MINISTÉRIO DA CIÊNCIA E TECNOLOGIA
INSTITUTO DE PESQUISAS ESPACIAIS

AUTORIZAÇÃO PARA PUBLICAÇÃO
AUTHORIZATION FOR PUBLICATION

PALAVRAS CHAVES/KEY WORDS

AUTORES/AUTHORS

GEOFÍSICA NUCLEAR
ESPECTROMETRIA NUCLEAR
TRATAMENTO DE DADOS

AUTORIZADA POR/AUTHORIZED BY

Marco Antonio Raupp
Diretor Geral

AUTOR RESPONSAVEL
RESPONSIBLE AUTHOR

Enio Bueno Pereira

DISTRIBUIÇÃO/DISTRIBUTION

- [ ] INTERNA / INTERNAL
- [x] EXTERNA / EXTERNAL
- [ ] RESTRITA / RESTRICTED

REVISADA POR / REVISED BY

Severino L. G. Dutra

CDU/UDC

550.3:539.1

DATA / DATE

Julho, 1987

PUBLICAÇÃO Nº
PUBLICATION NO

INPE-4234-PRE/1109

ORIGEM
ORIGIN

DGA

PROJETO
PROJECT

LABGN

Nº DE PAG.
NO OF PAGES

16

ULTIMA PAG.
LAST PAGE

14

VERSÃO
VERSION

Nº DE MAPAS
NO OF MAPS

TÍTULO/TITLE

MATEMÁTICA APLICADA À GEOFÍSICA NUCLEAR

AUTORES/AUTHORSHIP

Enio Bueno Pereira
Daniel J.R. Nordemann

RESUMO - NOTAS / ABSTRACT - NOTES

Uma das ferramentas mais poderosas da Geofísica Nuclear é a obtenção e interpretação dos espectros de radiações alfa e gama. Discute-se, neste trabalho de maneira qualitativa, o problema de perda de informação devida à introdução de ruído no processo de codificação da informação. O processo de decodificação deve ser suprido de um modelo adequado do sistema de medida para restituir a contento a informação sobre a fonte nuclear.

OBSERVAÇÕES / REMARKS

Este trabalho foi parcialmente financiado pelo "Fundo Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico" através do Contrato FINEP 537/CT.
Trabalho apresentado no II Encontro Regional de Matemática Aplicada e Computacional, S.J.Campos, 18 a 20 de maio de 1987.

MATEMÁTICA APLICADA À GEOFÍSICA NUCLEAR

Enio Bueno Pereira e D.J.R. Nordemann

Instituto de Pesquisas Espaciais - INPE
12201 - São José dos Campos, SP

RESUMO

Uma das ferramentas mais poderosas da Geofísica Nuclear é a obtenção e interpretação dos espectros de radiações alfa e gama. Discute-se, neste trabalho de maneira qualitativa, o problema de perda de informação devida à introdução de ruído no processo de codificação da informação. O processo de decodificação deve ser suprido de um modelo adequado do sistema de medida para restituir a contento a informação sobre a fonte nuclear.

INTRODUÇÃO

A Geofísica Nuclear é uma ciência nova. Ela existe talvez desde os tempos da descoberta do elemento químico rádio pelo casal Curie. Contudo, só recentemente tem sido encarada com a personalidade própria que merece. Existe ainda muita controvérsia sobre a sua área de abragência mas não cabe aqui chegar até esses detalhes polêmicos.

De maneira simples, a Geofísica Nuclear é a aplicação das técnicas da Física Nuclear ao estudo da Terra e dos planetas. Ela é empregada tanto nos campos de petróleo, para determinação da porosidade dos sedimentos com vistas em avaliar a capacidade de armazenamento de um possível depósito, como em estudar a composição de elementos radioativos primordiais nas superfícies dos planetas terrestres e da lua. O seu leque de abragência é, de fato, muito grande e interdisciplinar. Contudo sua ferramenta básica ainda reside em grande parte na obtenção de espectros de radiações gama e alfa em diversos tipos de fontes. A análise e interpretação de espectros desse tipo é o assunto que será discutido de maneira bastante qualitativa neste trabalho.

A idéia de escrever este trabalho veio a baila a partir de um experimento malsucedido, mas que evidenciou o problema da análise de espectros de radiação, que atinge grande parte da comunidade da Geofísica Nuclear. Ocorreu quando se estudava, por intermédio da técnica da Ativação Neutrônica, amostras de sedimentos antigos no intuito de localizar a presença do elemento irídio (^{192}Ir) de origem extraterrestre[1]. Os espectros de radiação gama produzidos eram de tão baixa estatística que praticamente nada se podia constatar pela simples visualização dos dados. A aplicação de alguns pacotes de programas de análise espectral levaram a resultados altamente discordantes. Contudo, em alguns casos, tinha-se a certeza da presença do fotopico de 468 keV do ^{192}Ir na amostra. O problema foi parcialmente resolvido aplicando um pacote de programas denominado HYPERMET, especificamente formulado para o tipo de detetor empregado nas medidas e para baixa estatística de contagens. Infelizmente, mais tarde, constatou-se que mesmo esse programa tinha sido empregado com insuficiente informação inicial sobre o sistema.

ANÁLISE DE ESPECTROS NUCLEARES

O processo de análise de espectros nucleares nada mais é do que a extração das informações sobre a fonte nuclear, contidas nesse espectro. Essas informações podem ser diversas mas em Geofísica Nuclear sempre podem ser reduzidas à restituição da intensidade e da energia das radiações da fonte.

É conveniente, para melhor compreender o processo de extração das informações, dividir a seqüência de operações que vão da fonte nuclear ao algoritmo matemático de análise espectral em três partes principais como mostra a Figura 1.

FIGURA 1

A mensagem representa as energias e intensidades das fontes nucleares que se almeja conhecer. O detetor transforma a radiação incidente em um sinal analógico, através de alguma propriedade física ou química sua que, por sua vez, é digitalizado e arquivado pela eletrônica associado. Isto convenciona-se como o processo de codificação de mensagem. Finalmente, o analista emprega um algoritmo em seu computador para decodificar a mensagem, restituindo assim a informação.

O problema, como mostrado no diagrama de blocos da Figura 1, parece bastante simples e, de fato, o seria não fosse a degeneração da mensagem no processo de codificação. Essa degeneração torna o processo de decodificação inviável. O resultado é geralmente desastroso e leva à desconfortável situação de obter uma vasta gama de valores para uma mesma fonte em intercomparações de diversos programas de análise espectral. Essa gama é ainda maior caso se empreguem tipos diferentes de codificadores. A Tabela 1 mostra, a título de exemplo, os valores de concentração (intensidade) dos elementos radioativos naturais, urânio, tório e potássio (energias) no padrão geoquímico internacional W-1, medidos nos mais conceituados laboratórios do mundo.

TABELA 1

A degeneração da mensagem durante o processo de codificação tem um número enorme de origens que não poderiam ser todas listadas aqui sem correr o risco de tornar a leitura deste texto entediante. Uma das principais origens reside no próprio detetor de radiação.

O DETETOR NUCLEAR COMO FONTE DE RUÍDO

Cada tipo de radiação nuclear é medida empregando um tipo específico de detetor, de maneira que, para resumir a discussão, estuda-se o caso do detetor de radiação gama de NaI(Tℓ) cujo princípio de funcionamento é mostrado na Figura 2 [2].

FIGURA 2

O detetor de NaI(Tℓ) responde essencialmente aos elétrons rápidos produzidos em seu interior pela interação dos fótons de radiação gama com o cristal de NaI(Tℓ). Como pode ser visto na Figura 2, o processo de conversão dos fótons de energia gama em elétrons rápidos não é sempre completo de modo que existe uma distribuição contínua (ruído) no espectro de radiação medido associado a cada radiação monoenergética gama da fonte. Essa distribuição denomina-se Colina Compton. Desprezando uma série de outros fenômenos que podem ocorrer simultaneamente, o espectro nuclear produzido por esse detetor em resposta a uma fonte nuclear monoenergética é ilustrado na Figura 3.

FIGURA 3

A degeneração da mensagem inicia-se, portanto, no próprio fenômeno físico de interação da radiação gama monoenergética com o detetor, introduzindo o ruído que leva o espectro ideal de A para C. Adicionalmente, o conjunto detetor-eletrônica (codificador), ao converter a energia dos elétrons rápidos em um pulso elétrico que será digitalizado e armazenado, introduz mais ruído. Esse ruído tem como resultado final a propriedade de alongar a raia monoenergética de radiação gama mostrada na Figura 3 (A e B). Esse efeito é conhecido como função resposta $\phi(E)$ do codificador. O espectro resultante é o resultado da convolução do espectro de elétrons rápidos $g(E)$ com a função resposta do codificador $\phi(E)$:

$$f(E_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(E_0-x)\ \phi(x)\ dx \qquad (1)$$

que resulta na forma final do espectro mostrado na Figura 3(C). É essa forma que terá de ser decodificada para restituir a informação da fonte nuclear.

O MODELO PARA O DECODIFICADOR

No contexto bastante amplo da teoria da informação[8], o número de informações máximo necessário para a identificação de uma mensagem complexa é dada pela função entropia da fonte:

$$\varepsilon = - \sum_{i=1}^{n} P_i \log_a P_i, \qquad (2)$$

onde n é o número de mensagens (energias da fonte nuclear) e P_i é a probabilidade da ocorrência de cada mensagem (constantes de decaimento). Empregando a base do logaritmo, a=2, tem-se a entropia dada em bits de informação por tipo de mensagem. Por exemplo, uma fonte nuclear que emita 10 energias distintas de mesma intensidade (mesma probabilidade de P_i) necessitará de no máximo 3,3 bits/energia para sua codificação no sistema binário.

A adição de ruído no codificador ocasionará perda de informação devida ao aumento da entropia total do sistema. A informação mútua resultante do processamento do sinal, que é diretamente acessível ao decodificador, é dada pela diferença:

$$I = \varepsilon_f - \varepsilon_f^r . \qquad (3)$$

onde ε_f^r representa a informação perdida devido ao ruído.

Exemplificando, toma-se o caso onde o ruído no codificador do exemplo anterior é tal que somente metade da mensagem de cada uma das energias da fonte é codificada corretamente, a restante é distribuída igualmente por todo o espectro. Resolvendo a equação (2) para ε_f^r e substituindo-a em (3) obtém-se I = 0,7 bits/energia. Neste modo, 79% dos 3,3 bits/energia originais são perdidos devido ao ruído, e não 50% como intuitivamente parecia ser o caso.

É essa informação "perdida" no processo de codificação que deve ser fornecida de volta ao decodificador para restituir a informação da mensagem original. Contudo, essa informação foi perdida de fato e não está mais disponível.

Nesse ponto, entra o papel do modelo para o decodificador. O modelo é portanto uma simulação adequada da informação perdida e dela depende totalmente a correta decodificação. A Figura 1 indica como opera o modelo. O analista recolhe informações de seu sistema, tais como: fontes de ruído, desvios sistemáticos, função resposta do detetor, etc., e confecciona o modelo que irá simular aproximadamente ε_f^r. O modelo pode também,em alguns poucos casos, atuar em tempo real com o codificador. É o caso dos sistemas ativos de anticoincidência para eliminação da Colina Compton dos espectros.

É extremamente importante lembrar aqui que é impossível melhorar a relação sinal-ruído de uma mensagem por qualquer que seja o algoritmo matemático empregado. Isso corresponde à transgressão de uma lei básica da estatística que diz que a entropia é irreversível. Sem o emprego do modelo, a relação sinal-ruído só pode aumentar.

Isso coloca todos os processos de alisamento de espectros,filtros de deconvolução, ajustes polinomiais na categoria de métodos apenas auxiliares.

Pode-se ver agora, mais detalhadamente, o efeito ilusório que tem o alisamento de um espectro na sua relação sinal-ruído. Para isso,recorre-se à transformação do espectro de energia em espectro de freqüência como ilustra qualitativamente a Figura 4, através de uma transformação de Fourier.

O efeito de alisamento de um espectro nuclear (Figura 4-A) corresponde à aplicação de um filtro passa-baixa no espectro de freqüências (Figura 4-B).

FIGURA 4

Com o corte em freqüências mais altas a curva 1 da Figura 4-B passa a ter o aspecto da curva 2. Isso, no espectro correspondente de energia da Figura 4-A corresponde a um alongamento do pico (curva 1 para 2) ou se

ja, uma perda de resolução. Perda de resolução para o espectroscopista significa aumento de ruído, logo, a operação de alisamento não representou uma melhora efetiva na relação sinal-ruído.

A simulação de ε_f^r é feita em inúmeros pacotes de programas de computador como os indicados na Tabela 2 atualmente em uso em diversos laboratórios de Geofísica. Esses programas são bastante sofisticados em sua estrutura, mas todos partem do princípio que o pesquisador deve ter uma idéia bem fundamentada do tipo de equipamento que está usando e do tipo de experimento que está realizando para poder fornecer ao programa as informações sobre o modelo que será empregado.

Por exemplo, ao empregar um programa que utiliza uma biblioteca em forma de espectros reais como o de Trombka e Schmadebeck[3], embora seja, talvez, o modelo mais eficiente para restituir a informação perdida na fonte e no codificador, pode-se deparar com pelo menos um sério problema. Considere-se o caso de uma biblioteca de espectros obtidos com uma dada geometria fonte-detetor. Se a fonte a ser medida tiver uma geometria diferente, o eficiente algoritmo empregado por Trombka conduzirá a resultados falsos.

Os pacotes de programas mais comerciais são muitas vezes cegos a esses problemas e podem levar a resultados realmente desatrosos.

TABELA 2

CONCLUSÕES

A descrição acima apenas tocou no assunto de extrema complexidade que é a decodificação de dados espectrométricos. O aspecto fundamental que se espera ter abordado a contento é o da necessidade do desenvolvimento de modelos adequados às características de cada experimento e de cada codificador. Nesse contexto, a interação entre o teórico (que desenvolve o programa decodificador) e o experimental (que executa o experimento) é a chave para a obtenção de resultados de boa qualidade quer seja na Geofísica Nuclear, quer seja em quaisquer outras áreas da Física Nuclear Aplicada.

O trabalho de desenvolvimento de novos algoritmos para decodificação de espectros nucleares deve caminhar lado a lado com o aperfeiçoamen

to das técnicas de medidas. As novas técnicas envolvem detetores com cada vez maior resolução e melhor relação sinal-ruído, o que é bom. Contudo,isso significa que novos modelos deverão ser gerados (para não dizer novos programas), do contrário será subempregado o esforço do experimentalista.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

[1] SIRCILLI NETO, F., "Medidas de Irídio e o Impacto Meteorítico do Fim do Cretáceo". Dissertação de Mestrado, INPE-4070-TPL/248, 1986.

[2] NORDEMANN, D.J.R. e PEREIRA, E.B., "Elementos Básicos de Geofísica Nuclear". INPE-3002-PRE/452, 1984.

[3] TROMBKA, J.I. e SCHMADEBECK, R.L., "A Numerical Least-Square Method for Resolving Complex Pulse Height Spectra". NASA Report SP-3044, Goddard Space Flight Center, 1968.

[4] ADAMS, J.A.S. e GASPARINI, P., "Gamma-Ray Spectrometry of Rocks". 295pp, Elsevier Publishing Company, Amsterdam, 1970.

[5] PHILLIPS, G.W. e MARLOW, K.W., "Automatic Analysis of Gamma-Ray Spectra from Germanium Detectors". Nucl. Instrument and Methods, 137:527-536, 1976.

[6] KOSKELO, M.J.; AARNIO, P.A. e ROUTTI, J.T., "SAMPO80: Minicomputer Program for Gamma-Ray Analysis with Nuclide Identification". Computer Physics Communications 24:11-35, 1981.

[7] GUNNINK, R. e NIDAY, J.B. "Computerized Analysis by Gamma-Ray Spectrometry", USAEC Report UCRL-51061, vols 1-4, Univ. of California, NTIS, 1972.

[8] ABRAMSON, N. "Information Theory and Coding", 201pp. McGraw Hill, New York, 1963.

LISTA DE FIGURAS

Fig. 1 - Diagrama de blocos de um sistema espectrometria nuclear. A informação perdida durante a codificação deve ser restituída via um modelo ao decodificador.

Fig. 2 - Ilustrações dos diversos processos de transferência da energia da energia dos fótons de radiação gama em cintilador de estado sólido. Os feixes de radiação 4 e 2 têm somente parte de sua energia transferida ao cintilador, enquanto o feixe 3 sofre absorção total após múltiplas interações no detetor. As interações são indicadas por: pp = produção de pares; c = Compton; ph = fotoelétrico.

Fig. 3 - Espectro de energia de uma fonte nuclear monoenergética de radiação gama: A-ideal, B-teórico, C-medido.

Fig. 4 - Representação qualitativa do espectro de energia em espectro de freqüência através da transformação do Fourier.

U(ppm)	Th(ppm)	K(%)
0,52	2,6	0,65
0,6	2,1	0,66
0,54	3,6	0,65
0,28	2,3	0,65
0,9	2,5	0,67
0,49	3,2	0,63
0,65	4,6	0,63
1	2,2	0,66
0,48	1,3	0,61
0,46	3	0,65

Tabela 1 - Intercomparação de resultados das concentrações elementares de U, Th e K no padrão geoquímico internacional W-1[4].

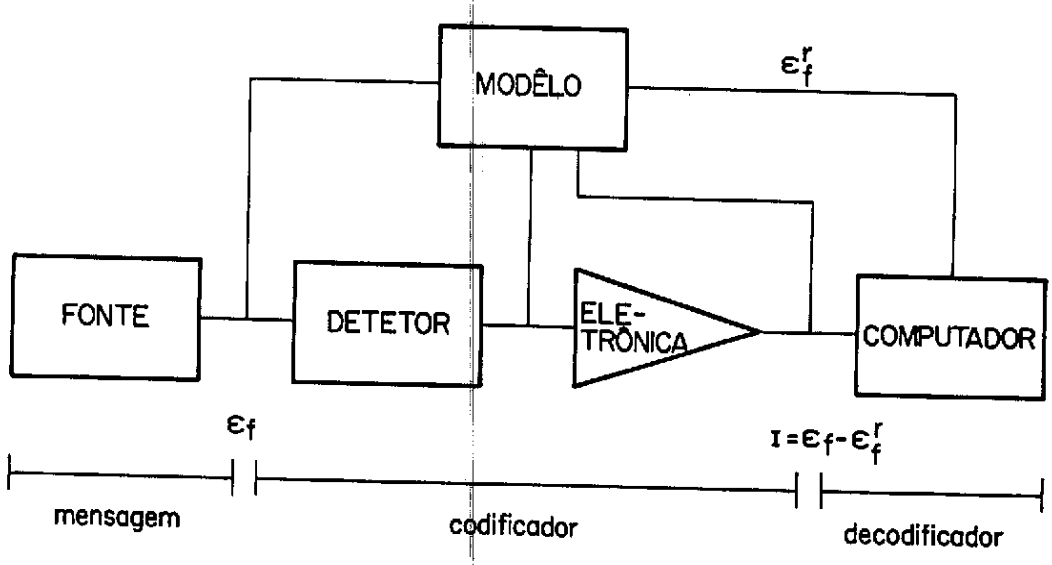
MODÊLO
ε_f^r
FONTE
DETETOR
ELE-
TRÔNICA
COMPUTADOR
ε_f
$I=\varepsilon_f-\varepsilon_f^r$
mensagem
codificador
decodificador

Fig. 1

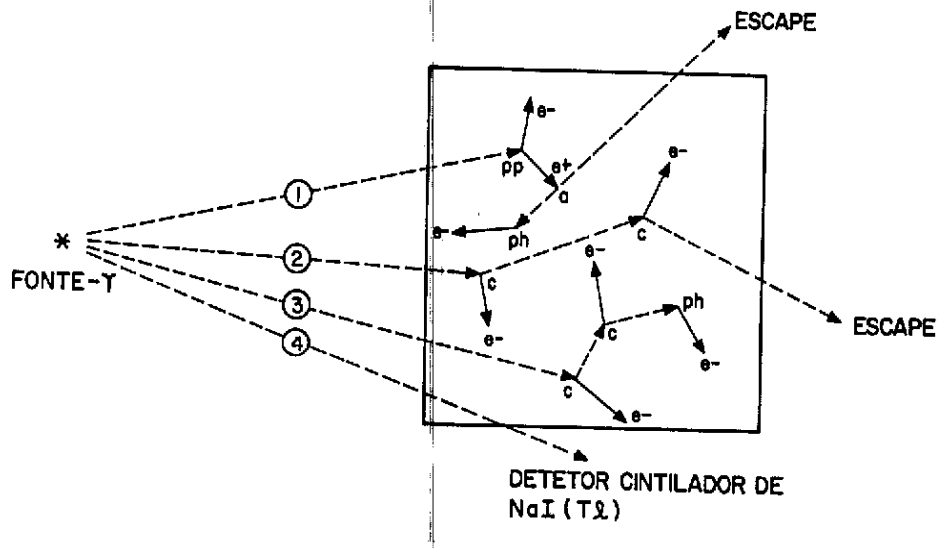
ESCAPE
e-
pp
e+
a
e-
ph
c
e-
c
e-
ESCAPE
*
FONTE-γ
1
2
3
4
c
ph
e-
c
e-
DETETOR CINTILADOR DE
NaI(Tℓ)

Fig. 2

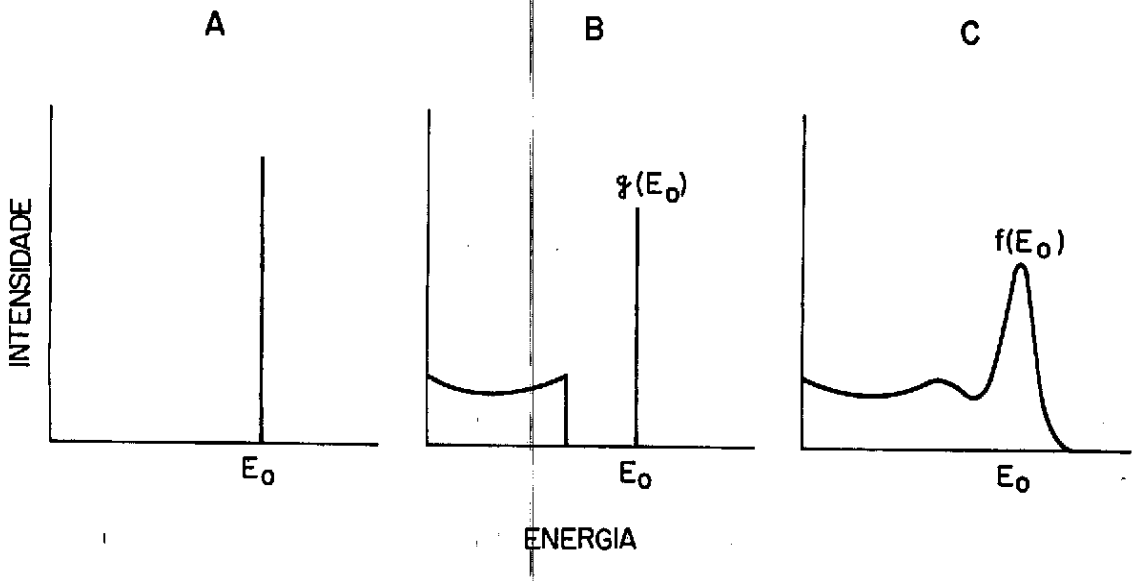

Fig. 3

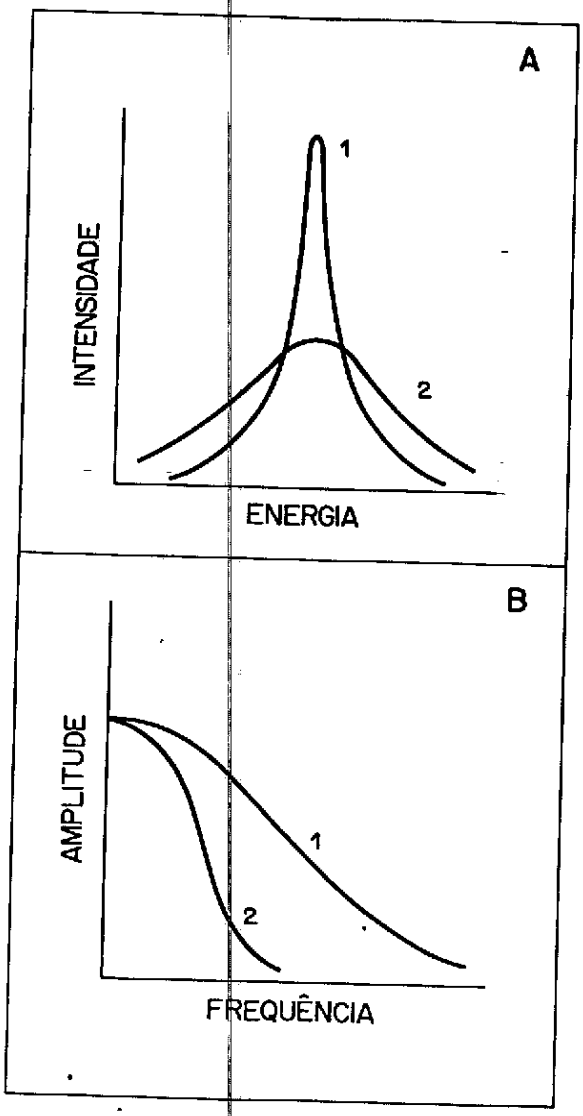

Fig. 4

MINISTÉRIO DA CIÊNCIA E TECNOLOGIA
INSTITUTO DE PESQUISAS ESPACIAIS

PROPOSTA PARA PUBLICAÇÃO

- [ ] DISSERTAÇÃO
- [ ] TESE
- [x] RELATÓRIO
- [ ] OUTROS

IDENTIFICAÇÃO

TÍTULO

"MATEMÁTICA APLICADA À GEOFÍSICA NUCLEAR"

AUTOR(ES)

Enio Bueno Pereira

D.J.R. Nordemann

ORIENTADOR

CO-ORIENTADOR

DISS. OU TESE

DIVULGAÇÃO

- [x] EXTERNA
- [ ] INTERNA
- [ ] RESTRITA

EVENTO/MEIO

- [ ] CONGRESSO
- [ ] REVISTA
- [ ] OUTROS

LIMITE	DEFESA	CURSO	ORGÃO
__/__/__	__/__/__		

REV. TÉCNICA

NOME DO REVISOR: Severino L.G. Dutra

RECEBIDO	DEVOLVIDO	ASSINATURA
__/__/__	__/__/__	[signature]

APROVAÇÃO

NOME DO RESPONSÁVEL: José Marques da Costa

APROVADO	DATA	ASSINATURA
[x] SIM [ ] NÃO	8/6/87	[signature]

REV. LINGUAGEM

Nº	PRIOR.	RECEBIDO	NOME DO REVISOR
108	1	13/5/87	Gloria C. Bertti

PÁG.	DEVOLVIDO	ASSINATURA
	14/5/87	[signature]

DATILOGRAFIA

OS AUTORES DEVEM MENCIONAR NO VERSO INSTRUÇÕES ESPECÍFICAS, ANEXANDO NORMAS, SE HOUVER

RECEBIDO	DEVOLVIDO	NOME DA DATILÓGRAFA
	28/05/87	MARINA

Nº DA PUBLICAÇÃO: 4234RRE/1108 PÁG.:

CÓPIAS: Nº DISCO: LOCAL:

DIRETOR

AUTORIZO A PUBLICAÇÃO

- [ ] SIM
- [ ] NÃO __/__/__

OBSERVAÇÕES E NOTAS

Será apresentado no III Encontro Regional de Matemática Aplicada e Computacional, em São José dos Campos, de 18 a 20 de maio de 1987.

Viene Dar auditorio

APÓS A PUBLICAÇÃO, ESTA FICHA SERÁ ARQUIVADA JUNTAMENTE COM A VERSÃO ORIGINAL

INPE 106