

Minimizando o Mau Condicionamento da Matriz de Covariância na Análise Espectral de Gama-Pronto Ativado por Nêutrons

Halisson A. C. Cardoso* **Silvio de B. Melo** **Carlos C. Dantas**

CIn / DEN - Universidade Federal de Pernambuco
Tel +55 81 2126.8430 - Cidade Universitária - 50740-560 - Recife/PE
E-mail: {hacc,sbm}@cin.ufpe.br, ccd@ufpe.br,

Emerson A.O. Lima

Poli-Universidade de Pernambuco
50100-010, Recife, PE
E-mail: eal@poli.br.

RESUMO

Muitas aplicações industriais se beneficiam do método de análise espectral de gama-pronto ativado por bombardeamento de nêutrons, tais como a análise de alimentos, medidas de traços de enxofre em amostras de carvão, medidas de salinidade, detecção de substâncias ilícitas, etc [1]. Quando uma amostra é bombardeada por um canhão de nêutrons (uma fonte como Cf-252), ela emite raios gama que podem ser detectados num dispositivo específico (detector de cintilação). Um gráfico da contagem de radiação é construído em função do espectro de energia (níveis de energia são chamados aqui de canais), cada gráfico é uma “assinatura” da substância (ver Figura 1). É comum na literatura assumir-se que o gráfico espectral da amostra é uma combinação linear dos gráficos espectrais dos seus constituintes, o que nos permite escrever: $b_i = \sum_{j=1}^m A_{ij} \cdot x_j$, com $i \in \{1, \dots, n\}$, onde b_i é a taxa de contagem no i -ésimo canal do espectro da amostra desconhecida, A_{ij} é a taxa de contagem no i -ésimo canal do j -ésimo componente e x_j é o coeficiente do j -ésimo componente. Esse sistema linear, escrito na forma matricial $A \cdot X = b$, onde A é uma matriz $n \times m$, X é $m \times 1$ e b é $n \times 1$, possui equações que são, em geral, incompatíveis devido a ruídos de diversas fontes, como baixa resolução dos detectores, radiação externa e conversões de representação de sinal no hardware. Desta forma é comum aplicar-se um método de mínimos quadrados, que corresponde matricialmente a resolver o sistema: $A^T A X = A^T b$, onde a matriz quadrada ($m \times m$) $A^T A$, simétrica, é mal condicionada, com determinante nulo ou próximo de zero. O condicionamento da matriz é dado pelo quociente entre o maior autovalor e o menor autovalor da matriz (também chamada de *matriz de covariância*). Este mau condicionamento pode ser provocado por, além do problema dos ruídos, a diferença de magnitude dos valores de contagem de diferentes componentes e também de possível correlação entre os gráficos dos constituintes. É importante também verificar que as medidas realizadas tem que levar em conta radiação de fundo, que pode ser proveniente das seguintes fontes: a —radiação emitida nas vizinhanças da amostra; b —radiação emitida na fonte e não devidamente contida; e c —radiação emitida pelo material detector de radiação. Segundo Wang[2], uma devida estimativa da fração em peso dos constituintes da amostra deve ser feita tomando-se por base os dados de fundo, devido à sua natureza de imprevisibilidade.

A aproximação realizado por Meric[1] aborda o problema do mau condicionamento atacando a questão das diferenças de magnitudes, particionando o conjunto de componentes em duas partes: a componente de mais altos valores de contagem numa parte, e as demais noutra parte. Um sistema com uma matriz menor é resolvido (com baixo condicionamento), e então a substância que foi separada é multiplicada pelo respectivo coeficiente e depois subtraída da amostra total. O procedimento é repetido

*Mestrando em Ciência da Computação pela Universidade Federal de Pernambuco

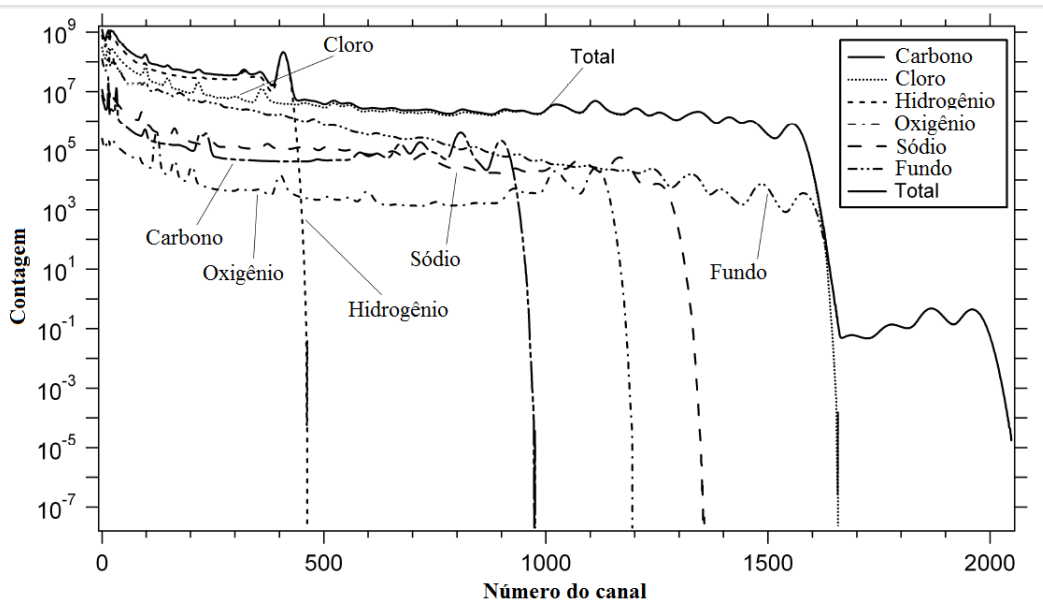


Figura 1: Taxa de contagem espectral de várias substâncias.

para a segunda partição, e assim sucessivamente. Os resultados mostrados apresentaram erros que variaram de 0,85% a 4,7%. O presente trabalho propõe a construção da matriz de covariância utilizando um subconjunto próprio dos canais, o qual é escolhido baseando-se na forma dos gráficos e no condicionamento da matriz. O problema da escolha desse subconjunto pode ser modelado na forma de uma otimização, e diversos algoritmos serão testados. Num primeiro momento, serão testados sempre subconjuntos com m canais (que corresponde à dimensão do espaço gerado pelos gráficos constituintes), após o qual serão incorporados mais para melhor lidar com ruídos. Em dados simulados com 4 constituintes e 20 canais, com valores de contagem variando de 0 a 5,0, com os gráficos aproximadamente suaves e com partes correlacionadas, e aplicando uma otimização força-bruta (20 unidades combinadas de 4 em 4), concluímos que a escolha adequada dos canais reduziram o condicionamento acima de 10^{33} para apenas 66. Os dados reais possuem mais de 2000 canais, com um número típico de 6 constituintes, o que nos leva a tentar um algoritmo de otimização mais eficiente (ex: GRASP) e a incorporação de informações das formas dos gráficos para uma redução substancial do espaço de busca.

Palavras-chave: *condicionamento, matriz covariância, otimização, contagem espectral*

Referências

- [1] I. Meric, G. A. Johansen, M. B. Holstad, J. Mattingly, and R. P. Gardner, “On the treatment of ill-conditioned cases in the monte carlo library least-squares approach for inverse radiation analyzers,” *Measurement Science and Technology*, vol. 23, no. 5, p. 055603, 2012.
- [2] J. Wang, F. Li, and R. P. Gardner, “On the use of prompt gamma-ray neutron activation analysis for determining phase amounts in multiphase flow,” *Measurement Science and Technology*, vol. 19, no. 9, p. 094005, 2008.