

**APLICACION DE LAS TECNICAS DE CORRELACION AL ANALISIS
DE DATOS EN ESPECTROMETRIA GAMMA**

POR

L. QUINDOS, J. SOTO y E. VILLAR

APLICACION DE LAS TECNICAS DE CORRELACION AL ANALISIS DE DATOS EN ESPECTROMETRIA GAMMA

POR

L. QUINDOS, J. SOTO y E. VILLAR

Departamento de Física Fundamental
Facultad de Ciencias, Santander

Recibido el 4 de febrero de 1977

RESUMEN.—Las técnicas de correlación son utilizadas para el análisis de datos en espectrometría gamma en dos aspectos: alisado y mejora de la resolución, utilizando en ambos casos el mismo algoritmo, con el empleo de diferentes funciones de correlación. La sencillez del método, insensibilidad de los parámetros y el pequeño número de éstos hacen a estas técnicas atractivas y con resultados comparables a los obtenidos por otros autores mediante la aplicación de técnicas diferentes.

SUMMARY.—The correlation techniques are used on two ways for data analysis gamma spectrometry. Smoothing and improving the spectral resolution using the same algorithm with different cross-correlation function. The simplicity of this method, the insensitivity of parameters and a small number of these make those techniques become attractive, even with results as well as others getting from application of different techniques.

INTRODUCCION

En los últimos años se han realizado numerosos trabajos intentando perfeccionar los métodos de análisis de datos en espectrometría gamma. Evidentemente el desarrollo de la tecnología de medidas en este campo ha sido uno de los factores dominantes, promocionando la necesidad de realizar el tratamiento de una gran cantidad de datos experimentales, así como la utilización de pequeños computadores conectados en línea con un analizador multicanal. Muchos de estos estudios (1) (2) (3) se han elaborado para el proceso de datos obtenidos mediante detectores de alta resolución, como son los constituidos por semiconductores.

Uno de los detectores gamma de más frecuente uso, a pesar de no tener un gran poder resolvente, es el cristal de centelleo de INa(Tl), debido a su buena eficiencia de detección. La relativamente baja resolución de este detector hace que el análisis de los datos obtenidos posea algunas características especiales. Aunque se han elaborado una serie de programas para el análisis de datos de este tipo de detector (4) (5), la mayor parte de ellos son únicamente adecuados para altas capacidades de computación, y es por esto por lo que hemos pretendido hacer un programa que analice los datos obtenidos mediante un cristal de centelleo, pero poseyendo la sencillez necesaria para su adecuación a computadora de pequeña capacidad.

El objetivo de todos estos programas consiste en obtener la actividad específica de la muestra en estudio, lo que se consigue mediante la medición del área contenida bajo los fotopicos del espectro. Las relaciones entre las áreas bajo los picos y las actividades correspondientes se consigue a través de un factor de calibrado, que se obtiene del análisis espectral de una muestra de actividad conocida.

ELIMINACION DE LAS FLUCTUACIONES

En ciertas condiciones, en particular cuando la estadística es pobre, es necesario previamente un alisado de la distribución de cuentas. Este alisado permitirá una mejor definición del máximo del pico, definición necesaria para el cálculo de su energía y para una identificación automática de los picos.

Para la eliminación de las fluctuaciones en el espectro hemos utilizado la técnica de intercorrelación discreta (6), consistente en la sustitución del espectro original g_t por el espectro obtenido mediante la expresión:

$$c(\tau) = \sum_{t=0}^{M-1} f_t g_{t+\tau} \quad [1]$$

donde f_t es una función de correlación, convenientemente normalizada, y para la que se ha elegido una función gaussiana.

La decisión de que dicha gaussiana es una buena función de filtro se ha tomado mediante el análisis del módulo $F(w)$ de la transformada de Fourier de los puntos que forman el pico, como función de la frecuencia. En dicho análisis observamos que únicamente se obtienen altos valores del módulo de la transformada para unos pocos valores de la frecuencia. Para el resto de los valores, $F(w)$ se mantiene prácticamente constante. Este resultado concuerda con el que se obtiene cuando se utiliza como función de filtro una distribución de amplitud constante con caída gaussiana (7), con la salvedad de que el intervalo de valores de la frecuencia para los que $F(w)$ es importante, es mucho menor. Por esta razón es conveniente utilizar una función de filtro totalmente gaussiana. El método de intercorrelación que se propone es equivalente al citado (7), ya que realiza un filtrado digital en el dominio del tiempo, recobrando la información verdadera mediante la transformada inversa de la función filtrada. Esto coincide con la convolución del espectro original y la función transformada inversa de la función de filtro; por otra parte, siendo par la función de filtro gaussiana utilizada, los dos algoritmos de intercorrelación y convolución resultan equivalentes (8).

Teniendo en cuenta que la transformada inversa de Fourier de una gaussiana es otra gaussiana, la convolución de ésta con el espectro original producirá el mismo filtrado que el método mencionado, con la ventaja adicional de la facilidad de programación y disminución de la capacidad de computación necesaria.

Para especificar completamente la función de correlación gaussiana son necesarios dos parámetros, el número M , de puntos distintos de cero, que consideramos en dicha gaussiana, y su anchura a media altura W . Con objeto de optimizar estos dos parámetros hemos aplicado el método estudiado a una zona del espectro conteniendo un pico. Esta optimización ha de hacerse con respecto a los siguientes puntos:

- a) Conservación de la forma.
- b) Buena eliminación de las fluctuaciones.
- c) Maximalización de la relación señal a ruido.

A la hora de aplicar el método que se describe, el criterio utilizado para la evaluación de los parámetros idóneos se alcanza a través de la comparación de los resultados obtenidos aplicando diferentes pares de valores M y W a un mismo pico, previamente elegido por su buena definición estadística.

Como criterio para la conservación de la forma se ha exigido el que exista una proporcionalidad, canal a canal, entre el pico que resulta de la intercorrelación y el pico ideal correspondiente al obtenido con buena estadística. En el caso ideal la representación de estas proporcionalidades en función del número de canal, daría como resultado una

recta horizontal. Los valores que hemos juzgado adecuados para una buena conservación de la forma corresponden a variaciones inferiores al 25 % en torno del criterio de proporcionalidad establecido.

Para una buena eliminación de las fluctuaciones, la suma de los cuadrados de las diferencias S , canal a canal, entre el pico ideal reducido y los obtenidos por intercorrelación, debe presentar un valor suficientemente pequeño para los parámetros óptimos. Dentro del intervalo de valores de M y W , fijados por el criterio anterior, encontramos que dado un valor de W , S disminuye al aumentar el valor de M . De la misma manera, tomando un valor de M fijo, S disminuye igualmente al aumentar W .

Con respecto a la maximalización de la relación señal-ruido, se ha adoptado como línea base un tramo recto, buscando los parámetros óptimos, es decir, aquellos para los que la diferencia entre el valor máximo del pico aislado y su correspondiente valor en la línea base resulte máxima.

De acuerdo con los criterios indicados antes, hemos encontrado que la pareja óptima de parámetros guarda la relación:

$$M = 3W \quad [2]$$

La aplicación de [2] a una serie de picos de distinta anchura Δ a media altura revela además que los dos parámetros están relacionados con Δ , de forma que el número de puntos distintos de cero, en la función de correlación, debía ser del orden del doble de la anchura de los picos en el espectro original.

Esta última propiedad fija la relación necesaria para efectuar una variación de los parámetros a lo largo de todo un espectro. En cambio, para intervalos espectrales más pequeños puede admitirse la constancia de estos parámetros, pues es característico del método una notable invariabilidad de los resultados respecto a pequeñas variaciones de los mismos. Hemos evaluado la bondad del método propuesto aplicándolo a la eliminación de las fluctuaciones de una serie de zonas de espectros gamma que contenían un mismo pico, pero con distintas actividades, determinando previamente los parámetros más adecuados. Al mismo tiempo hemos tratado los mismos picos utilizando uno de los métodos de alisado más usual, como es el consistente en la sumación de un número impar prefijado de canales, afectando a cada uno de ellos por un factor de ponderación, con la normalización correspondiente. Esto resulta equivalente (9) a un ajuste puntual por mínimos cuadrados.

En la figura 1 se representan los resultados de la aplicación de ambos métodos a un pico bien definido, junto con el pico original. Se observa que los dos métodos consiguen un buen alisado. En la figura 2 se representa un pico estadísticamente peor definido que el anterior, que ha sido sometido igualmente a ambos métodos de alisado. Se encuentra

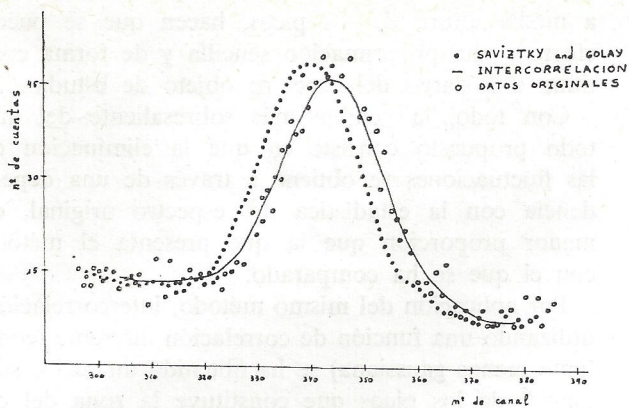


Figura 1

Alisado de un pico bien definido estadísticamente.

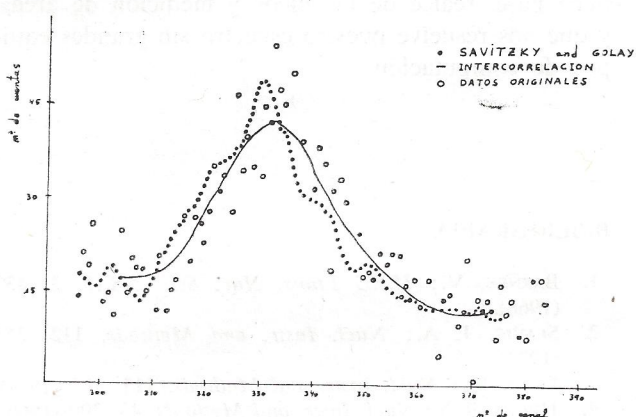


Figura 2

Alisado de un pico estadísticamente mal definido.

que mientras el método citado ya no logra una buena eliminación de las fluctuaciones, sí lo hace el método propuesto. Este resultado, confirmado mediante otros ejemplos, parece indicar que el método que trabaja con una gaussiana completa proporciona un alisado que es prácticamente independiente de la estadística, mientras que luego ocurre lo mismo con el método de mínimos cuadrados.

Una vez obtenida la eliminación de las fluctuaciones puede calcularse ya el área bajo los fotopicos, previa elección de una línea base adecuada. En el programa que hemos elaborado se ha utilizado como línea base una línea recta, como es frecuente en otros trabajos (10) (11), comprobando que el valor del área bajo los picos estudiados era similar en ambos casos con discrepancias menores del 2%.

Entre los métodos utilizados para la determinación de áreas de picos hemos elegido el consistente en encontrar el área bajo el pico como suma de un número de canales, dependientes de la anchura a media altura del pico, en torno al máximo, previa eliminación del fondo (12). Al haber eliminado ya las fluctuaciones, este método permite calcular el área como suma de unos pocos canales.

IDENTIFICACION DE PICOS

Es bien conocido el hecho de que la forma del espectro obtenido mediante cualquier dispositivo espectroscópico es diferente de la del «espectro verdadero», produciéndose esta discrepancia como consecuencia del poder de resolución finito del instrumento. Para resolver este problema se han desarrollado métodos (13) (14) que nos extraen la información existente en los multipletes, considerados éstos como sistema de líneas ocultas por resolución energética insuficiente.

Sin embargo, nuestro objetivo se fija en la aplicación de un método que nos permita una mejor detección automática de los picos, realizando la información contenida en ellos, hecho que nos permitirá una medición de las actividades de los elementos objeto de estudio, que sin este tratamiento previo resultaría difícil.

Algunos métodos (15) (16) se han desarrollado a este fin, si bien cualquiera de ellos requiere por lo menos una computadora de tipo medio. Nosotros hemos intentado ensayar un método que por su sencillez de cálculo se pudiese resolver con una calculadora de tipo sencillo, y lo hemos aplicado para obtener una mayor separación con vistas a su posterior detección automática a los tres picos del Pb^{214} que aparecen mediante un cristal de INa (TI). Fijada la ganancia, los picos obtenidos y los encontrados después de haber eliminado las fluctuaciones según el método expuesto anteriormente vienen dados en la figura 3. Hemos empleado a continuación la expresión [1], siendo g_i los datos alisados obtenidos de los originales por intercorrelación con una gaussiana (de la misma forma podríamos introducir los datos originales), y en donde f_i es la función de correlación.

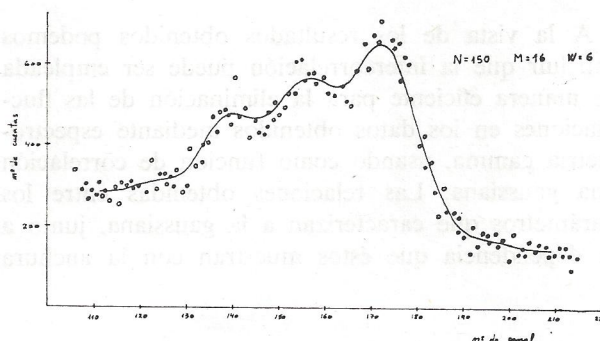


Figura 3

Alisado de los tres picos del Pb^{214} .

Como función de correlación hemos utilizado la definida por $(R - G)$, siendo R un parámetro constante y G una gaussiana, con la particularidad de que los parámetros que permiten especificar la gaussiana son los mismos que se utilizaron anteriormente para el alisado. El valor del parámetro R se ha variado dentro del intervalo 0,30 y 0,90. Encontra-

mos que existía un valor $R=0.48$ para el cual la aplicación del método descrito daba como resultado el mismo espectro que el obtenido por aplicación de la técnica de correlación expuesta, y como al aumentar el valor de dicho parámetro se obtenía una mejor identificación que iba optimizándose a medida que aumentaba su valor, si bien, para valores próximos al extremo superior del intervalo, comenzaban a aparecer inflexiones a un lado y otro del conjunto de picos, hecho que nos permitía efectuar una elección adecuada del valor óptimo del parámetro R , sin la introducción de deformaciones importantes en los picos. Dicho valor resultó ser de $R=0.70$. En la figura 4 se observa, con la aplicación del método expuesto, que se obtiene una efectiva separación de los picos que nos permite su identificación y una aplicación correcta del método anteriormente indicado de cálculo de áreas.

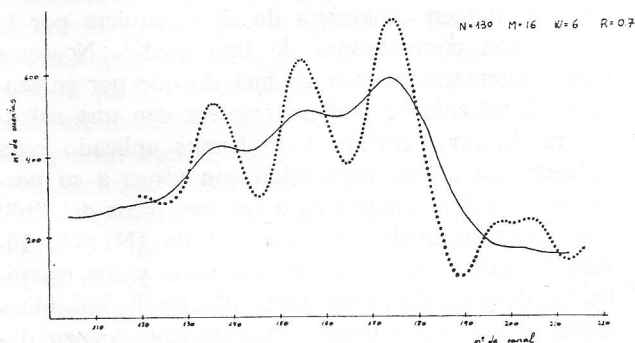


Figura 4

Resultado de la aplicación de la técnica de intercorrelación con el empleo de función de correlación: constante menos gaussiana.

DISCUSION Y CONCLUSIONES

A la vista de los resultados obtenidos podemos concluir que la intercorrelación puede ser empleada de manera eficiente para la eliminación de las fluctuaciones en los datos obtenidos mediante espectrometría gamma, usando como función de correlación una gaussiana. Las relaciones obtenidas entre los parámetros que caracterizan a la gaussiana, junto a la dependencia que éstos muestran con la anchura

a media altura de los picos, hacen que se pueda efectuar una programación sencilla y de forma continua a lo largo del espectro objeto de estudio.

Con todo, la ventaja más sobresaliente del método propuesto consiste en que la eliminación de las fluctuaciones se obtiene a través de una dependencia con la estadística del espectro original, en menor proporción que la que presenta el método con el que se ha comparado.

Por aplicación del mismo método, intercorrelación, utilizando una función de correlación diferente (constante menos gaussiana) se ha obtenido un realce sustancial de los picos que constituye la zona del espectro objeto de estudio; lo cual nos permite la elaboración de un programa que engloba todos los aspectos: eliminación de fluctuaciones, elección de línea base, realce de los picos y medición de áreas, y que nos resuelve nuestro espectro sin grandes equipos de computación.

BIBLIOGRAFIA

1. BARNES, V.; *IEEE Trans. Nuc. Sci.*, NS 15, 3, 437 (1968).
2. SLAVIC, J. A.; *Nucl. Instr. and Methods*, 112, 253 (1973).
3. DOJO, M.; *Nucl. Instr. and Methods*, 115, 425 (1974).
4. HEATH, R. S.; *Nucl. Instr. and Methods*, 43, 209 (1966).
5. HELMER et ed. R. G.; *Nucl. Instr. and Methods*, 57, 46 (1967).
6. CONNELLY, A. L.; *Nucl. Instr. and Methods*, 82, 141 (1970).
7. INOUE, T.; *Nucl. Instr. and Methods*, 67, 125 (1969).
8. HWEI P. HSU; «Análisis de Fourier», Fondo Educativo Interamericano (1973).
9. SAVITZKY, A. y GOLAY, M.; *Anal. Chem.*, 36, 8, 1627 (1964).
10. SIEGBAHN, K., ed.; North-Holland Publ. Co., Amsterdam (1965).
11. CROUTHAMMEL, C. E., ADAMS, F. y DAMS, R.; Pergamon Press, Nueva York (1970).
12. KOKTA, L.; *Nucl. Instr. and Methods*, 112, 245 (1973).
13. ROUTTI, J. T. y PRUSSIN, S. G.; *Nucl. Instr. and Methods*, 72, 125 (1969).
14. BLACBURN, J. A.; *Anal. Chem.*, 37, 8, 1000 (1965).
15. MARISSCOTTI, M. A.; *Nucl. Instr. and Methods*, 50, 309 (1967).
16. BLACK, W. W.; *Nucl. Instr. and Methods*, 71, 317 (1969).