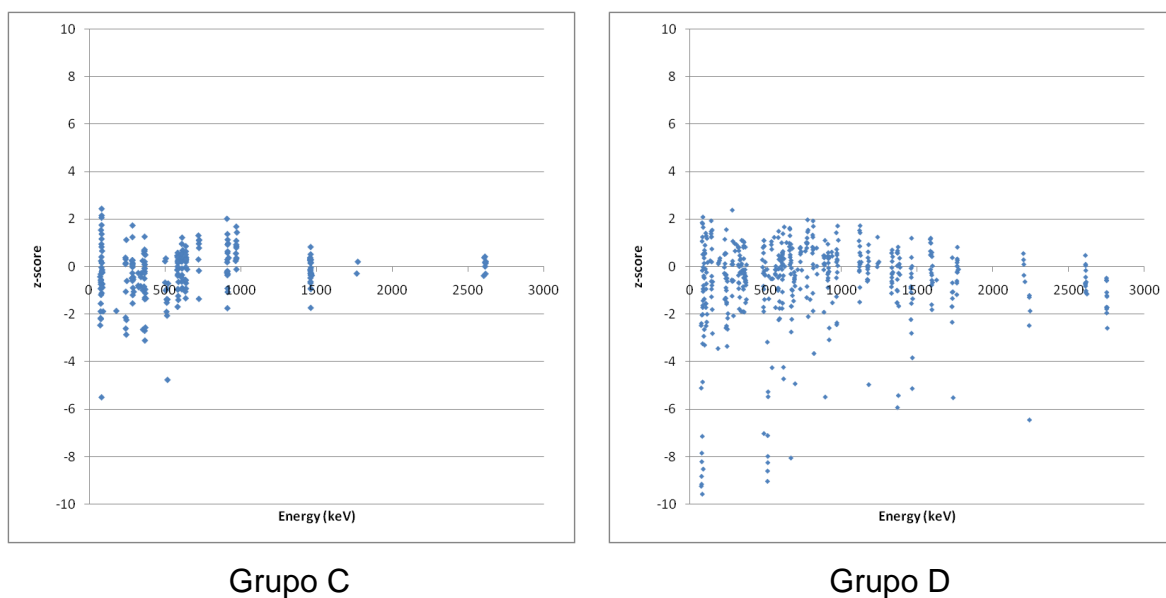


Figura 5.5. Valores de z para as áreas líquidas, na análise dos espectros dos grupos C e D analisados pelo OpenGamma, em comparação com o InterWinner.

5.3 Análise de espectros de teste

A Agência Internacional de Energia Atômica realizou um exercício de intercomparação de códigos para espectrometria gama, descrito em seu documento TEC-DOC-1011 (IAEA, 1998a). O documento inclui espectros de teste com diferentes características, bem como os procedimentos para a execução da análise e os resultados de referência.

O objetivo do documento, além de avaliar softwares já consolidados, é fornecer subsídios para que desenvolvedores de ferramentas para espectrometria possam validar seus próprios aplicativos.

Os espectros são fornecidos em formato ASCII e as contagens estão em 8192 canais, já incluídos os dois canais iniciais que contêm o tempo real (RT) e o tempo útil (LT) de contagem.

A Tabela 5.3 descreve as características dos espectros.

Tabela 5.3. Espectros de teste utilizados na validação de software (IAEA, 1998a).

<i>Nome do arquivo</i>	<i>Características do espectro</i>
ADD1N1.ASC	Soma de dois espectros com ^{226}Ra , um dos quais com deslocamento de 3 canais à direita.
ADD3N1.ASC	Soma de dois espectros com ^{226}Ra , com tempos de contagem de 2000 s e 667 s, o último com deslocamento de 3 canais à direita.
ADD1N3.ASC	Soma de dois espectros com ^{226}Ra , com tempos de contagem de 2000 s e 667 s, o último com deslocamento de 3 canais à esquerda.

O documento fornece os canais correspondentes às principais energias gama presentes, mostrados na tabela seguinte.

Tabela 5.4. Correspondência entre canais e energias gama nos espectros de teste utilizados na validação de software (IAEA, 1998a).

Canal	Energia (keV)
301	122,06
1281	511,00
1661	661,66
2097	834,84
2951	1173,24
3207	1274,54
3353	1332,50

Os gráficos das figuras 5.6, 5.7 e 5.8 apresentam os z-scores correspondentes à comparação das áreas líquidas dos picos obtidas com o OpenGamma e os valores de referência fornecidos no TEC-DOC-1011.

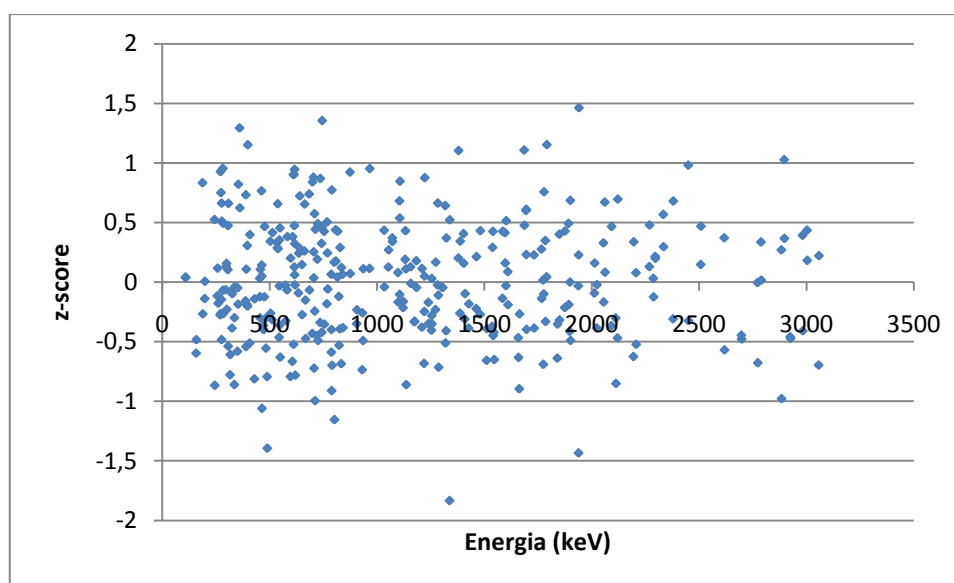


Figura 5.6. Valores de z para as áreas líquidas, na análise do espectro de teste ADD1N1.ASC.

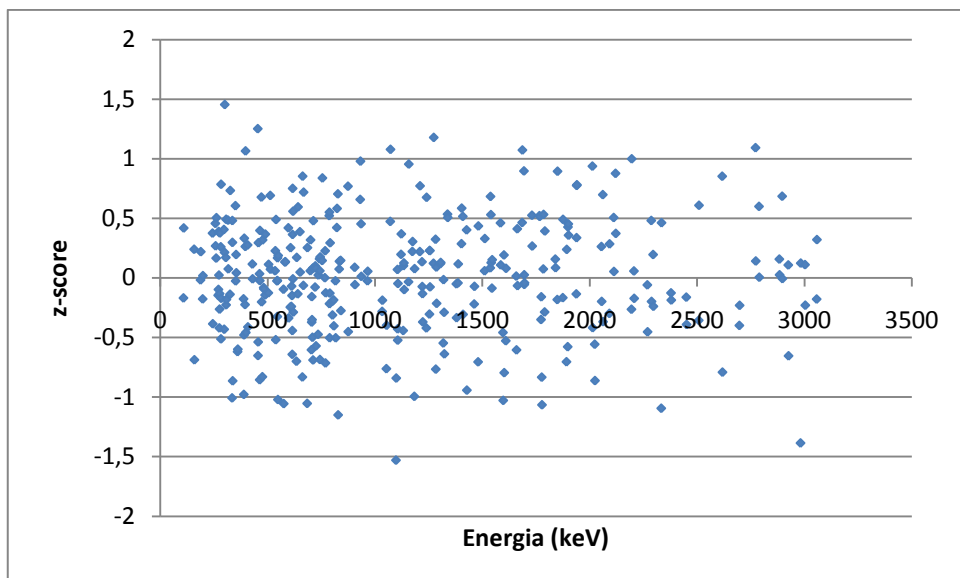


Figura 5.7. Valores de z para as áreas líquidas, na análise do espectro de teste ADD3N1.ASC

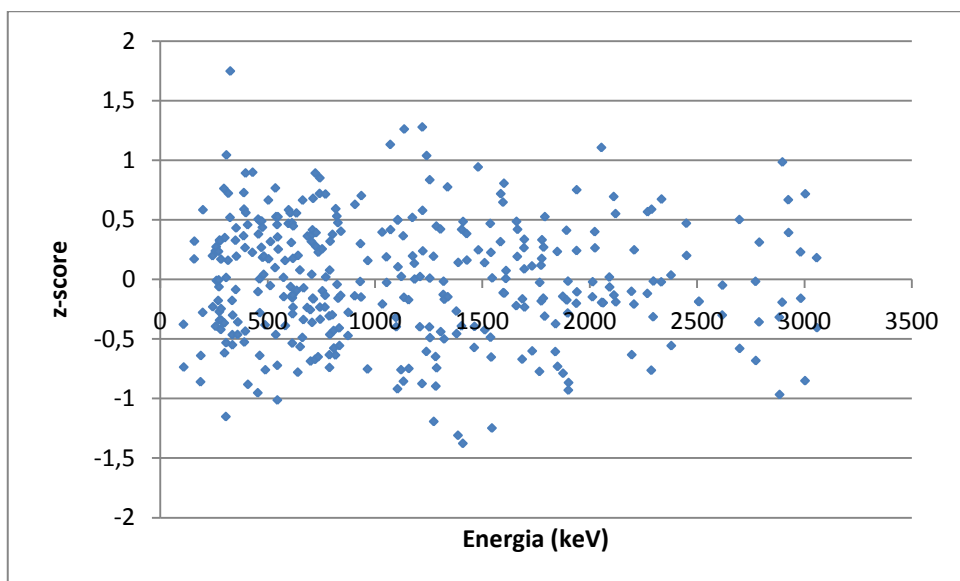


Figura 5.8. Valores de z para as áreas líquidas, na análise do espectro de teste ADD1N3.ASC

6 DISCUSSÃO E CONCLUSÕES

6.1 Validação

Na aplicação do código OpenGamma a espectros de amostras de referência com características bastante distintas, o código mostrou-se robusto e capaz de identificar e resolver particularidades dos espectros.

Na amostra GH (gamma-high) (Figura 5.1), o código discriminou e analisou todos os fotopicos e, com base na função de ajuste de largura, não realizou o ajuste sobre o pico de aniquilação de 511 keV, o que está correto, pois este pico não é utilizado na quantificação de radionuclídeos.

A amostra de espinafre (Figura 5.2) apresenta dois picos bastante pronunciados, de Cs-137 (canal 823) e K-40 (canal 1831). Por essa razão, o pico de Cs-137 aparece superposto a uma linha-base bastante pronunciada, devido ao espalhamento causado pela linha gama do K-40. O código identificou e determinou corretamente o pico de Cs-137 nessas condições.

A amostra de solo (Figura 5.3) apresenta vários pares de fotopicos superpostos, perto dos canais 750, 1000 e 1200. O código identificou e discriminou os picos de cada par, ajustando corretamente a altura de cada componente.

Na comparação com o programa InterWinner (Figuras 5.4 e 5.5), os resultados obtidos com o presente código são consistentes com os obtidos usando esse aplicativo, de acordo com o critério de valores z (z-scores) expresso anteriormente. Não foi observada nenhuma tendência significativa relacionada aos grupos de espectros. No entanto, há certa tendência em se obter valores abaixo de zero, em todos os grupos de espectros.

Observou-se também que a dispersão dos valores de z é mais frequente na metade esquerda dos espectros, de forma geral. Isso indica que alguma revisão nos parâmetros definidos pelo usuário no algoritmo de obtenção da linha base pode ser útil, uma vez que a linha base é, como característica geral de espectros gama, sempre mais elevada na parte esquerda do espectro, que corresponde às energias gama mais baixas. No entanto, o comportamento geral dos valores de z não mostra tendência ou dependência geral com o valor da energia dos picos gama.

Os valores de χ_{red}^2 obtidos para os conjuntos de espectros (Tabela 5.2) dizem respeito à fiabilidade das incertezas reportadas pelo software testado. Valores próximos de 1 indicam bom controle estatístico, menores que 1 indicam super-estimativa das incertezas e maiores que 1 indicam sub-estimativa das mesmas (IAEA, 1998a). Os resultados indicam, portanto, que as incertezas reportadas pelo código OpenGamma podem estar sub-estimadas, especialmente para os espectros dos grupos C e D.

A análise dos espectros de teste da AIEA mostrou dispersão uniforme, mesmo para os espectros sintéticos com desvios intencionalmente incorporados, com valores de z score para a área líquida entre -2 e 2 .

Cabe observar que, como regra geral, a utilização de ferramentas computadorizadas para assistir a análise de dados experimentais deve ser sempre cautelosa e criteriosa, já que ajustes ruins sempre podem ocorrer, seja pela definição de parâmetros inadequados por parte do usuário, como também pela possibilidade de dados problemáticos, causados, por exemplo, por desajustes no sistema de medida durante a contagem do espectro.

Nesse aspecto, a principal vantagem de se ter o resultado de uma análise em forma gráfica prontamente disponível, é permitir até para um analista moderadamente treinado, identificar visualmente espectros problemáticos.

Os resultados obtidos até o momento sugerem que a metodologia desenvolvida no presente trabalho e o código computacional correspondente podem ser usados de forma segura na análise de espectros obtidos por espectrometria gama.

6.2 Contribuição à análise por espectrometria gama

Este projeto de doutoramento é uma contribuição à técnica analítica de espectrometria gama, por meio de desenvolvimento de um aplicativo completo para análise de espectros, apresentando as seguintes características originais:

- Desenvolvimento do código inteiramente com ferramentas computacionais de código livre (open source), incluindo a interface, as bibliotecas matemáticas e a apresentação gráfica dos resultados.
- Disponibilização do código fonte em repositório de software, o que permite a contribuição de toda a comunidade de software livre, tornando o ciclo de desenvolvimento bastante dinâmico.
- O projeto de software foi desenvolvido com o uso de ferramentas multiplataforma, ou seja, o aplicativo pode ser prontamente compilado em diferentes sistemas operacionais, em particular naqueles mais utilizados na atualidade, o Windows e o Linux.
- Utilização de uma nova abordagem no tipo de ajuste da linha-base e na separação de multipletos do espectro.
- O aplicativo oferece como recurso a determinação das incertezas de todos os parâmetros ajustados (largura, centroide, energia e atividade).

6.3 Propostas para trabalhos futuros

O desenvolvimento de um trabalho de pesquisa sempre aponta para novos caminhos e possibilidades em sua área temática. No presente projeto, essa característica é reforçada pelo fato de o desenvolvimento de software ser uma

atividade intrinsecamente dinâmica, o que se traduz no frequente lançamento de novas versões de aplicativos computacionais.

Nesse sentido, são propostas algumas funcionalidades para o aplicativo OpenGamma, a consolidar em trabalhos futuros e em novas versões. Em termos de ferramentas de análise, poder-se-á desenvolver:

- Correção para a radiação de fundo a partir da medida prévia de “brancos”, ou seja, de geometrias com água simulando as matrizes a padronizar.
- Outras opções de funções para o ajuste dos picos, como por exemplo um termo aditivo para a cauda exponencial.
- Correção para decaimento e séries de decaimento.
- Determinação dos pontos para a curva de eficiência diretamente a partir do espectro de medida de fonte de calibração.
- Avaliação da auto-atenuação da radiação gama no próprio volume da amostra, característica importante na determinação de radionuclídeos em amostras suficientemente densas para que esse efeito seja importante.
- Correções decorrentes da diminuição da eficiência causada pela detecção de fótons em coincidência, efeito importante em amostras com emissões gama em cascata (García-Talavera et al, 2002).
- Análise de sensibilidade aos parâmetros de análise.

No que diz respeito à interação com o usuário e com outros aplicativos, podem ser desenvolvidas características como

- Leitura de espectros em formatos de arquivo adicionais empregados em outros aplicativos, especialmente alguns de bastante uso, como o Genie PC (extensão CNF);
- Gravação implementação de formatos de saída de resultados em arquivos de texto (extensão TXT ou DAT) para que o usuário possa, a seu critério, aplicá-los a programas externos de análise e visualização.

- Interfaces em outros idiomas, no sentido de ampliar a comunidade usuária. Nesse sentido, o uso da plataforma *Qt* neste projeto foi apropriado, pois esta inclui uma ferramenta especialmente para esse fim, o *Qt Translator*.

Num horizonte mais distante, a estrutura desenvolvida poderá ser parcialmente aproveitada para a implementação de novas abordagens, como redes neurais, para a identificação de radionuclídeos em espectros complexos.

APÊNDICE A – REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

O levantamento bibliográfico foi feito desde a proposição do trabalho, buscando inicialmente elementos mais gerais aplicáveis à espectrometria gama e ao projeto de software para aplicações científicas e tecnológicas.

Posteriormente, foi identificada e categorizada literatura mais especializada em cada campo no escopo deste projeto. Em virtude da interdisciplinaridade inerente ao desenvolvimento de um código computacional para aplicação científica, a bibliografia obtida foi agrupada nas seguintes áreas:

- Fundamentos teóricos e tecnológicos da determinação de radionuclídeos emissores gama com detectores semicondutores (Gilmore & Hemingway, 1995; Firestone et al, 1996; Bärge Filho, 2000; Knoll, 2000; Gehrke & Davidson, 2005).
- Algoritmos e bibliotecas de funções, incluindo ajustes de funções lineares e não-lineares nos parâmetros a dados experimentais (Gill et al, 1981, Dias et al, 2004; Luca & Morel, 2004; Vanden Berghen & Condor, 2004; Galassi et al, 2007).
- Padrões de projeto de sistemas, programação orientada a objetos, linguagem C++ e boas práticas de programação (Fowler, 2005; Blanchette & Summerfield, 2006).
- Abordagens e metodologias para a análise de espectros (Mariscotti, 1967; Marchand & Marmet, 1983; Kovács, 1996; Piton et al, 2000; Brutscher et al, 2001; García-Talavera et al, 2002; Yoshida et al, 2002; Castro, 2003; Gulam Razul et al, 2003; López-Camacho et al, 2006).
- Conceitos e aplicações de software livre (SLTI, 2004; Ashurst, 2005; Dibbell, 2005; OSTG, 2007)
- Aplicativos para espectrometria gama (Helmer & Putnam, 1972; Ruellan et al, 1995; Aarnio et al, 2001; Sima et al, 2001; ORTEC, 2004; Canberra Inc, 2005; IAEA, 1991; De Lúcia, 2008)

- Padrões e intercomparações internacionais de aplicativos para espectrometria gama (Blaauw et al, 1997; IAEA, 1998a; IAEA, 1998b; Lépy et al, 2001)
- Intercomparações nacionais (Tauhata et al, 2002; PNI-IRD, 2008) e internacionais (Harms & Gilligan, 2009; IAEA, 2009a; IAEA, 2009b) de medidas analíticas para quantificação de radionuclídeos emissores-gama.

APÊNDICE B – LISTA DE ARQUIVOS

<code>./opengamma/directories/directories.cpp</code>
<code>./opengamma/directories/directories.h</code>
<code>./opengamma/languages/languages.cpp</code>
<code>./opengamma/languages/languages.h</code>
<code>./opengamma/maininterface/maininterface.cpp</code>
<code>./opengamma/maininterface/maininterface.h</code>
<code>./opengamma/spectrumform/countspplotterwidget.cpp</code>
<code>./opengamma/spectrumform/countspplotterwidget.h</code>
<code>./opengamma/spectrumform/efficiencyplotterwidget.cpp</code>
<code>./opengamma/spectrumform/efficiencyplotterwidget.h</code>
<code>./opengamma/spectrumform/energyfwhmplotterwidget.cpp</code>
<code>./opengamma/spectrumform/energyfwhmplotterwidget.h</code>
<code>./opengamma/spectrumform/energypicker.cpp</code>
<code>./opengamma/spectrumform/energypicker.h</code>
<code>./opengamma/spectrumform/energypointentry.cpp</code>
<code>./opengamma/spectrumform/energypointentry.h</code>
<code>./opengamma/spectrumform/reports.cpp</code>
<code>./opengamma/spectrumform/reports.h</code>
<code>./opengamma/spectrumform/spectrumform.cpp</code>
<code>./opengamma/spectrumform/spectrumform.h</code>
<code>./opengamma/spectrumform/spectrumformmodels.cpp</code>
<code>./opengamma/spectrumform/spectrumformmodels.h</code>
<code>./opengamma/src/acquisition.h</code>
<code>./opengamma/src/analysisoutput.cpp</code>
<code>./opengamma/src/analysisoutput.h</code>
<code>./opengamma/src/constants.h</code>
<code>./opengamma/src/counts.cpp</code>
<code>./opengamma/src/counts.h</code>
<code>./opengamma/src/gammaspectrumtree.cpp</code>
<code>./opengamma/src/gammaspectrumtree.h</code>

./opengamma/src/genericcalibration.cpp

./opengamma/src/genericcalibration.h

./opengamma/src/main.cpp

./opengamma/src/multiplets.cpp

./opengamma/src/multiplets.h

./opengamma/src/nuclide.cpp

./opengamma/src/nuclide.h

./opengamma/src/peak.h

./opengamma/src/peaklist.cpp

./opengamma/src/peaklist.h

./opengamma/src/sample.cpp

./opengamma/src/sample.h

./opengamma/src/spectrio.cpp

./opengamma/src/spectrio.h

APÊNDICE C – LISTA DE CLASSES

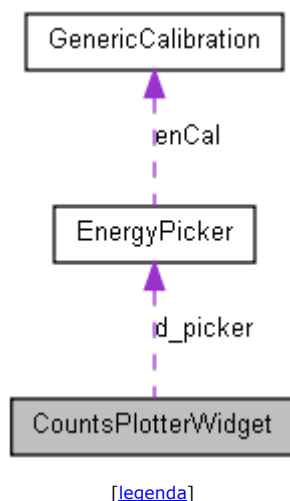
Acquisition	Dados de aquisição do espectro
AnalysisOutput	Saída da análise
Counts	Parâmetros de calibração para vários modelos de ajuste
CountsPlotterWidget	Janela de contagens
DirectoriesDlg	Diálogo de escolha de pastas/diretórios
EfficiencyPlotterWidget	Janela de dados e pontos de eficiência
EnergyFwhmPlotterWidget	Janela de calibração energia / largura
EnergyPicker	Mostrador de energia na tela de contagem
EnergyPointEntry	Entrada de pontos de calibração de energia
GammaList	Lista de Gamas
GammaSpectrumTree	Árvore de lista de gamas
GammaTransition	Transições gama
GenericCalibration	Parâmetros de calibração para vários modelos de ajuste
LanguageDlg	Diálogo de escolha de idioma
MainInterface	Tela principal do aplicativo
Multiplets	Multipletos
Nuclide	Dados de um radionuclídeos
NuclideList	Lista de radionuclídeos
Peak	Dados de um pico
PeakList	Lista de picos
Reports	Geração de relatórios
Sample	Dados da amostra
SpectrumForm	Janela principal de um espectro
SpectrumFormModels	Modelos de dados de um espectro
SpectrumIO	Dados de entrada / saída de um espectro

APÊNDICE D – DIAGRAMAS E MEMBROS DA CLASSE *CountsPlotterWidget*

Referência da Classe *CountsPlotterWidget*

```
#include <countsplotterwidget.h>
```

Diagrama de colaboração para *CountsPlotterWidget*:



[Lista de todos os Membros.](#)

Métodos Públicos

	CountsPlotterWidget (QString &title, Doblst enParms, QWidget *parent=0)
void	setCountsErrBars (Doblst x, Doblst y, Doblst s)
void	setPickerEnCal (Doblst)
void	setupGammasHintsMdl ()
void	fillGammasHintsMdl (QStandardItemModel *from)
void	markCentroids (Doblst cs, Doblst grossHei)
void	markSideBaseLinesExpSimple (PeakList *pks, Multiplets *mts)
void	markSideBaseLinesPoly (PeakList *pks, Multiplets *mts)
void	markSideBaseLinesExpPlusC (PeakList *pks, Multiplets *mts)
void	markInnerBaseLinesCubic (Multiplets *mts)
void	markInnerBaseLinesPeakHeiWei (Multiplets *mts)

Descrição Detalhada

Definição na linha [14](#) do arquivo [countsplotterwidget.h](#).

Construtores & Destrutores

```
CountsPlotterWidget::CountsPlotterWidget ( QString & title,
                                             Doblst enParms,
                                             QWidget * parent = 0
                                             )
```

Definição na linha [5](#) do arquivo [countsplotterwidget.cpp](#).

Métodos

```
void CountsPlotterWidget::fillGammaHintsMdl ( QStandardItemModel * from )
```

Definição na linha [45](#) do arquivo [countsplotterwidget.cpp](#).

```
void CountsPlotterWidget::markCentroids ( Doblst cs,
                                           Doblst grossHei
                                           )
```

Definição na linha [83](#) do arquivo [countsplotterwidget.cpp](#).

```
void CountsPlotterWidget::markInnerBaseLinesCubic ( Multiplets * mts )
```

Definição na linha [192](#) do arquivo [countsplotterwidget.cpp](#).

```
void CountsPlotterWidget::markInnerBaseLinesPeakHeiWei ( Multiplets * mts )
```

Definição na linha [210](#) do arquivo [countsplotterwidget.cpp](#).

```
void CountsPlotterWidget::markSideBaseLinesExpPlusC ( PeakList * pks
                                                       ,
                                                       Multiplets * mts
                                                       )
```

Definição na linha [163](#) do arquivo [countsplotterwidget.cpp](#).

```
void CountsPlotterWidget::markSideBaseLinesExpSimple ( PeakList * pks
                                                       ,
                                                       Multiplets * mts
                                                       )
```

Definição na linha [134](#) do arquivo [countsplotterwidget.cpp](#).

```
void CountsPlotterWidget::markSideBaseLinesPoly ( PeakList * pks
                                                  ,
                                                  Multiplets * mts
                                                  )
```

)

Definição na linha [105](#) do arquivo [countsplotterwidget.cpp](#).

```
void CountsPlotterWidget::setCountsErrBars ( Doblst x
                                             ,
                                             Doblst y
                                             ,
                                             Doblst s
                                             )
```

Definição na linha [75](#) do arquivo [countsplotterwidget.cpp](#).

```
void CountsPlotterWidget::setPickerEnCal ( Doblst a )
```

Definição na linha [29](#) do arquivo [countsplotterwidget.cpp](#).

```
void CountsPlotterWidget::setupGammasHintsMdl ( )
```

Definição na linha [36](#) do arquivo [countsplotterwidget.cpp](#).

A documentação para esta classe foi gerada a partir dos seguintes arquivos:

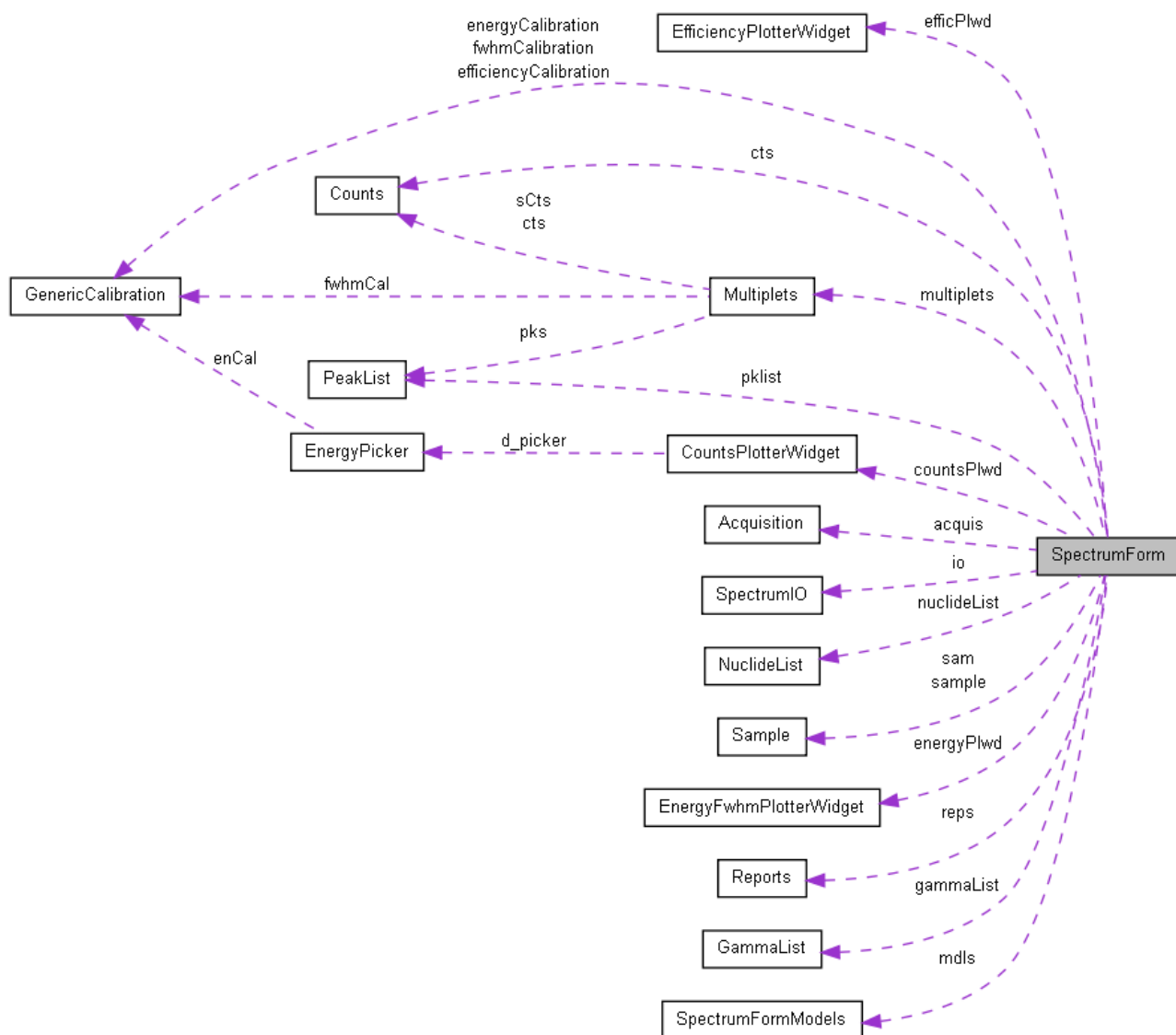
- ./opengamma/spectrumform/[countsplotterwidget.h](#)
- ./opengamma/spectrumform/[countsplotterwidget.cpp](#)

APÊNDICE E – DIAGRAMAS E MEMBROS DA CLASSE

SpectrumForm

```
#include <spectrumform.h>
```

Diagrama de colaboração para SpectrumForm:



[[legenda](#)]

Métodos Públicos

	SpectrumForm (const QString &fna, const QString &anaNucPa,
	~SpectrumForm ()
bool	save ()
void	setNuclideFileName (const QString &nucFileName)

QString	baseName ()
void	setAnalysisNuclidePath (const QString &s)
QString	analysisNuclidePath () const
void	setDefaultAnalysisParmsFields ()
void	analyzeSpectrum ()
QString	userFriendlyCurrentFile ()
QString	currentFile ()
void	displaySampleData ()
void	displayNuclideTable ()
void	setPeakFitsCurves ()
void	setcrvsPkFit ()
void	plotCounts ()
void	plotMultipletsFit ()
void	messageCantPerformFit ()
QString	opengammaResults ()
QList< QList< qreal > >	getOneOgammaSpectrumResults ()
QList< QList< qreal > >	oneOgammaSpectrumResults ()
bool	isFwhmCalib ()
bool	isEnCalib ()
int	nFwhmParms ()
int	nEnParms ()
int	nEffParms ()
Doblst	fwhmParms ()
Doblst	enParms ()
Doblst	effParms ()
qreal	fwhmParm (int i)
qreal	multipletFunction (qreal t, Doblst IP, Doblst rP, Doblst c, Doblst
bool	hasPeaks ()
bool	doEnergyCalib (Doblst xlst, Doblst ylst, Doblst slst, int fTy)
bool	doFwhmCalib (Doblst xlst, Doblst ylst, Doblst slst, int fTy)
bool	doEfficCalib (int p, Doblst xlst, Doblst ylst, Doblst slst)
QString	getFwhmFitParms ()
QString	getOpenGammaResults ()
void	setFwhmParms (Doblst a)
void	setEnergyParms (Doblst a)

void	setDefaultEnergyCalibration ()
void	searchForPeaks ()
int	binFiltGr ()
qreal	pkcut ()
int	sideChannelsSearch ()
qreal	noFwhmOfPeak ()
qreal	noFwhmOfSideBaseline ()
int	baselinePolyGrade ()
qreal	toler ()
int	typeBaseline ()
int	interpolationMethod ()
int	fitStrategy ()

Atributos Públicos

Counts *	cts
Sample *	sam
PeakList *	pklist
GenericCalibration *	energyCalibration
GenericCalibration *	fwhmCalibration
GenericCalibration *	efficiencyCalibration
Multiplets *	multiplets
Reports *	reps

Descrição Detalhada

Definição na linha [47](#) do arquivo [spectrumform.h](#).

Construtores & Destrutores

```
SpectrumForm::SpectrumForm ( const QString & fna,
                             const QString & anaNucPa
                             ,
                             const QString & calNucPa,
                             Counts * counts,
                             SpectrumIO * io
                             )
```

Definição na linha [29](#) do arquivo [spectrumform.cpp](#).

```
SpectrumForm::~SpectrumForm ( )
```

Definição na linha [151](#) do arquivo [spectrumform.cpp](#).

Métodos

QString SpectrumForm::analysisNuclidePath () const [inline]

Definição na linha [63](#) do arquivo [spectrumform.h](#).

void SpectrumForm::analyzeSpectrum ()

Definição na linha [384](#) do arquivo [spectrumform.cpp](#).

int SpectrumForm::baselinePolyGrade () [inline]

Definição na linha [130](#) do arquivo [spectrumform.h](#).

QString SpectrumForm::baseName () [inline]

Definição na linha [60](#) do arquivo [spectrumform.h](#).

int SpectrumForm::binFiltGr () [inline]

Definição na linha [125](#) do arquivo [spectrumform.h](#).

QString SpectrumForm::currentFile () [inline]

Definição na linha [68](#) do arquivo [spectrumform.h](#).

void SpectrumForm::displayNuclideTable ()

void SpectrumForm::displaySampleData ()

Definição na linha [421](#) do arquivo [spectrumform.cpp](#).

```
bool SpectrumForm::doEfficCalib ( int      p,
                                Doblst  xlst
                                ,
                                Doblst  ylst
                                ,
                                Doblst  slst
                                )
```

Definição na linha [586](#) do arquivo [spectrumform.cpp](#).

```
bool SpectrumForm::doEnergyCalib ( Doblst  xlst
                                   ,
                                   Doblst  ylst
                                   ,
                                   Doblst  slst
                                   ,
                                   int     fTy
```

)

Definição na linha [566](#) do arquivo [spectrumform.cpp](#).

```
bool SpectrumForm::doFwhmCalib ( Doblst  xlst
                                ,
                                Doblst  ylst
                                ,
                                Doblst  slst
                                ,
                                int     fTy
                                )
```

Definição na linha [578](#) do arquivo [spectrumform.cpp](#).

```
Doblst SpectrumForm::effParms ( ) [inline]
```

Definição na linha [92](#) do arquivo [spectrumform.h](#).

```
Doblst SpectrumForm::enParms ( ) [inline]
```

Definição na linha [91](#) do arquivo [spectrumform.h](#).

```
int SpectrumForm::fitStrategy ( ) [inline]
```

Definição na linha [135](#) do arquivo [spectrumform.h](#).

```
qreal SpectrumForm::fwhmParm ( int i ) [inline]
```

Definição na linha [94](#) do arquivo [spectrumform.h](#).

```
Doblst SpectrumForm::fwhmParms ( ) [inline]
```

Definição na linha [90](#) do arquivo [spectrumform.h](#).

```
QString SpectrumForm::getFwhmFitParms ( )
QList< QList< qreal > > SpectrumForm::getOneOgammaSpectrumResults ( )
```

Definição na linha [442](#) do arquivo [spectrumform.cpp](#).

```
QString SpectrumForm::getOpenGammaResults ( )
bool SpectrumForm::hasPeaks ( ) [inline]
```

Definição na linha [109](#) do arquivo [spectrumform.h](#).

```
int SpectrumForm::interpolationMethod ( ) [inline]
```

Definição na linha [134](#) do arquivo [spectrumform.h](#).

```
bool SpectrumForm::isEnCalib ( ) [inline]
```

Definição na linha [85](#) do arquivo [spectrumform.h](#).

```
bool SpectrumForm::isFwhmCalib ( ) [inline]
```

Definição na linha [84](#) do arquivo [spectrumform.h](#).

```
void SpectrumForm::messageCantPerformFit ( )
```

Definição na linha [414](#) do arquivo [spectrumform.cpp](#).

```
qreal SpectrumForm::multipletFunction ( qreal t,
                                         Doblst IP,
                                         Doblst rP,
                                         /
                                         Doblst c,
                                         Doblst a,
                                         Doblst k
                                         )
int SpectrumForm::nEffParms ( ) [inline]
```

Definição na linha [89](#) do arquivo [spectrumform.h](#).

```
int SpectrumForm::nEnParms ( ) [inline]
```

Definição na linha [88](#) do arquivo [spectrumform.h](#).

```
int SpectrumForm::nFwhmParms ( ) [inline]
```

Definição na linha [87](#) do arquivo [spectrumform.h](#).

```
qreal SpectrumForm::noFwhmOfPeak ( ) [inline]
```

Definição na linha [128](#) do arquivo [spectrumform.h](#).

```
qreal SpectrumForm::noFwhmOfSideBaseline ( ) [inline]
```

Definição na linha [129](#) do arquivo [spectrumform.h](#).

```
QList< QList< qreal > > SpectrumForm::oneOgammaSpectrumResults ( )
```

Definição na linha [591](#) do arquivo [spectrumform.cpp](#).

```
QString SpectrumForm::opengammaResults ( )
qreal SpectrumForm::pkcut ( ) [inline]
```

Definição na linha [126](#) do arquivo [spectrumform.h](#).

void SpectrumForm::plotCounts ()

Definição na linha [482](#) do arquivo [spectrumform.cpp](#).

void SpectrumForm::plotMultipletsFit ()
bool SpectrumForm::save ()

Definição na linha [177](#) do arquivo [spectrumform.cpp](#).

void SpectrumForm::searchForPeaks ()

Definição na linha [343](#) do arquivo [spectrumform.cpp](#).

void SpectrumForm::setAnalysisNuclidePath (const QString & s) [inline]

Definição na linha [62](#) do arquivo [spectrumform.h](#).

void SpectrumForm::setcrvsPkFit ()
void SpectrumForm::setDefaultAnalysisParmsFields ()

Definição na linha [631](#) do arquivo [spectrumform.cpp](#).

void SpectrumForm::setDefaultEnergyCalibration ()

Definição na linha [334](#) do arquivo [spectrumform.cpp](#).

void SpectrumForm::setEnergyParms (Doblst a)
void SpectrumForm::setFwhmParms (Doblst a)
void SpectrumForm::setNuclideFileName (const QString & nucFileName)

Definição na linha [195](#) do arquivo [spectrumform.cpp](#).

void SpectrumForm::setPeakFitsCurves ()
int SpectrumForm::sideChannelsSearch () [inline]

Definição na linha [127](#) do arquivo [spectrumform.h](#).

qreal SpectrumForm::toler () [inline]

Definição na linha [131](#) do arquivo [spectrumform.h](#).

int SpectrumForm::typeBaseline () [inline]

Definição na linha [133](#) do arquivo [spectrumform.h](#).

QString SpectrumForm::userFriendlyCurrentFile ()

Definição na linha [201](#) do arquivo [spectrumform.cpp](#).

Atributos

[Counts](#)* **[SpectrumForm::cts](#)**

Definição na linha [96](#) do arquivo [spectrumform.h](#).

[GenericCalibration](#)* **[SpectrumForm::efficiencyCalibration](#)**

Definição na linha [101](#) do arquivo [spectrumform.h](#).

[GenericCalibration](#)* **[SpectrumForm::energyCalibration](#)**

Definição na linha [99](#) do arquivo [spectrumform.h](#).

[GenericCalibration](#)* **[SpectrumForm::fwhmCalibration](#)**

Definição na linha [100](#) do arquivo [spectrumform.h](#).

[Multiplets](#)* **[SpectrumForm::multiplets](#)**

Definição na linha [102](#) do arquivo [spectrumform.h](#).

[PeakList](#)* **[SpectrumForm::pklist](#)**

Definição na linha [98](#) do arquivo [spectrumform.h](#).

[Reports](#)* **[SpectrumForm::reps](#)**

Definição na linha [103](#) do arquivo [spectrumform.h](#).

[Sample](#)* **[SpectrumForm::sam](#)**

Definição na linha [97](#) do arquivo [spectrumform.h](#).

A documentação para esta classe foi gerada a partir dos seguintes arquivos:

- C:/Users/Marcelo/Documents/Programas/opengamma/spectrumform/[spectrumform.h](#)
- C:/Users/Marcelo/Documents/Programas/opengamma/spectrumform/[spectrumform.c](#)
[pp](#)

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AARNIO, P.A.; NIKKINEN, M.T.; ROUITTI, J.T. UNISAMPO, comprehensive software for gamma-spectrum processing. *J. Radional. Nucl. Chem.* 248(2), 371-375 (2001).
- ASHURST, M. Brazil falls in love with Linux. BBC News UK Edition. London, 01 Fev. 2005. Disponível em: <<http://news.bbc.co.uk/1/hi/business/3445805.stm>>. Acesso em: 09 mar. 2005.
- BÄRG FILHO, D. **Aquisição de Dados em Espectroscopia Gama Nuclear**. 2000. Dissertação (Mestrado) – Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, São Paulo.
- BLAAUW, M.; FERNANDEZ, V.O.; ESPEN, P.; BERNASCONI, G. NOY, R.C.; DUNG, H.M.; MOLLA, N.I. The 1995 IAEA intercomparison of gamma-ray spectrum analysis software. *Nucl. Inst. Meth. Phys. Res. A* 387, 416 (1997).
- BLANCHETTE, J.; SUMMERFIELD, M. **C++ GUI programming with Qt 4**. Prentice Hall (2006).
- BRANDL, M. **The Compton effect**. Michigan State University, 2000. (MISN-0-219) Disponível em: <http://35.9.69.219/home/modules/pdf_modules/m219.pdf>. Acesso em 25 abr. 2007
- BRUTSCHER, J.; ARLT, R.; CZOCK, K.H. Isotope identification software for gamma spectra taken with CdZnTe detectors. *Nucl. Inst. Meth. Phys. Res. A* 458, 189-195 (2001)
- CANBERRA INC. Genie 2000 Gamma Analysis Software. Disponível em: <http://www.canberra.com/pdf/Products/SW_pdf/5gamma.pdf>. Acesso em 23 fev. 2005.

- CASTRO, R.M. **Transformando o ^{152}Eu em um padrão de calibração de eficiência para detecção de gamas**. 2003. Tese (Doutorado) – Instituto de Física da Universidade de São Paulo.
- DE LÚCIA, S.R. **Desenvolvimento de um software de espectrometria gama para análises por ativação com nêutrons utilizando o conceito de código livre**. 2008. Dissertação (Mestrado) – Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, São Paulo.
- DIAS, M.S.; CARDOSO, V.; VANIN, V.R.; KOSKINAS, M.F. Combination of nonlinear function and mixing method for fitting HPGe efficiency curve in the 59– 2754 keV energy range. **Appl. Radiat. Isot.** 60, 683-687 (2004).
- DIBBELL, J. We pledge allegiance to the penguin. Wired Magazine, Nov. 2004. Disponível em: <<http://www.wired.com/wired/archive/12.11/linux.html>>. Acesso em: 07 fev. 2005.
- EVANS, R.D. **The Atomic Nucleus**, New York, N.Y.: McGraw-Hill, 1955
- FIRESTONE, R.B; SHIRLEY, V.S.; BAGLIN, C.M.; FRANK CHU, S.Y.; ZYPKIN, J. **Table of Isotopes, 8th Edition**. John Wiley, 1996.
- FOWLER, M. **UML essencial: um breve guia para a linguagem-padrão de modelagem de objetos. 3^a. ed.** Porto Alegre: Bookman, 2005.
- FREE SOFTWARE FOUNDATION. GNU General Public License Version 3. Disponível em: <<http://www.gnu.org/licenses/gpl.html>>. Acesso em: 28 out. 2009.
- GALASSI, M.; DAVIES, J.; THEILER, J.; GOUGH, B.; JUNGMAN, G.; BOOTH, M.; ROSSI, F. **GNU scientific library reference manual, 2nd ed.** (ISBN 0954161734). Disponível em: <<http://www.gnu.org/software/gsl/>>. Acesso em: 18 abr. 2007.
- GARCÍA-TALAVERA, M.; LAEDERMANN, J.P.; DÉCOMBAZ, M.; DAZA, M.J. QUINTANA, B. Coincidence summing corrections for the natural decay series in gamma-ray spectrometry. **Appl. Radiat. Isot.** 56, 105 (2002).
- GEHRKE, R.J.; DAVIDSON, J.R. Acquisition of quality gamma-ray spectra with HPGe spectrometers. **Appl. Radiat. Isot.** 62, 479-499 (2005).

- GILL, P.R.; MURRAY, W.; WRIGHT, M.H. The Levenberg-Marquardt Method. In: ***Practical Optimization***. Academic Press, London, 1981.
- GILMORE, G.; HEMINGWAY, J.D. ***Practical gamma-ray spectrometry***. John Wiley, 1995.
- GULAM RAZUL, S.; FITZGERALD, W.J.; ANDRIEU, C.; Bayesian model selection and parameter estimation of nuclear emission spectra using RJMCMC. ***Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A*** 497, 492-510 (2003).
- HARMS, A.; GILLIGAN, C. ***Environmental Radioactivity Proficiency Text Exercise 2008***. Teddington: National Physical Laboratory, May 2009. (NPL Report IR 15)
- HELMER, R.G.; PUTNAM, M.H. ***Gauss V, a computer program for the analysis of gamma-ray spectra from Ge(Li) spectrometers***. Idaho Falls, Aerojet Nuclear Company, Jan. 1972. (ANCR-1043)
- IAEA: INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY. ***Nuclear Analysis Software – Part 2: Gamma Spectrum Analysis, Activity Calculations and Neutron Activation Analysis (GANAAS)***. Vienna, 1991.
- IAEA: INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY. ***Intercomparison of gamma ray analysis software packages***. IAEA-TECDOC-1011. Vienna, 1998a.
- IAEA: INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY. ***Software for nuclear spectrometry***. IAEA-TECDOC-1049. Vienna, 1998b.
- IAEA: INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY. ***Reference Sheet – Certified Reference Material IAEA-330 – Radionuclides in Spinach***. Vienna, 2009a.
- IAEA: INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY. ***Worldwide open proficiency test on the determination of radionuclides in spinach, soil and water***. IAEA-CU-2007-03. Vienna, 2009b. (IAEA/AQ/8)
- IEC: INTERNATIONAL ELECTROTECHNICAL COMMISSION. ***Nuclear Instrumentation – MCA Histogram Data Interchange Format for Nuclear Spectroscopy***. IEC 1455. Geneva, 1995.

- KNOLL, G.F. **Radiation detection and measurement, 3rd Edition**. John Wiley, New York, 2000.
- KOVÁCS, Z.L. **Redes neurais artificiais – fundamentos e aplicações**. Edição Acadêmica, São Paulo, 1996.
- LÉPY, M.C.; ALTZITZOGLU, T.; ARNOLD, D.; BRONSON, F.; CAPOTE NOY, R.; DÉCOMBAZ, M.; DE CORTE, F.; EDELMAIER, R.; HERRERA PERAZA, E.; KLEMOLA, S.; KORUN, M.; KRALIK, M.; NEDER, H.; PLAGNARD, J.; POMMÉ, S.; DE SANOIT, J; SIMA, O.; UGLETVEIT, F.; VAN VELZEN, L.; VIDMAR, T. Intercomparison of efficiency transfer software for gamma-ray spectrometry. **Appl. Radiat. Isot.** 55(4), 493-503 (2001).
- LÓPEZ-CAMACHO, E.; GARCÍA-CORTÉS, A.; PALACIO, C. A family of smoothing algorithms for electron and other spectroscopies based on the Chebyshev filter. **Thin Solid Films** 513, 72-77 (2006).
- LUCA, A.; MOREL, J. Influence of the background approximation methods on the analysis of gamma-ray spectra. **Appl. Radiat. Isot.** 60, 233-237 (2004).
- MÁDUAR, M. F.; PECEQUILO, .B. R. S. Open source implementation of an algorithm for photopeaks search and analysis in gamma-ray spectrometry with semiconductor detectors. In: IX INTERNATIONAL ATLANTIC NUCLEAR CONFERENCE, Sept. 27 – Oct. 2, 2009, Rio de Janeiro, Brazil. **Proceedings...** Rio de Janeiro: Blumen Design, 2009. 1 DVD.
- MARCHAND, P.; MARMET, L. Binomial smoothing filter: A way to avoid some pitfalls of least-squares polynomial smoothing. **Rev. Sci. Instrum.** 54, 1034-1041 (1983).
- MARISCOTTI, M.A.J. A method for automatic identification of peaks in the presence of background and its application to spectrum analysis. **Nucl. Instr. Meth** 50, 1967.
- NSIS. **NSIS Wiki**. Disponível em: <<http://nsis.sourceforge.net>>. Acesso em: 04 out. 2009.
- ORTEC. INTERWINNER™ 6.0 MCA **Emulation, Data Acquisition and Analysis software for gamma and alpha spectroscopy** IW-B32 2004. Oak Ridge, TN, USA, 2004.

OSTG: OPEN SOURCE TECHNOLOGY GROUP. SourceForge.net. Disponível em: <<http://www.sourceforge.net>>. Acesso em: 18 abr. 2007.

PECEQUILO, B. R. S. ***Nova Técnica para Determinação de Impurezas em Compostos de Urânio e de Tório pela Análise dos Raios Gama de Captura***. 1978. Tese (Doutorado) – Instituto de Energia Atômica, São Paulo. (IEA-DT-078)

PITON, F.; LÉPY, M.-C.; BÉ, M.-M.; PLAGNARD, J. Efficiency transfer and coincidence summing corrections for gamma-ray spectrometry. ***Appl. Radiat. Isot.*** 52, 791-795 (2000).

PNI – IRD. Programa Nacional de Intercomparação de Resultados de Análises de Radionuclídeos em Amostras Ambientais. Rodadas de abril/1997 a dezembro/2008.

RUELLAN, H.; LÉPY, M.-C.; PLAGNARD, J. ***Présentation du logiciel 'Colegram'***. Note Technique LPRI/95/016, SEA, Saclay, France (1995).

SIMA, O.; ARNOLD, D.; DOVLETE, C. GESPECOR: a versatile tool in gamma-ray spectrometry. ***J. Radioanal. Nucl. Chem.*** 248 (2), 359-364 (2001).

SLTI: SECRETARIA DE LOGÍSTICA E TECNOLOGIA DA INFORMAÇÃO -- MINISTÉRIO DO PLANEJAMENTO, ORÇAMENTO E GESTÃO. Guia livre – Referência de migração para software livre do Governo Federal. Brasília, 2004.

TAUHATA, L.; VIANNA, M.E.C.; OLIVEIRA, A.E.; FERREIRA, A.C.M.; CONCEIÇÃO, C.C.S. Metrological capability of the Brazilian laboratories of analyses of radionuclides in environmental samples. ***Appl. Radiat. Isot.*** 56, 409-414 (2002).

VANDEN BERGHEN, F. ***CONDOR: A constrained, non-linear, derivative-free parallel optimizer for continuous, high computing load, noisy objective functions***. 2004. Tese (Doutorado) – Université Libre de Bruxelles.

YOSHIDA, E; SHIZUMA, K; ENDO, S; OKA, T. Application of neural networks for the analysis of gamma-ray spectra measured with a Ge spectrometer. ***Nucl. Instr. and Meth. A*** 484, 557-563 (2002).