



Universidad de Oviedo

PROGRAMA DE DOCTORADO
INGENIERIA MINERA DEL TERRENO Y SU IMPACTO AMBIENTAL

**TÉCNICAS RÁPIDAS DE REALIZACIÓN DE ACTIVACIÓN
NEUTRÓNICA CÍCLICA Y DE SU ANÁLISIS, PARA LA
DETERMINACIÓN DEL CONTENIDO DE SÍLICE EN
MUESTRAS DE MINERAL DE FLUORITA**

Autor: EDUARDO DÍAZ GARCÍA
Directores: Dra. TERESA DE JESÚS ALONSO SÁNCHEZ
Dr. MIGUEL ÁNGEL REY RONCO

MARZO DE 2015



RESUMEN DEL CONTENIDO DE TESIS DOCTORAL

1.- Título de la Tesis	
Español/Otro Idioma: TÉCNICAS RÁPIDAS DE REALIZACIÓN DE ACTIVACIÓN NEUTRÓNICA CÍCLICA Y DE SU ANÁLISIS, PARA LA DETERMINACIÓN DEL CONTENIDO DE SÍLICE EN MUESTRAS DE MINERAL DE FLUORITA	Inglés: FAST NEUTRON CYCLIC ACTIVATION ANALYSIS TECHNIQUES TO OBTAIN SILICA AND FLUORINE CONTENT IN FLUORITE SAMPLES
2.- Autor	
Nombre: EDUARDO DÍAZ GARCÍA	DNI/Pasaporte/NIE:
Programa de Doctorado: INGENIERÍA MINERA DEL TERRENO Y SU IMPACTO AMBIENTAL	
Órgano responsable: EXPLOTACIÓN Y PROSPECCIÓN DE MINAS	

RESUMEN (en español)

Esta Tesis Doctoral estudia la medida de rayos gamma diferidos, causados por la activación neutrónica de muestras procedentes de una planta de concentración de fluorita, como método de determinación de su contenido en flúor y sílice. Pretende mejorar la rapidez de los análisis frente a los métodos químicos.

El método fue estudiado, para la determinación del flúor, en anteriores tesis doctorales leídas en la Universidad de Oviedo "*Desarrollo de un método rápido basado en técnicas de activación neutrónica para la determinación del contenido en flúor de muestras de mineral de fluorita*" y "*Activación neutrónica cíclica para la determinación del contenido en flúor de muestras de mineral de fluorita*". Se resume con el fin de hacer comprensible el desarrollo posterior de esta tesis.

Se repasan los conceptos fundamentales de la activación neutrónica, técnica conocida y frecuentemente empleada en reactores nucleares termales.

Se describe la instrumentación y equipo de desplazamiento motorizado, exponiendo las diferencias de uso con experimentos previos.

Se exponen las características principales de los elementos que componen las muestras de fluorita y las reacciones desencadenadas por la activación neutrónica. Estas reacciones fueron estudiadas en la primera de las tesis anteriores con el fin de analizar el flúor. Buscamos ahora aquellas reacciones de interés para la determinación de sílice y sus posibles interferencias con las desencadenadas en otros elementos presentes en las muestras. Hay 3 reacciones de posible interés, pero solamente nos servirá el decaimiento y del $^{28}_{13}Al$, con una vida media de 2.2414 minutos y emisión de energía de 1778.85 keV.

Se presentan las características de los experimentos realizados con 3 detectores distintos. Se utiliza una activación común para la determinación de sílice y flúor, cuyas reacciones de decaimiento principales presentan vidas medias diferentes en relación con el tiempo total de ciclo empleado. Por tanto, puede considerarse que se ha hecho activación cíclica para la determinación de la sílice y activaciones independientes para la del flúor.

Se desarrolla, para la determinación de sílice y calcio, un método de detección objetiva de los canales de interés, independientemente de su calibración, extensible a otros elementos y tipos de espectros multicanales.

Sobre el rango de canales de interés determinados, se estudian y comprueban experimentalmente las curvas de decaimiento.

Se desarrollan algoritmos que permiten, mediante simulación, el diseño de nuevos experimentos de activación neutrónica.



Se estudia la precisión del método de activación neutrónica para la determinación del contenido en sílice y flúor, así como el número de activaciones necesarias para lograr errores absolutos o relativos con un nivel de confianza dado.

Palabras clave:

Activación neutrónica, activación neutrónica cíclica, flúor, sílice, fluorita, espato flúor, detección de rayos gamma, tratamiento de espectros, R

RESUMEN (en Inglés)

This Doctoral Thesis studies delayed γ -ray measurement caused by neutron activation of fluorite samples taken in a treatment plant as a method to obtain their fluorine and silica content. Its aim is to obtain faster analyses than chemical methods. The method was previously studied in Doctoral Thesis to obtain fluorine "*Desarrollo de un método rápido basado en técnicas de activación neutrónica para la determinación del contenido en flúor de muestras de mineral de fluorita*" and "*Activación neutrónica cíclica para la determinación del contenido en flúor de muestras de mineral de fluorita*", at Oviedo University.-- These have been resumed in order to make the development of the present Thesis more understandable. Basic neutron activation concepts are reviewed. Neutron activation analysis is a well-known technology frequently performed in nuclear thermal reactors. Instrumentation and motorized equipment are described, showing differences in use with previous experiments. Basic characteristics of fluorite elements and its neutron activation reactions are presented. The same reactions were studied in the first of the aforementioned Thesis, focusing only on fluorine determination. Now we are searching for the reactions that allow to determine silica content and their possible interferences with others caused in the rest of the elements present in samples. There are three possible reactions to determine silica content though only $^{28}_{13}\text{Al}$ γ -decay will be useful, with a half-life of 2.2414 minutes and emitting 1778.85 keV of energy. The experiments are carried out using three different detectors. A unique and common neutron activation is used to determine silica and fluorine contents. This allows for two different kinds of experiments to be done, cyclic and independent, due to the different half-lives related to cycle time process. An objective, calibration independent, detection method of the channels of interest is developed, that can also be useful for other elements and multichannel spectra. Channel range of interest is used to test experimental decay. Algorithms here developed can be applied, through simulation, for the design of neutron activation experiments. Neutron activation precision and also the number of activation cycles required to achieve an absolute or relative error with a given confidence level, are studied for silica and fluorine contents in fluorite samples.

Key words:

Neutron activation, cyclic neutron activation, fluorine, fluorite, fluorspar, gamma ray detection, spectra analysis, R

Dedicatoria

A las mujeres que la han hecho posible

Agradecimientos

A mis directores de tesis, Dra. Teresa de Jesús Alonso Sánchez y Dr. Miguel Ángel Rey Ronco por la confianza depositada y apoyo, orientación, seguimiento y supervisión.

Al Grupo Masaveu el reconocimiento debido por las aportaciones prestadas para la elaboración de esta Tesis.

A la empresa MINERSA por su colaboración en los análisis químicos.

A todos los difusores del software libre como hermanamiento del conocimiento, que ha hecho posible realizar el análisis de datos de esta tesis así como su edición. Especialmente a los desarrolladores de R y \LaTeX y, en especial, a Harold Wickham, cuyo comentario me hizo comprender el concepto subyacente en R para organizar los datos.

A Tomás Aranda Guillén que me convenció para escribir esta tesis fuera del entorno ofimático habitual.

Y, especialmente, a todos aquéllos que han contribuido, en la enseñanza pública, a darme una formación de calidad, en particular, a los maestros de EGB que se consideraban y ejercían como tales, sin la valoración y apoyo debidos por las instituciones y sus representantes, que no tienen en cuenta que es necesario asentar unas bases sólidas, libres de intereses ideológicos o particulares.

Resumen

Esta Tesis Doctoral estudia la medida de rayos γ diferidos, causados por la activación neutrónica de muestras procedentes de una planta de concentración de fluorita, como método de determinación de su contenido en flúor y sílice. Pretende mejorar la rapidez de los análisis frente a los métodos químicos.

El método fue estudiado, para la determinación del flúor, en anteriores tesis doctorales leídas en la Universidad de Oviedo –*Desarrollo de un método rápido basado en técnicas de activación neutrónica para la determinación del contenido en flúor de muestras de mineral de fluorita y Activación neutrónica cíclica para la determinación del contenido en flúor de muestras de mineral de fluorita.*– Se resume con el fin de hacer comprensible el desarrollo posterior de esta tesis.

Se repasan los conceptos fundamentales de la activación neutrónica, técnica conocida y frecuentemente empleada en reactores nucleares termales.

Se describe la instrumentación y equipo de desplazamiento motorizado, exponiendo las diferencias de uso con experimentos previos.

Se exponen las características principales de los elementos que componen las muestras de fluorita y las reacciones desencadenadas por la activación neutrónica. Estas reacciones fueron estudiadas en la primera de las tesis anteriores con el fin de analizar el flúor. Buscamos ahora aquellas reacciones de interés para la determinación de sílice y sus posibles interferencias con las desencadenadas en otros elementos presentes en las muestras. Hay 3 reacciones de posible interés, pero solamente nos servirá el decaimiento γ del $^{28}_{13}\text{Al}$, con una vida media de 2.2414 minutos y emisión de energía de 1778.85 keV.

Se presentan las características de los experimentos realizados con 3 detectores distintos. Se utiliza una activación común para la determinación de sílice y flúor, cuyas reacciones de decaimiento principales presentan vidas medias diferentes en relación con el tiempo total de ciclo empleado. Por tanto, puede considerarse que se ha hecho activación cíclica para la determinación de la sílice y activaciones independientes para la del flúor.

Se desarrolla, para la determinación de sílice y calcio, un método de detección objetiva de los canales de interés, independientemente de su calibración, extensible a otros elementos y tipos de espectros multicanales.

Sobre el rango de canales de interés determinados, se estudian y comprueban experimentalmente las curvas de decaimiento.

Se desarrollan algoritmos que permiten, mediante simulación, el diseño de nuevos experimentos de activación neutrónica.

Se estudia la precisión del método de activación neutrónica para la determinación del contenido en sílice y flúor, así como el número de activaciones necesarias para lograr errores absolutos o relativos con un nivel de confianza dado.

Palabras clave:

Activación neutrónica, activación neutrónica cíclica, flúor, sílice, fluorita, espato flúor, detección de rayos gamma, tratamiento de espectros, R

Abstract

This Doctoral Thesis studies delayed γ -ray measurement caused by neutron activation of fluorite samples taken in a treatment plant as a method to obtain their fluorine and silica content. Its aim is to obtain faster analyses than chemical methods.

The method was previously studied in Doctoral Thesis to obtain fluorine content –*Desarrollo de un método rápido basado en técnicas de activación neutrónica para la determinación del contenido en flúor de muestras de mineral de fluorita y Activación neutrónica cíclica para la determinación del contenido en flúor de muestras de mineral de fluorita*, at Oviedo University.– These have been resumed in order to make the development of the present Thesis more understandable.

Basic neutron activation concepts are reviewed. Neutron activation analysis is a well-known technology frequently performed in nuclear thermal reactors.

Instrumentation and motorized equipment are described, showing differences in use with previous experiments.

Basic characteristics of fluorite elements and its neutron activation reactions are presented. The same reactions were studied in the first of the aforementioned Thesis, focusing only on fluorine determination. Now we are searching for the reactions that allow to determine silica content and their possible interferences with others caused in the rest of the elements present in samples. There are three possible reactions to determine silica content though only ${}^{28}_{13}\text{Al}$ γ -decay will be useful, with a half-life of 2.2414 minutes and emitting 1778.85 keV of energy.

The experiments are carried out using three different detectors. A unique and common neutron activation is used to determine silica and fluorine contents. This allows for two different kinds of experiments to be done, cyclic and independent, due to the different half-lives related to cycle time process.

An objective, calibration independent, detection method of the channels of interest is developed, that can also be useful for other elements and multichannel spectra.

Channel range of interest is used to test experimental decay. Algorithms here developed can be applied, through simulation, for the design of neutron activation experiments.

Neutron activation precision and also the number of activation cycles required to achieve an absolute or relative error with a given confidence level, are studied for silica and fluorine contents in fluorite samples.

Key words:

Neutron activation, cyclic neutron activation, fluorine, fluorite, fluorspar, gamma ray detection, spectra analysis, R

Índice general

Índice general	I
Índice de cuadros	V
Índice de figuras	IX
Índice código fuente	XIII
1. Objeto	1
2. Antecedentes	3
2.1. Técnicas de activación neutrónica	3
2.2. Introducción a la técnica	4
2.3. Conceptos básicos	6
Niveles de energía de los átomos	6
Niveles de energía de los núcleos	7
2.4. Teoría reacciones nucleares	7
2.4.1. Producción de neutrones	9
2.4.2. Productos de decaimiento radioactivo	13
2.4.3. Radiación y materia	17
2.4.4. Cadenas de decaimiento	20
2.4.5. Predicción del tipo de decaimiento	20
2.4.6. La radioactividad	22
2.4.7. Activación con neutrones y sección eficaz	24
Flujo de neutrones	28
2.4.8. Modalidades de las mediciones por activación neutrónica	28
Análisis de activación neutrónica por rayos gamma instantá- neos (NAAGP)	29
Análisis de activación neutrónica por rayos gamma decaídos (NAAGD)	31
2.4.9. Medición de rayos gamma	31

2.4.10.	Uso del recuento de rayos gamma para calcular la concentración de elementos	32
2.4.11.	Instrumentación y técnicas	34
	Cuantificación NAA	34
	Ventajas y limitaciones	35
2.5.	Resultados de Tesis anteriores	37
2.5.1.	Extracto Tesis Dr. Rey Ronco	37
2.5.2.	Extracto Tesis Dra. M ^a Pilar Castro García	44
	Gestión de los espectros obtenidos mediante una activación neutrónica cíclica en muestras de espato flúor	45
3.	Metodología	47
3.1.	Reacciones en la fluorita	47
3.1.1.	Estudio de la Sílice	48
	Reacciones del ^{28}Si con los neutrones	49
	Reacción $^{28}_{14}\text{Si}(N, P)^{28}_{13}\text{Al}$	49
	Reacción $^{28}_{14}\text{Si}(N, A)^{25}_{12}\text{Mg}$	50
	Reacción $^{28}_{14}\text{Si}(N, G)^{29}_{14}\text{Si}$	50
	Reacciones del ^{29}Si con los neutrones	54
	Reacción $^{29}_{14}\text{Si}(N, A)^{26}_{12}\text{Mg}$	54
	Reacción $^{29}_{14}\text{Si}(N, P)^{29}_{13}\text{Al}$	54
	Reacciones del ^{30}Si con los neutrones	58
	Reacción $^{30}_{14}\text{Si}(N, A)^{27}_{12}\text{Mg}$	58
3.1.2.	Estudio del Flúor	62
	Reacción $^{19}_9\text{F}(N, p)^{19}_8\text{O}$	62
	Reacción $^{19}_9\text{F}(n, G)^{20}_9\text{F}$	63
	Reacción $^{19}_9\text{F}(n, a)^{16}_7\text{N}$	64
3.1.3.	Estudio del Calcio	65
	Reacciones del ^{40}Ca con los neutrones	65
	Reacción $^{40}_{20}\text{Ca}(n, a)^{37}_{18}\text{Ar}$	65
	Reacción $^{40}_{20}\text{Ca}(n, p)^{40}_{19}\text{K}$	65
	Reacciones del ^{44}Ca con los neutrones	66
3.1.4.	Estudio del Azufre	67
	Reacciones del ^{32}S con los neutrones	67
	Reacciones del ^{34}S con los neutrones	67
3.1.5.	Estudio del Bario	68
	Reacciones del ^{134}Ba con los neutrones	68
	Reacciones del ^{135}Ba con los neutrones	68
	Reacciones del ^{136}Ba con los neutrones	69
	Reacciones del ^{137}Ba con los neutrones	69
	Reacciones del ^{138}Ba con los neutrones	70

3.1.6.	Estudio del Hierro	70
	Reacciones del ^{54}Fe con los neutrones	70
	Reacciones del ^{56}Fe con los neutrones	71
	Reacción $^{56}\text{Fe}(n, 2n)^{55}\text{Fe}$	72
	Reacción $^{56}\text{Fe}(n, p)^{56}\text{Mn}$	72
	Reacciones del ^{57}Fe con los neutrones	73
3.1.7.	Estudio del Fósforo	73
	Reacción $^{31}\text{P}(n, 2\alpha)^{24}\text{Na}$	74
	Reacción $^{31}\text{P}(n, \alpha)^{28}\text{Al}$	74
	Reacción $^{31}\text{P}(n, p)^{31}\text{Si}$	75
3.1.8.	Estudio del Magnesio	75
	Reacciones del ^{24}Mg con los neutrones	75
	Reacción $^{24}\text{Mg}(n, \alpha)^{21}\text{Ne}$	76
	Reacción $^{24}\text{Mg}(n, p)^{24}\text{Na}$	76
	Reacciones del ^{25}Mg con los neutrones	76
	Reacciones del ^{26}Mg con los neutrones	76
3.1.9.	Estudio del Arsénico	77
	Reacciones del ^{75}As con los neutrones	77
3.1.10.	Estudio del Mercurio	78
	Reacciones del ^{198}Hg con los neutrones	79
	Reacciones del ^{204}Hg con los neutrones	79
3.1.11.	Estudio del Oxígeno	80
3.1.12.	Estudio del Hidrógeno	80
3.1.13.	Conclusión reacciones fluorita	81
3.2.	Metodología de los experimentos	83
3.3.	Comentario respecto al tratamiento de espectros	84
3.4.	Metodología de gestión de espectros	84
4.	Desarrollo experimental	87
4.1.	Equipos	88
4.1.1.	Dispositivo empleado	88
4.1.2.	Fuente de neutrones	89
4.1.3.	Detectores	89
4.1.4.	Equipo multicanal	90
4.1.5.	Calibración	90
4.2.	Proceso experimental	90
4.2.1.	Modificación Compax 3	91
4.2.2.	Experimentos	91

5. Gestión y análisis de espectros	95
5.1. Gestión de ficheros de espectros	95
5.2. Gráficas espectros originales	110
5.3. Parametrización de los espectros. Intervalo único	127
5.4. Gráficas espectros acumulados sin fondo	132
5.5. Parametrización y correlación.	143
5.5.1. Correlación de un intervalo único	143
5.5.2. Correlación de n intervalos	148
Corte espectro en n intervalos	149
Cálculo de parámetros de n intervalos	150
5.6. Determinación de intervalos óptimos	165
5.6.1. Procedimiento	165
5.6.2. Intervalo óptimo CaF_2	167
5.6.3. Intervalo óptimo SiO_2	186
5.7. Áreas de decaimiento	204
5.7.1. Cálculo teórico áreas decaimiento	204
5.7.2. Representación gráfica activación cíclica	206
5.7.3. Áreas decaimiento teóricas	211
5.7.4. Áreas decaimiento experimentales	219
Obtención de espectros unitarios con fondo	219
Parametrización espectros unitarios con fondo	224
5.7.5. Comparación áreas decaimiento teóricas y experimentales	224
Funciones auxiliares de comparación	224
Ploteado áreas unitarias de decaimiento frente a ciclo	226
5.7.6. Áreas unitarias de decaimiento. Promedios y desviaciones	240
Promedios, desviaciones y correlaciones SiO_2	241
Regresión lineal SiO_2	244
Modelo de regresión lineal SiO_2 medio	247
Promedios, desviaciones y correlaciones CaF_2	250
Regresión lineal CaF_2	252
5.8. Determinación del número de ciclos	255
5.8.1. Numero de ciclos por réplicas	256
5.8.2. Numero de ciclos por leyes	259
6. Conclusiones	265
A. Compax 3	267
Bibliografía	301

Índice de cuadros

3.1. Isótopos del silicio	49
3.2. Reacciones de interés del ^{28}Si con los neutrones.	49
3.3. Características del decaimiento del $^{28}_{13}\text{Al}$	50
3.4. Energía de la emisión γ de decaimiento del $^{28}_{13}\text{Al}$	50
3.5. Reacciones de interés del ^{29}Si con los neutrones.	54
3.6. Características del decaimiento del $^{29}_{13}\text{Al}$	54
3.7. Energía de la emisión γ del decaimiento del $^{29}_{13}\text{Al}$	55
3.8. Características del decaimiento del $^{27}_{12}\text{Mg}$	58
3.9. Energía de la emisión γ del $^{27}_{12}\text{Mg}$	58
3.10. Isótopos del Flúor	62
3.11. Reacciones de interés del Flúor con los neutrones.	62
3.12. Características del decaimiento del $^{19}_8\text{O}$	62
3.13. Energía de la emisión γ del $^{19}_8\text{O}$	63
3.14. Características del decaimiento del $^{20}_9\text{F}$	63
3.15. Energía de la emisión γ del $^{20}_9\text{F}$	64
3.16. Características del decaimiento del $^{16}_7\text{N}$	64
3.17. Energía de la emisión γ del $^{16}_7\text{N}$	64
3.18. Isótopos del Calcio	65
3.19. Reacciones de interés del $^{40}_{20}\text{Ca}$ con los neutrones.	65
3.20. Características del decaimiento del $^{37}_{18}\text{Ar}$	65
3.21. Características del decaimiento del $^{40}_{19}\text{K}$	66
3.22. Energía de la emisión γ del $^{40}_{19}\text{K}$	66
3.23. Reacciones de interés del $^{40}_{20}\text{Ca}$ con los neutrones.	66
3.24. Isótopos del Azufre	67
3.25. Reacciones de interés del $^{32}_{16}\text{S}$ con los neutrones.	67
3.26. Reacciones de interés del $^{34}_{16}\text{S}$ con los neutrones.	67
3.27. Características del decaimiento del $^{31}_{14}\text{Si}$	68
3.28. Energía de la emisión γ del $^{31}_{14}\text{Si}$	68
3.29. Isótopos del Bario	68
3.30. Reacciones de interés del $^{134}_{56}\text{Ba}$ con los neutrones.	69
3.31. Reacciones de interés del $^{134}_{56}\text{Ba}$ con los neutrones.	69

3.32. Reacciones de interés del $^{136}_{56}\text{Ba}$ con los neutrones.	69
3.33. Reacciones de interés del $^{137}_{56}\text{Ba}$ con los neutrones.	69
3.34. Reacciones de interés del $^{138}_{56}\text{Ba}$ con los neutrones.	70
3.35. Características del decaimiento del $^{139}_{56}\text{Ba}$	70
3.36. Energía de la emisión γ del $^{139}_{56}\text{Ba}$	70
3.37. Isótopos del Hierro	71
3.38. Reacciones de interés del $^{54}_{26}\text{Fe}$ con los neutrones.	71
3.39. Características del decaimiento del $^{51}_{24}\text{Cr}$	71
3.40. Energía de la emisión γ del $^{51}_{24}\text{Cr}$	71
3.41. Reacciones de interés del $^{56}_{26}\text{Fe}$ con los neutrones.	72
3.42. Características del decaimiento del $^{55}_{26}\text{Fe}$	72
3.43. Características del decaimiento del $^{56}_{25}\text{Mn}$	72
3.44. Energía de la emisión γ del $^{56}_{25}\text{Mn}$	73
3.45. Reacciones de interés del $^{57}_{26}\text{Fe}$ con los neutrones.	73
3.46. Isótopos del Fósforo	74
3.47. Reacciones de interés del $^{31}_{15}\text{P}$ con los neutrones.	74
3.48. Características del decaimiento del $^{24}_{11}\text{Na}$	74
3.49. Características del decaimiento del $^{31}_{14}\text{Si}$	75
3.50. Energía de la emisión γ del $^{31}_{14}\text{Si}$	75
3.51. Isótopos del Magnesio	75
3.52. Reacciones de interés del $^{24}_{12}\text{Mg}$ con los neutrones.	76
3.53. Reacciones de interés del $^{25}_{12}\text{Mg}$ con los neutrones.	76
3.54. Reacciones de interés del $^{26}_{12}\text{Mg}$ con los neutrones.	76
3.55. Características del decaimiento del $^{27}_{12}\text{Mg}$	77
3.56. Energía de la emisión γ del $^{26}_{12}\text{Mg}$	77
3.57. Isótopos del Arsénico	77
3.58. Reacciones de interés del $^{75}_{33}\text{As}$ con los neutrones.	78
3.59. Características del decaimiento del $^{76}_{33}\text{As}$	78
3.60. Energía de la emisión γ del $^{76}_{33}\text{As}$	78
3.61. Isótopos del Mercurio	78
3.62. Reacciones de interés del $^{198}_{80}\text{Hg}$ con los neutrones.	79
3.63. Características del decaimiento del $^{199}_{80}\text{Hg}$	79
3.64. Energía de la emisión γ del $^{199}_{80}\text{Hg}$	79
3.65. Reacciones de interés del $^{204}_{80}\text{Hg}$ con los neutrones.	80
3.66. Características del decaimiento del $^{203}_{80}$	80
3.67. Isótopos del Oxígeno	80
3.68. Reacciones de interés del $^{32}_{16}\text{S}$ con los neutrones.	80
3.69. Isótopos del Hidrógeno	81
3.70. Reacciones con posibles interferencias en la detección del Silicio	83
4.1. Muestras activación neutrónica	92

4.2. Datos de proceso	92
4.3. Tiempos de proceso para los distintos ciclos.	93
5.1. Base de datos <i>espectro.acum.cf</i>	101
5.2. Base de datos <i>exp.conj.acum.cf</i>	110
5.3. <i>exp.acum.cf.melt</i>	114
5.4. <i>exp.conj.acum.cf</i> [559,746]	132
5.5. <i>exp.conj.acum.cf</i> - Prm [559,746]	132
5.6. <i>exp.acum.sf.melt</i> - 100_A_BGO_ch220	134
5.7. <i>exp.acum.cf.melt</i> - 100_A_BGO_ch220	135
5.8. <i>exp.conj.acum.cf</i> - Correlación CaF_2 - [559,746]	145
5.9. P10.cf - cola con n.chunk = 7	160
5.10. P10.sf - cola con n.chunk = 7	161
5.11. DF_50.CaF2.cf	164
5.12. DF_50.SiO2.cf	164
5.13. Intervalo óptimo CaF_2 : Detector BGO - Réplica A	171
5.14. Intervalo óptimo CaF_2 : Detector BGO - Réplica B	172
5.15. Intervalo óptimo CaF_2 : Detector BGO - Réplica C	173
5.16. Intervalo óptimo CaF_2 : Detector NaI2x2 - Réplica A	174
5.17. Intervalo óptimo CaF_2 : Detector NaI2x2 - Réplica B	175
5.18. Intervalo óptimo CaF_2 : Detector NaI2x2 - Réplica C	176
5.19. Intervalo óptimo CaF_2 : Detector NaI3x3 - Réplica A	177
5.20. Intervalo óptimo CaF_2 : Detector NaI3x3 - Réplica B	178
5.21. Intervalo óptimo CaF_2 : Detector NaI3x3 - Réplica C	179
5.22. CaF_2 —Convergencia intervalos R_{max}^2	184
5.23. Intervalo óptimo SiO_2 : Detector BGO - Réplica A	189
5.24. Intervalo óptimo SiO_2 : Detector BGO - Réplica B	190
5.25. Intervalo óptimo SiO_2 : Detector BGO - Réplica C	191
5.26. Intervalo óptimo SiO_2 : Detector NaI2x2 - Réplica A	192
5.27. Intervalo óptimo SiO_2 : Detector NaI2x2 - Réplica B	193
5.28. Intervalo óptimo SiO_2 : Detector NaI2x2 - Réplica C	194
5.29. Intervalo óptimo SiO_2 : Detector NaI3x3 - Réplica A	195
5.30. Intervalo óptimo SiO_2 : Detector NaI3x3 - Réplica B	196
5.31. Intervalo óptimo SiO_2 : Detector NaI3x3 - Réplica C	197
5.32. SiO_2 —Convergencia intervalos R_{max}^2	202
5.33. Análisis de CaF_2 . Áreas de decaimiento $^{16}_7N$ en ciclo, unitaria y acumulada	215
5.34. Análisis de SiO_2 . Áreas de decaimiento $^{28}_{13}Al$ en ciclo, unitaria y acumulada	217
5.35. Medias, desviaciones estándar y correlaciones para SiO_2 con detector BGO.	242

5.36. Medias y desviaciones estándar para SiO_2 . Detectores BGO y NaI2x2.	243
5.37. Medias y desviaciones estándar para CaF_2 . Detectores BGO y NaI2x2.	251
5.38. Medias, desviaciones estándar y correlaciones para CaF_2 con detector BGO.	252
5.39. Multiplicadores Z y niveles de confianza.	256
5.40. Número de ciclos a ensayar con detector BGO para el análisis de SiO_2 con errores absolutos 2 y 5 cuentas	258
5.41. Número de ciclos a ensayar con detector BGO para el análisis de CaF_2 y Error = 2.	259
5.42. Número de ciclos a ensayar con detector BGO para el análisis de CaF_2 y Error = 5.	259
5.43. Número de ciclos a ensayar con detector BGO para el análisis de SiO_2 y Confianza .95	263
5.44. Número de ciclos a ensayar con detector BGO para el análisis de CaF_2 y Confianza .95	263

Índice de figuras

2.1. Principio de la activación neutrónica	4
2.2. Espectro de energía de una fuente de $^{241}\text{Am} - \text{Be}$	10
2.3. Distancias recorridas por las radiaciones	18
2.4. Carta nuclear.[83]	21
2.5. Sección eficaz.	25
2.6. Posiciones del espectro teórico de la fuente de neutrones	40
2.7. Evolución de los valores relativos de ^{16}N presentes en la muestra según el tiempo en un proceso de activación neutrónica.	41
2.8. Ciclo de un periodo de irradiación y un periodo de medida	41
2.9. Ciclo de un periodo de irradiación y un periodo de medida con tiempo de desplazamiento.	42
3.1. 14-Si-28(N, 2N)14-Si-27	50
3.2. 14-Si-28(N, 4-BE-7)10-NE-22	51
3.3. 14-Si-28(N, A)12-Mg-25	51
3.4. 14-Si-28(N, EL)	51
3.5. 14-Si-28(N, G)14-Si-29	52
3.6. 14-Si-28(N, INL)14-Si-28	52
3.7. 14-Si-28(N, N + P)13-Al-27	52
3.8. 14-Si-28(N, P)13-Al-28	53
3.9. 14-Si-28(N, P + A)11-NA-24	53
3.10. 14-Si-28(N, TOT)	53
3.11. 14-Si-28(N, X)O-G-O	54
3.12. 14-Si-29(N, 2P)12-Mg-28	55
3.13. 14-Si-29(N, A)12-Mg-26	56
3.14. 14-Si-29(N, EL)	56
3.15. 14-Si-29(N, G)14-Si-30	56
3.16. 14-Si-29(N, INL)14-Si-29	57
3.17. 14-Si-29(N, N + P)13-Al-28	57
3.18. 14-Si-29(N, P)13-Al-29	57
3.19. 14-Si-29(N, X)13-Al-28	58

3.20. 14-Si-30(N, A)12-Mg-27	59
3.21. 14-Si-30(N, EL)14-Si-30	59
3.22. 14-Si-30(N, G)14-Si-31	60
3.23. 14-Si-30(N, INL)14-Si-30	60
3.24. 14-Si-30(N, N + P)13-Al-29	60
3.25. 14-Si-30(N, P)13-Al-30	61
3.26. 14-Si-30(N, TOT)	61
3.27. 14-Si-30(N, X)13-Al-29	61
4.1. Equipo de desplazamiento	88
4.2. Posiciones de activación y lectura	89
5.1. A_100_BGO	118
5.2. B_100_BGO	118
5.3. C_100_BGO	119
5.4. A_100_NaI2x2	119
5.5. B_100_NaI2x2	120
5.6. C_100_NaI2x2	120
5.7. A_100_NaI3x3	121
5.8. B_100_NaI3x3	121
5.9. C_100_NaI3x3	122
5.10. 00_100_A_BGO	122
5.11. 00_100_B_BGO	123
5.12. 00_100_C_BGO	123
5.13. 00_100_A_NaI2x2	124
5.14. 00_100_B_NaI2x2	124
5.15. 00_100_C_NaI2x2	125
5.16. 00_100_A_NaI3x3	125
5.17. 00_100_B_NaI3x3	126
5.18. 00_100_C_NaI3x3	126
5.19. A_100_BGO_sf	138
5.20. B_100_BGO_sf	138
5.21. C_100_BGO_sf	139
5.22. A_100_NaI2x2_sf	139
5.23. B_100_NaI2x2_sf	140
5.24. C_100_NaI2x2_sf	140
5.25. A_100_NaI3x3_sf	141
5.26. B_100_NaI3x3_sf	141
5.27. C_100_NaI3x3_sf	142
5.28. Intervalo óptimo CaF_2 : Detector BGO - Réplica A	180
5.29. Intervalo óptimo CaF_2 : Detector BGO - Réplica B	180

5.30. Intervalo óptimo CaF_2 : Detector BGO - Réplica C	181
5.31. Intervalo óptimo CaF_2 : Detector NaI2x2 - Réplica A	181
5.32. Intervalo óptimo CaF_2 : Detector NaI2x2 - Réplica B	182
5.33. Intervalo óptimo CaF_2 : Detector NaI2x2 - Réplica C	182
5.34. Intervalo óptimo CaF_2 : Detector NaI3x3 - Réplica A	183
5.35. Intervalo óptimo CaF_2 : Detector NaI3x3 - Réplica B	183
5.36. Intervalo óptimo CaF_2 : Detector NaI3x3 - Réplica C	184
5.37. Intervalo óptimo SiO_2 : Detector BGO - Réplica A	198
5.38. Intervalo óptimo SiO_2 : Detector BGO - Réplica B	198
5.39. Intervalo óptimo SiO_2 : Detector BGO - Réplica C	199
5.40. Intervalo óptimo SiO_2 : Detector NaI2x2 - Réplica A	199
5.41. Intervalo óptimo SiO_2 : Detector NaI2x2 - Réplica B	200
5.42. Intervalo óptimo SiO_2 : Detector NaI2x2 - Réplica C	200
5.43. Intervalo óptimo SiO_2 : Detector NaI3x3 - Réplica A	201
5.44. Intervalo óptimo SiO_2 : Detector NaI3x3 - Réplica B	201
5.45. Intervalo óptimo SiO_2 : Detector NaI3x3 - Réplica C	202
5.46. Activación cíclica. Curvas y áreas.	211
5.47. Análisis de CaF_2	216
5.48. Análisis de SiO_2	218
5.49. BGO_A_02.AiSiO2	229
5.50. BGO_A_11.AiSiO2	230
5.51. BGO_A_27.AiSiO2	230
5.52. BGO_A_42.AiSiO2	231
5.53. BGO_A_60.AiSiO2	231
5.54. BGO_A_76.AiSiO2	232
5.55. BGO_A_91.AiSiO2	232
5.56. BGO_A_98.AiSiO2	233
5.57. BGO_A_98.AiCaF2	236
5.58. BGO_A_91.AiCaF2	236
5.59. BGO_A_76.AiCaF2	237
5.60. BGO_A_60.AiCaF2	237
5.61. BGO_A_42.AiCaF2	238
5.62. BGO_A_27.AiCaF2	238
5.63. BGO_A_11.AiCaF2	239
5.64. BGO_A_02.AiCaF2	239
5.65. Histograma 38.23 % SiO_2 - BGO_A_11. SiO_2	240
5.66. Línea de regresión SiO_2	245
5.67. Modelo Lineal SiO_2	246
5.68. Línea de regresión SiO_2 medio	248
5.69. Modelo Lineal SiO_2 medio	249

5.70. Línea de regresión CaF_2 medio	254
5.71. Modelo Lineal CaF_2 medio	255

Índice código fuente

5.1. Estructura ficheros IEC	96
5.2. Importación de variables.	97
5.3. <code>get.data(directory)</code>	98
5.4. BGO - NaI2x2 - NaI3x3	99
5.5. <code>espectro.acum.cf</code>	100
5.6. Diseño tratamiento de datos.	102
5.7. Plantilla <code>pl.experimentos</code>	103
5.8. <code>unir_df(plantilla, df1, df2, df3)</code>	105
5.9. <code>get_experimentos_prev(C, L, R, D, quim.1, quim.2)</code>	107
5.10. <code>exp.conj.acum.cf</code>	109
5.11. <code>get.experimentos</code>	109
5.12. <code>exp.conj.acum.cf</code>	110
5.13. Energías de los canales	111
5.14. <code>get.experimentos.melt(data, pos = 0)</code>	112
5.15. <code>exp.acum.cf.melt</code>	113
5.16. <code>p.leyes(data, replica, ciclo, detector)</code>	113
5.17. Plot espectros acumulados con fondo 100	114
5.18. Plot espectros fondos acumulados 100	115
5.19. Parametrización y análisis.	127
5.20. <code>lista_lista.sf(lista)</code>	128
5.21. Parámetros intervalo único.	129
5.22. Parámetros intervalo 559 – 746	131
5.23. <code>get.exp.sf.melt(data)</code>	132
5.24. <code>exp.acum.sf.melt</code>	133
5.25. <code>exp.acum.sf.melt(100_A_X220_BGO)</code>	134
5.26. <code>exp.acum.cf.melt(100_A_220_BGO)</code>	134
5.27. <code>get.espectro.referenciado(data)</code>	135
5.28. <code>plot(100sf)</code>	137
5.29. R2.CaF2 y R2.SiO2	143
5.30. <code>lista.FUN(lista, grupo, FUN)</code>	143
5.31. <code>FUN.intervalo(data, inicio, final, FUN)</code>	144

5.32. total.intervalo(data, inicio, final, FUN)	146
5.33. total.intervalo(exp.conj.acum.cf, 559,746, R2.CaF2)	148
5.34. Parámetro número de canales.	149
5.35. cortar(n, offset), cortar.off(n, offset)	149
5.36. df.esp.list.param(data, cortes)	151
5.37. df.esp_list.param.sf(data, cortes)	151
5.38. cambiar(vector, nuevo, viejo)	152
5.39. df.id.prm(lista, n, p.corte, cortes)	153
5.40. df.id.fnc(lista, n, p.corte, cortes)	154
5.41. df.FUN(data, n_chunk, fondo, prm, FUN)	155
5.42. df.total(data, n, fondo = 1, prm = 1, FUN = R2.SiO2)	157
5.43. P10.sf	158
5.44. P50.cf	158
5.45. Muestra tablas P10.cf y P10.sf	160
5.46. P10.sf - df.total(experimentos, 10, fondo = 0)	160
5.47. df_total(data, n, FUN)	161
5.48. DF_50.CaF2.cf, DF_50.SiO2.cf	163
5.49. df.max	165
5.50. maxInt.R2.SiO2	166
5.51. IntmaxDR.SiO2	167
5.52. IntmaxDR.CaF2 - plot.interv(i, f, pos =right")	167
5.53. IntmaxDR.SiO2 - plot	186
5.54. Áreas de activación/lectura y desplazamiento teóricas.	207
5.55. Plot áreas de activación/lectura y desplazamiento teóricas	208
5.56. Cálculo teórica áreas decaimiento CaF_2 y SiO_2	211
5.57. Plot CaF2.decay - SiO2.decay	213
5.58. get.experimentos.canal(data, L, quim1, quim2)	219
5.59. exp.canal.acum.cf	221
5.60. diff2()	221
5.61. exp.canal.unit.cf	221
5.62. exp.canal.unit.cf - identificación	222
5.63. exp.conj.unit.cf	223
5.64. Ai.SiO2.unit	224
5.65. Ai.CaF2.unit	224
5.66. Coeficiente de proporcionalidad	224
5.67. plot.Ai	225
5.68. plot.BGO_A.Ai.SiO2.unit - ciclo	226
5.69. plot.BGO_A.Ai.CaF2.unit - ciclo	233
5.70. Histograma A_{exp}^{unit} BGO_A_11.	240
5.71. Medias y desviaciones estándar para SiO_2	241

5.72. Regresión lineal SiO_2	244
5.73. Resumen regresión lineal SiO_2	245
5.74. Regresión lineal SiO_2 medio	247
5.75. Resumen regresión lineal SiO_2 medio	249
5.76. Medias y desviaciones estándar para CaF_2	250
5.77. Regresión lineal CaF_2 medio	252
5.78. Resumen regresión lineal CaF_2 medio	254
5.79. Estimación del tamaño de muestra para medias, dado un predetermi- nado margen de error.	257
5.80. Estimación del tamaño de muestra para medias, dado un predetermi- nado margen de error.	260

Capítulo 1

Objeto

El objetivo principal de la presente Tesis es procesar, preparar y analizar los espectros de radiación γ emitidos por muestras de minerales de fluorita en un proceso de activación neutrónica cíclica con el fin de:

- Estudiar la activación neutrónica cíclica de la fluorita como método para obtener el contenido en sílice [Sección 3.1](#), [Sección 5.5](#), [Sección 5.6](#), [Subsección 5.7.3](#), [Subsección 5.7.5](#), pues ya se demostró su uso para el contenido en flúor [95].
- Avanzar estudios anteriores de activación neutrónica cíclica para el estudio del flúor [Sección 5.5](#), [Sección 5.6](#), [Subsección 5.7.3](#), [Subsección 5.7.5](#), [Sección 5.8](#).
- Demostrar de que no es necesaria la calibración de los canales con fuentes de isótopos radioactivos en procesos industriales, siendo suficiente conocer las lecturas de los canales, sin necesidad de asignarles una energía determinada [Sección 5.5](#), [Sección 5.6](#).
- Encontrar un parámetro cuya correlación con la ley de la muestra sea mejor que el utilizado en Tesis anteriores para la determinación del contenido en flúor [Sección 5.6](#).
- Estudiar el número de ciclos ideal para la determinación de flúor y sílice [Sección 5.8](#).

El plan de trabajo para lograr estos objetivos consta de los siguientes pasos:

1. Recopilación de antecedentes e información básica para el desarrollo de la tesis.
 - Concepto de activación neutrónica.
 - Métodos de activación neutrónica.
 - Estudios anteriores de activación neutrónica de muestras de flúor.
2. Estudio teórico de las reacciones nucleares en una muestra de fluorita para la determinación de su contenido en sílice.
3. Experimentos.
 - Activación neutrónica con registro de la radiación γ diferida para 9 muestras con 3 detectores y 3 réplicas de 145 ciclos: 11745 experimentos.
4. Análisis de resultados y conclusiones.
 - Tratamiento de los datos obtenidos en los experimentos, [Subsección 5.5.2](#).
 - Optimización técnica.
 - Conclusiones al estudio.
 - Estudio de errores y posibles líneas de investigación futuras.

Capítulo 2

Antecedentes

El equipo Q-Thermie del Departamento de la Universidad de Oviedo lleva años investigando sobre la aplicación de técnicas de activación neutrónica a muestras de mineral de fluorita con el fin de determinar rápida y de manera precisa el contenido en flúor de las mismas con el objetivo de su aplicación industrial en plantas de concentrado del mineral.

Dentro de esta línea de investigación se han publicado tesis doctorales y artículos en revistas científicas.

Esta tesis continúa la línea de investigación emprendida por Q-Thermie y pretende demostrar su aplicación para la determinación del contenido en sílice de muestras de mineral de fluorita.

Expondremos a continuación brevemente los conceptos básicos sobre activación neutrónica, el desarrollo que ha tenido la activación neutrónica y las contribuciones de Q-Thermie como antecedentes necesarios para la elaboración de la presente tesis.

2.1. Técnicas de activación neutrónica

El análisis por activación neutrónica, en adelante NAA, consiste en la irradiación o bombardeo de un núcleo con neutrones para producir radio-nucleidos. Es una técnica analítica útil para realizar análisis cuantitativos y cualitativos para la determinación de gran cantidad de elementos principales, así como de elementos traza contenidos en muestras procedentes de múltiples campos científicos y técnicos. Para muchos elementos y usos, el NAA ofrece una precisión mayor que la ofrecida por otros métodos analíticos, lo que unido a su fiabilidad hace que este método sea reconocido como el método con el que comparar los resultados obtenidos por nuevas técnicas desarrolladas para el análisis de muestras.

Los instrumentos básicos y esenciales para realizar un análisis de muestra por NAA son:

- Una fuente de neutrones.
- Instrumentación adecuada para detección de rayos gamma.
- Un detallado conocimiento de las reacciones que ocurren cuando los neutrones interactúan con los blancos atómicos.

2.2. Introducción a la técnica

La secuencia de sucesos ocurridos durante el tipo más común de reacción nuclear usado en NAA se denomina la captura del neutrón. Así, cuando un neutrón interactúa con el núcleo objetivo, denominado blanco, origina un núcleo compuesto formado por el blanco y el neutrón anteriormente citado, de tal manera que el núcleo compuesto adquiere un estado excitado. La energía de excitación del núcleo compuesto se debe a la energía de unión del neutrón con el núcleo.

El núcleo compuesto casi instantáneamente se desexcitará hasta alcanzar una configuración más estable, emitiendo para ello uno o más rayos gamma instantáneos característicos. En algunos casos, esta nueva configuración produce un núcleo radioactivo que también decae por la emisión de uno o más rayos gamma característicos, pero en una cantidad más lenta según la vida media del núcleo radioactivo.

La [Figura 2.1](#) ilustra una reacción nuclear típica de un análisis NAA.

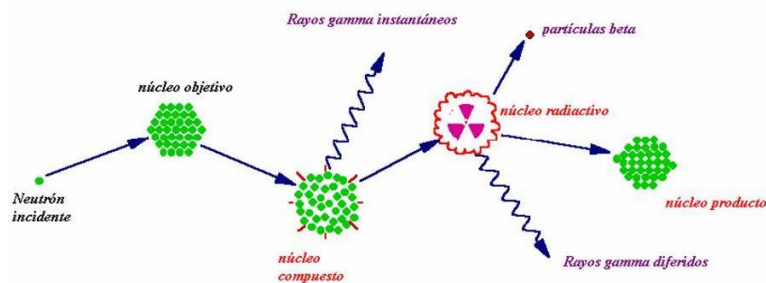


Figura 2.1: Principio de la activación neutrónica

La cantidad de radio-nucleidos resultante dependerá del número de blancos bombardeados, de su tamaño y del número de proyectiles utilizado, es decir, del número de núcleos objetivo, de su sección eficaz, que define la probabilidad de que se produzca la colisión y del número de neutrones enviados.

El tipo de radio-nucleido producido dependerá de la energía de los neutrones con los que se irradia la muestra y de las interacciones que finalmente se produzcan pues

en una muestra heterogénea hay núcleos de distintos elementos. Así, puede ocurrir que se produzca un mismo radio-nucleido como consecuencia de distintas interacciones. Por tanto, pueden darse distintos procesos en el estudio de una reacción, por lo que hay que tener en cuenta esta posibilidad para descartar interferencias.

Cuando un neutrón interactúa con el núcleo objetivo por medio de una colisión no elástica, el núcleo compuesto adquiere un estado excitado. La energía de excitación del núcleo compuesto se debe a la energía de ligadura del neutrón con el núcleo. El núcleo compuesto se desexcita casi instantáneamente pasando a tener una configuración más estable a través de la emisión de uno o más rayos γ instantáneos característicos.

En muchas ocasiones, esta nueva configuración da lugar a un núcleo radiactivo el cual también se desexcita (o decae) debido a la emisión de uno o más rayos diferidos característicos, pero a una velocidad mucho menor de acuerdo con la vida media única del núcleo radiactivo.

En principio, por esta razón, con respecto al tiempo de medida de la radiación producida, los métodos de activación neutrónica están divididos en dos categorías:

- Análisis de activación neutrónica con emisión y detección de rayos γ instantáneos (PGNAA), donde la medida tiene lugar durante la radiación.
- Análisis de activación neutrónica con emisión y detección de rayos gamma diferidos (DGNAA), donde las medidas se realizan a través de la emisión radiactiva de decaimiento del elemento radiactivo.

La técnica DGNAA y a veces llamada convencionalmente NAA es útil en la inmensa mayoría de los elementos que producen nucleidos radiactivos. Es la que viene utilizando el equipo Q-Thermie y la utilizada en los experimentos hechos para el estudio de esta tesis.

El término análisis de activación neutrónica se refiere normalmente al análisis por medio de la espectrometría de rayos gamma, a menos que se especifique una alternativa, tal como es el caso del análisis de neutrones resultantes de las colisiones. Espectrometría de activación, se refiere, entonces, a la activación de un elemento con neutrones, y a la posterior determinación usando espectrometría de rayos gamma diferidos del decaimiento de los productos de los elementos en la muestra.

Algunos elementos no se activan durante la irradiación con neutrones termales para producir rayos gamma, así como por ejemplo, le ocurre al carbono, hidrógeno, nitrógeno y oxígeno, que no afectarán al análisis. Por otra parte, el aluminio, el sodio y el cloro se activan muy bien, y podrían causar interferencias que habrá que estudiar.

El tiempo para el análisis depende de los elementos a medir. Si el elemento se activa y da lugar a nucleidos de vida corta, se puede irradiar y contar en unos pocos minutos.

2.3. Conceptos básicos sobre la naturaleza atómica

Los átomos están compuestos de tres partículas subatómicas principales: protón, neutrón y electrón.

- Los protones son partículas con carga positiva, tienen la misma masa que el átomo de hidrógeno, y se encuentran en el núcleo de un átomo.
- Los neutrones son partículas que no tienen carga eléctrica, tienen la misma masa que un átomo de hidrógeno, y se encuentra en el núcleo de un átomo.
- Los electrones son partículas con carga negativa, que tienen una masa mil ochocientas veces más pequeña que la masa del átomo de hidrógeno, y se encuentran en las órbitas alrededor del núcleo de un átomo.

Los isótopos son nucleidos que tienen el mismo número atómico y son de alguna forma el mismo elemento, pero difieren en el número de neutrones.

El *número atómico* de un átomo es el número de protones existentes en el núcleo.

El *número másico* de un átomo es el número total de nucleones (protones y neutrones) existentes en el núcleo.

La notación A_ZX_N se utiliza para identificar un nucleido específico. En esta notación X representa el símbolo químico del elemento en cuestión, A representa el número másico, Z representa el número atómico y N representa el número de neutrones.

Niveles de energía de los átomos

Los electrones que rodean el núcleo se mueven en órbitas bien definidas. Algunos de estos electrones están más fuertemente unidos en el átomo que otros. Así, los electrones más alejados del núcleo requieren una energía menor para ser trasladados de sus órbitas que los electrones situados en órbitas más próximas al núcleo. El proceso de traslación de un electrón de un átomo se llama ionización, y la energía requerida para trasladar el electrón se llama energía de ionización.

En un átomo neutro (número de neutrones = Z) es posible que los electrones estén en diferentes órbitas, cada una con un nivel de energía. El estado de menor energía es el estado, en el cual, el átomo se encuentra normalmente y se llama estado fundamental. Cuando el átomo posee más energía que en el estado fundamental, se dice que está en un estado excitado.

Un átomo no puede estar en un estado excitado por un periodo de tiempo indefinido. Un átomo excitado transitará eventualmente a cualquiera de los dos estados siguientes; un estado excitado de menor energía, o directamente a su estado fundamental, por emisión de un discreto haz de energía electromagnética llamado un rayo X. La energía del rayo X será igual a la diferencia entre los niveles de energía del átomo y normalmente oscilará en una magnitud comprendida entre 1 eV y 105 eV.

Niveles de energía de los núcleos

Los nucleones situados en el núcleo de un átomo, al igual que los electrones que rodean el núcleo, lo hacen en diferentes capas que corresponden a distintos estados de energía. Los estados de energía de los núcleos están menos definidos y menos sobrentendidos que los de los electrones. Existe un estado de energía más bajo (estado fundamental) y posibles estados discretos excitados para un núcleo. Donde los estados discretos de energía para los electrones de un átomo se miden en eV o keV, los niveles de energía de los núcleos son considerablemente mayores y normalmente se miden en MeV.

Un nucleón que se encuentra en un estado excitado no permanecerá en ese nivel de energía por un periodo indefinido. Como los electrones en un átomo excitado, los nucleones en un núcleo excitado transitarán en dirección a sus configuraciones de energía más bajas emitiendo un discreto haz de radiación electromagnética llamada un rayo gamma (rayo γ). Las únicas diferencias entre los rayos X y los rayos γ son sus niveles de energía y el lugar de procedencia :la corteza o el núcleo.

El estado fundamental y los estados excitados de un núcleo se pueden captar en un diagrama del nivel de energía nuclear. El diagrama de nivel de energía nuclear consiste de una pila de barras horizontales, una barra por cada uno de los estados excitados del núcleo. La distancia vertical entre la barra representa un estado excitado y la barra representa el estado fundamental, que es proporcional al nivel de energía del estado excitado con respecto al estado fundamental. Esta diferencia de energía entre el estado fundamental y el estado excitado se llama *energía de excitación del estado excitado*. El estado fundamental de un nucleido tiene energía de excitación cero.

2.4. Fundamentos teóricos de las reacciones nucleares

El número másico puede llegar a ser tan grande, que la proporción entre los neutrones y los protones existentes en el núcleo llegue a ser mayor para el núcleo estable. El núcleo estable puede tener un exceso o deficiencia de neutrones y por tanto puede originar un proceso de transformación conocido como decaimiento beta. El núcleo no estable puede dar lugar a una variedad de otros procesos como emisión de partículas alfa o decaimiento neutrónico. Como resultado de ese proceso de decaimiento, el núcleo final será más estable. Todos los nucleidos con número atómico mayor de 82 son radioactivos.

Un núcleo puede presentar una configuración más estable al emitir una cierta radiación, lo que da lugar a un proceso de desintegración espontánea conocido como decaimiento radioactivo o decaimiento nuclear. En la práctica, esta radiación puede ser radiación electromagnética, emisión de partículas o ambas a la vez.

Los cuatro principios de más interés para el estudio del decaimiento radioactivo

son:

1. Principio de conservación de la carga eléctrica. Este principio implica que la carga eléctrica nunca se destruye; únicamente la carga positiva puede neutralizarse en alguna ocasión con la carga negativa.
2. Principio de conservación del número másico. Este principio no permite un cambio en el número de nucleones, aunque alguna vez se permite la transformación de un protón a un neutrón y viceversa.
3. Principio de conservación de masa y energía. Este principio implica que el total de energía cinética y la energía equivalente de la masa en un sistema debe conservarse en todos los decaimientos y reacciones. La masa puede convertirse en energía y la energía en masa, pero la suma de la masa y la energía debe ser constante.
4. Principio de conservación del momento. Según este principio, el momento es constante debido a la distribución de la energía cinética disponible entre el producto del núcleo, de las partículas y/o de la radiación. La cantidad total es la misma antes y después de la reacción e incluso así, se puede distribuir de distinta manera entre los diferentes nucleidos y/o partículas.

Los neutrones tienen distintos modos de reaccionar con los núcleos de los distintos elementos según sea el elemento, y según sea su energía.

La clasificación energética de los neutrones los divide en termales o lentos, $< 0,5$ eV, epitermales, $0,5$ eV / 1 MeV, y rápidos, > 1 MeV.

Los neutrones termales son aquellos que se encuentran en equilibrio térmico con los núcleos del medio en el que se encuentra. Se les suele aplicar las nociones de la teoría cinética de los gases, por lo que su distribución sigue la estadística de Maxwell-Boltzmann.

Los neutrones epitermales o intermedios resultan de la colisión elástica de los neutrones rápidos en materiales de bajo número atómico. La distribución de estos neutrones es inversamente proporcional a su velocidad.

Los neutrones rápidos son aquellos que tienen una energía inferior a 10 MeV, valor utilizado como límite por debajo del cual los instrumentos para la detección de estos neutrones resultan inadecuados.

Todos los neutrones de energía superior a 10 MeV se consideran neutrones de alta energía.

Los neutrones no tienen carga eléctrica, no siendo afectados por campos electromagnéticos. Su único efecto es el de impactar con los núcleos, pudiendo producirse un choque elástico o inelástico. En algunas reacciones hay absorción de neutrones, en otras hay, además, producción de partículas. El proceso en el cual los neutrones reducen su energía o número se llama atenuación.

2.4.1. Producción de neutrones

Las diferentes fuentes de neutrones se basan principalmente en:

- La fisión espontánea, como es el caso de la fuente de Californio-252. Algunos isótopos, en particular el Uranio-235 y varios isótopos de los elementos transuránicos, producidos artificialmente, pueden desintegrarse mediante un proceso de fisión espontánea en el que el núcleo se divide en dos fragmentos.

Al igual que el Uranio, el Californio es un elemento radiactivo creado artificialmente mediante la transmutación nuclear artificial de isótopos radiactivos de elementos más ligeros. Todos los isótopos del Californio son radiactivos, siendo el isótopo que se produce con mayor facilidad el Californio-252, el cual decae por fisión espontánea y tiene una vida media de 2.6 años.

El Californio-252 es un potente emisor de neutrones, estimándose que 1 microgramo del mismo libera 170 millones de neutrones por minuto. Debido a que el Californio es una fuente muy eficiente de neutrones, cabe esperar que tenga muchos usos en el futuro. Hoy tiene aplicación práctica como fuente de neutrones de alta intensidad en sistemas electrónicos, en la investigación médica, en técnicas especiales para la determinación analítica de metales y en la determinación del agua en el petróleo.

- Las reacciones (α , n), como son las fuentes radioisotópicas de Americio-Berilio.

El Americio es un elemento radiactivo creado artificialmente bombardeando Plutonio-238 con partículas γ o Plutonio-239 con neutrones y purificándolo posteriormente.

El isótopo Americio-241 se emplea, como usos industriales, como fuente de radiaciones α de 59 keV y como componente de fuente de neutrones de 3 a 10 MeV.

La fuente radioactiva utilizada en este tipo de fuente de neutrones es del tipo α , compuesto de Americio 241 y Berilio. El Americio emite de forma natural partículas α que, al incidir sobre el Berilio, lo descompone en Carbono 12 y neutrones. La bibliografía consultada dice que la combinación Am-Be produce entre 2 y 3 neutrones por cada microcurio de Americio.

Por lo tanto, el emisor o fuente de neutrones, genera neutrones de alta energía (también denominados neutrones *rápidos*) que colisionan con los núcleos de los átomos de la materia que se quiere analizar. El choque con estos átomos se produce de forma elástica de tal forma que los neutrones pierden energía y se transforman en neutrones térmicos de baja energía.

El Berilio es muy permeable a los rayos X y libera neutrones cuando es bombardeado con partículas α (del orden de 30 neutrones por millón de partículas α).

El Berilio es mezclado homogéneamente con el emisor alfa y normalmente encerrado en una cápsula de acero inoxidable.

En nuestros ensayos NAA utilizaremos una fuente de activación de Am-Be de 1 Ci utilizada.

Las fuentes de Americio-Berilio emite únicamente neutrones rápidos, y los únicos neutrones termales que pueden existir son los procedentes de la termalización de los neutrones rápidos.

En el [Figura 2.2](#) podemos observar que la energía de los neutrones procedentes de una fuente de Americio Berilio se extiende mayoritariamente en un intervalo de energías que entre 3 y 10 MeV aproximadamente. En este intervalo la sección eficaz más significativa es la que corresponde a la reacción con el flúor, de donde se deduce que el flúor es el único responsable de la presencia de ^{16}N , y que la lectura del mismo estará relacionada únicamente con la presencia original, como se ha demostrado en la Tesis *Desarrollo de un método rápido basado en técnicas de activación neutrónica para la determinación de contenido en Flúor de muestras de material bruto* realizada por Miguel Rey Ronco [95]. En el caso de la sílice, se demostrará que habremos de buscar aquéllos isótopos presentes en la muestra con mayores secciones eficaces en el rango inferior de energías de la fuente, por debajo de 3 MeV.

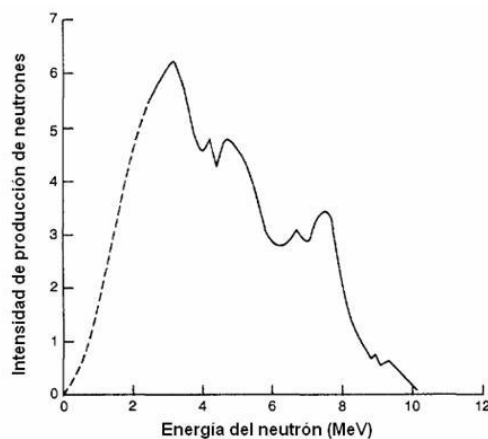


Figura 2.2: Espectro de energía de una fuente de $^{241}Am - Be$

- Los aceleradores de partículas mediante reacciones del tipo (p, n), (d, n).

- Los reactores nucleares.

Una fuente Am-Be emite neutrones con energías del orden de varios MeV, denominándose rápidos. Al incidir en cualquier material, los neutrones rápidos sufren preferentemente dispersiones elásticas con los núcleos. Van rebotando de núcleo en núcleo, perdiendo cada vez una fracción de su energía inicial, hasta que después de muchos choques (pueden ser varios cientos) su velocidad promedio es comparable con las velocidades térmicas de las moléculas. Estos neutrones, ahora térmicos, sufren más reacciones nucleares que los rápidos.

La interacción de los neutrones con la materia es un proceso bastante diferente al de las partículas cargadas y la radiación electromagnética. Dado que los neutrones no poseen carga eléctrica, no pueden ionizar directamente la materia que atraviesan y por lo tanto su interacción es únicamente con los núcleos de los átomos.

Los núcleos pierden su energía esencialmente por choques elásticos sobre los núcleos, de tal forma que una parte de su energía se transfiere a los núcleos de la materia en forma de energía cinética. El frenado de los neutrones conduce generalmente a una situación de equilibrio termodinámico con los núcleos del medio ambiente y a partir de ese momento, los neutrones son capturados emitiendo una partícula cargada o un fotón gamma.

1. Reacciones de dispersión. Las interacciones de una partícula en movimiento con cualquier átomo circundante se rigen por las propiedades de las colisiones. Así, existen dos tipos de dispersión: elástica e inelástica.

Las reacciones de dispersión son aquellas en que la dirección del neutrón después de la interacción con el núcleo es diferente a la que tenía antes. La abreviatura generalmente usada para definir las reacciones de dispersión es (n, SCT).

- Dispersión elástica, (N, EL) . Una reacción de dispersión elástica se caracteriza porque la reacción ocurre con el núcleo de los átomos y tiene un gran ángulo de deflexión.

En una reacción de dispersión elástica entre un neutrón y un núcleo bombardeo no existe transferencia de energía en la excitación nuclear. El momento y la energía cinética del sistema se conservan. Además, es normal alguna transferencia de energía cinética desde el neutrón al núcleo que adquiere la cantidad de energía cinética que pierde el neutrón, tanto mayor cuanto más ligero sea el núcleo.

La dispersión elástica de neutrones por núcleos puede ocurrir de dos maneras. La más usual de las dos interacciones es la absorción del neutrón, formando un núcleo compuesto, seguido por la re-emisión de un neutrón, de tal manera que el total de energía cinética se conserva y el núcleo retorna a su estado fundamental. Esta se conoce como dispersión elástica de

resonancia y depende en gran medida de la energía cinética inicial poseída por el neutrón. Debido a la formación del núcleo compuesto, también se refiere como dispersión elástica compuesta.

El segundo método es el denominado dispersión elástica potencial y se entiende por la visualización de neutrones y núcleos como bolas de billar con superficies impenetrables. La dispersión potencial tiene lugar con neutrones incidentes que tienen una energía de alrededor de 1 MeV. En la dispersión potencial, el neutrón realmente no toca el núcleo y por lo tanto no se forma el núcleo compuesto.

- Dispersión inelástica, (N, INL). La energía total no se conserva y el núcleo captura un neutrón y el núcleo compuesto expulsa rápidamente otro neutrón, cuya energía cinética es inferior a la del neutrón capturado, quedándose el núcleo residual en estado excitado. Cuando el núcleo decae a su nivel de energía original, emite una radiación, normalmente, un rayo gamma llamado rayo gamma de dispersión inelástica.

El neutrón incidente es absorbido por el núcleo blanco, formando un núcleo compuesto, de tal manera que dicho núcleo compuesto emitirá un neutrón de energía cinética más baja que deja al núcleo original en un estado excitado. El núcleo, una vez excitado, emitirá el exceso de energía para alcanzar su estado fundamental, por una o más emisiones gamma.

Para el núcleo que ha alcanzado su estado fundamental, la suma de la energía cinética del neutrón de salida, el núcleo blanco, y el total de energía gamma emitida es igual a la energía cinética inicial del neutrón incidente.

2. Reacciones de absorción.

Al igual que en la dispersión inelástica los neutrones son absorbidos por los núcleos, excitándose el átomo. El núcleo emite radiación o una partícula hasta alcanzar un nivel estable. Cuando emite radiación gamma, el proceso se denomina captura radiactiva, y la energía de la radiación gamma es característica del elemento capturador del neutrón. De hecho, la dispersión inelástica es una reacción de absorción en la que la partícula emitida es un neutrón.

Dentro de las reacciones de absorción se están las reacciones de captura radiactiva, las reacciones de expulsión de partículas y las reacciones de fisión.

En una reacción de captura radiactiva se produce la interacción de un neutrón con un núcleo, en la cual se origina un núcleo compuesto formado por el núcleo original y por el neutrón, de tal manera que dicho núcleo compuesto adquiere un estado excitado. Este núcleo compuesto decaerá hasta alcanzar su estado fundamental mediante la emisión de rayos gamma característicos.

En una reacción de expulsión de partícula la partícula incidente entra en el núcleo blanco formando un núcleo compuesto. El núcleo compuesto formado ha sido excitado a un nivel de energía suficiente alto como para causarle la expulsión de una nueva partícula cuando el neutrón incidente permanece en el núcleo. Después de expulsar la nueva partícula, el núcleo permanente puede no existir en un estado excitado dependiendo del balance de energía-masa de la reacción.

La fisión nuclear es el proceso mediante el cual un átomo se escinde en dos o más fragmentos. La fisión puede ocurrir de forma espontánea, llamada normalmente decaimiento radiactivo, en núcleos atómicos inestables (es decir, radiactivos). Un ejemplo de esto es la emisión de partículas alfa, que no son más que núcleos de helio. Está claro que un núcleo que emita radiación alfa se está fisionando en un núcleo de helio y en un núcleo de otro elemento. Sin embargo, se entiende corrientemente por fisión nuclear la descomposición de ciertos núcleos atómicos estables o inestables cuando son bombardeados con neutrones. La ganancia de un neutrón conduce a la formación de un nuevo isótopo con un número másico superior que evoluciona de distintas formas.

Los neutrones pueden inducir muchos otros tipos de reacción nuclear, emitiéndose, por ejemplo, protones, partículas alfa, deuterones y combinaciones de éstos. Tenemos así las reacciones posibles:

n,A o n, α	Partículas alfa.
n,D	Deuterio.
n, γ	Rayos gamma.
n,n	Reacción con emisión de neutrones.
n,P	Protones.
n,T	Tritio.
n,X	Reacción de proceso no específico.

2.4.2. Productos de decaimiento radiactivo

Los elementos que se producen durante las reacciones nucleares, si son radiactivos decaen según una forma característica, dando lugar fundamentalmente a partículas alfa y beta, rayos X y gamma, neutrones, protones y captura de electrones.

1. Partículas α .

Es la emisión de partículas alfa (núcleo de Helio), las cuales se pueden representar indistintamente ${}^4_2\text{He}$ o ${}^4_2\alpha$.

Cuando un núcleo inestable emite una partícula alfa, el número atómico se reduce por 2 y el número másico decrece por 4 con el fin de cumplir los principios de conservación de la carga eléctrica y de conservación del número másico.

Las partículas alfa, núcleos completamente ionizados de ${}^4\text{He}$ con carga eléctrica +2, son mono-energéticas, y tienen energías en el rango de 2 al 10 MeV. No es normal su emisión como resultado del decaimiento originado en los procesos de activación por neutrones. Debido a su tamaño su recorrido es pequeño.

2. Partículas β .

El decaimiento β puede ser de signo negativo o positivo: La desintegración β^- se produce cuando en un núcleo los isóbaros vecinos de mayor número atómico tienen menor masa atómica. En tal caso, en dicho núcleo se produce el cambio de un neutrón en un protón, con la emisión de una partícula beta negativa β^- , también denominado electrón ($0-1e$) y una partícula denominada neutrino ν . El número inicial y final de nucleones es el mismo, de tal forma que la partícula β^- y el neutrino no contribuyen al número másico. Para que se cumpla el principio de conservación de la carga eléctrica, se produce la emisión de una partícula β^- .

Por el contrario, la desintegración β^+ se produce cuando en un núcleo los isóbaros vecinos de menor número atómico tienen mayor masa atómica. En tal caso, en dicho núcleo se produce el cambio de un protón en un neutrón, con la emisión de una partícula beta positiva (β^+), denominada también positrón ($0+1e$) y, al igual que en el caso de la desintegración β^- , una partícula denominada neutrino ν .

3. Rayos X.

Se producen como el resultado de una captura de electrones durante el decaimiento de radionucleídos producidos por activación neutrónica o de conversiones internas.

4. Conversión interna.

Se produce cuando se emite un rayo γ desde un núcleo. Este rayo interactúa con un electrón orbital produciendo una conversión electrónica emitiendo Rayos X característicos del padre.

Un nivel nuclear puede estar en un estado excitado por haberse producido la desintegración radioactiva del núcleo, con emisión de partículas α o β o como resultado de una reacción nuclear.

Así, las transiciones electromagnéticas ocurrirán a través de dos procesos, la emisión de partículas γ y la emisión de un electrón de la corteza atómica a través de la conversión interna. Este segundo proceso ocurre como resultado

de la interacción electromagnética entre el campo del núcleo y los electrones atómicos, convirtiéndose la energía de excitación nuclear en energía cinética. La descripción del proceso de conversión establece que no se trata de la emisión de una partícula gamma por el núcleo que se reabsorbe luego por los electrones, en un proceso de tipo fotoeléctrico, sino que es un proceso independiente que causa la desexcitación directa del nivel que se trate.

La conversión interna de la energía de excitación del núcleo en energía cinética de un electrón orbital da lugar a la aparición en el espectro de líneas de electrones que corresponden a valores de energía bien definidos.

5. Rayos γ .

Se producen como resultado de una transición entre niveles excitados de un núcleo. Los Rayos γ pueden ser el resultado de la absorción de un neutrón durante una activación, o pueden producirse de forma diferida respecto a la activación, cuando decae un elemento radiactivo. El espectro de Rayos γ tiende a ser bastante complejo y a tener Rayos γ de alta energía, (superior a 6 MeV). El rango de energía típico está entre 0,05 y 4 MeV.

Se puede definir a los rayos gamma (γ) como aquella radiación electromagnética de altas energías asociada a la radiactividad. Radiactividad es la desintegración espontánea de núcleos atómicos mediante la emisión de partículas subatómicas llamadas partículas α , que sólo penetran unas milésimas de centímetro en el aluminio y partículas beta, que son casi 100 veces más penetrantes. En experimentos posteriores se sometieron las emisiones radiactivas a campos eléctricos y magnéticos, y estas pruebas pusieron de manifiesto la presencia de un tercer componente, los rayos gamma, que resultaron ser mucho más penetrantes que las partículas beta. En un campo eléctrico, la trayectoria de las partículas beta se desvía mucho hacia el polo positivo, mientras que la de las partículas alfa lo hace en menor medida hacia el polo negativo; los rayos gamma no son desviados en absoluto. Esto indica que las partículas beta tienen carga negativa, las partículas α tienen carga positiva (se desvían menos porque son más pesadas que las partículas beta) y los rayos gamma son eléctricamente neutros.

Las emisiones α y β suelen ir asociadas con la emisión γ . Los rayos γ no poseen carga ni masa; por tanto, la emisión de rayos gamma por parte de un núcleo no conlleva cambios en su estructura, sino simplemente la pérdida de una determinada cantidad de energía radiante. Con la emisión de estos rayos, el núcleo compensa el estado inestable que sigue a los procesos α y β . La partícula α o beta primaria y su rayo γ asociado se emiten casi simultáneamente. Sin embargo, se conocen algunos casos de emisión α o β pura, es decir, procesos α o β no acompañados de rayos γ , como los explicados con anterioridad. También se conocen algunos isótopos que emiten rayos γ de forma pura. Esta emisión γ

pura tiene lugar cuando un isótopo existe en dos formas diferentes, los llamados isómeros nucleares, con el mismo número atómico y número másico pero distintas energías. La emisión de rayos γ acompaña a la transición del isómero de mayor energía a la forma de menor energía.

6. Emisión de neutrones.

Se expulsa un neutrón del núcleo del átomo. Ya que el número de protones en un átomo no está cambiando en este proceso, el elemento no está cambiando a otro, sin embargo, se está convirtiendo en un isótopo del elemento.

7. Emisión de protones.

Se expulsa un protón de núcleo por lo que se produce un elemento diferente.

8. Captura electrónica.

Los procesos de emisión β^- y β^+ son idénticos, salvo en los signos de las cargas. Sin embargo, existe una importante asimetría. En los átomos de materia ordinaria, los núcleos están rodeados de electrones. El núcleo experimenta el mismo cambio que en un proceso de desintegración β^+ si simplemente captura un electrón de los que rodea el núcleo, situado normalmente en las órbitas más cercanas al núcleo. Así, la captura electrónica existe como alternativa a los procesos de desintegración β^+ y de hecho, pueden tener lugar con una diferencia de masa menor entre los núcleos.

Así, los núcleos que tienen un exceso de protones pueden capturar un electrón de una de las órbitas más cercanas al núcleo, electrón que se combina inmediatamente con un protón del núcleo para formar un neutrino. Este proceso es conocido como captura electrónica. El electrón se captura normalmente desde la órbita más alejada (el orbital K) y consecuentemente este proceso se llama captura-K.

El neutrino se forma al mismo tiempo que el neutrón, y la energía liberada en el proceso sirve para conservar el momento. Los rayos X emitidos cuando un electrón de una de las órbitas de alta energía se mueve para rellenar el vacío de la órbita K son característicos.

En la producción del mismo producto hijo, se produce la captura de electrón y emisión de protón. Para que ocurra la emisión del positrón, la masa del producto hijo debe ser menor que la masa del padre en una cantidad igual o al menos dos veces la masa de un electrón. Esta diferencia entre el padre y el hijo es necesaria para contar dos partículas presentes en el padre pero no en el hijo. La otra partícula es que el hijo tiene un orbital electrón menos que el padre.

9. Transición isomérica o isómera.

La transición isomérica ocurre comúnmente inmediatamente después de la emi-

sión de la partícula. En ocasiones, el núcleo puede permanecer en un estado excitado por un periodo considerable de tiempo antes de llegar al estado fundamental. Un núcleo que permanece en un estado excitado se conoce como un isómero nuclear porque difiere en energía y comportamiento de otros núcleos con el mismo número atómico y número másico. El decaimiento de un isómero nuclear excitado a un nivel de energía menor se llama transición isomérica.

2.4.3. Interacción de la radiación con la materia

Desde el punto de vista del efecto que tienen sobre la materia (por ejemplo, sobre el cuerpo humano) las radiaciones se clasifican en ionizantes y no ionizantes. Entre las primeras están los rayos X, rayos alfa, beta y gama. Estas radiaciones son capaces de ionizar la materia por donde pasan, esto significa que provocan desprendimiento de electrones de los átomos, y si éstos están formando moléculas en células, afectará el comportamiento del organismo. Esto se debe a la gran cantidad de energía que poseen. Las radiaciones no ionizantes son menos energéticas y no tienen este efecto sobre la materia. Podrán calentarla (radiación infrarroja), o atravesarla fácilmente (ondas de radio), pero su impacto biológico es, en general, despreciable.

Una partícula cargada en movimiento tiene un campo eléctrico alrededor que interacciona con la estructura atómica del medio que atraviesa. Esta interacción decelera la partícula y acelera los electrones en los átomos del medio. Los electrones acelerados pueden adquirir suficiente energía para escapar del átomo padre. Este proceso, por lo cual la radiación roba los electrones orbitales, se llama ionización.

Las partículas sin carga en movimiento no tienen campo eléctrico, así que sólo pueden perder energía y causar ionización por colisiones o por dispersión. Un fotón puede perder energía por el efecto fotoeléctrico, el efecto Compton o producción del par. Ya que la radiación ionizada crea pares de iones, la intensidad de ionización o la ionización específica se define como el número de pares de iones formados por centímetro de viaje en un material dado. La cantidad de ionización producida por una partícula cargada por unidad de longitud de camino, lo cual es una medida de su poder ionizante, es aproximadamente proporcional a la masa de la partícula y al cuadrado de su carga.

La radiación α se produce normalmente del decaimiento radioactivo de nucleidos pesados y de ciertas reacciones nucleares.

La partícula α está formada por dos neutrones y dos protones, así que es esencialmente lo mismo que el núcleo de un átomo de Helio. Como no tiene electrones, la partícula alfa tiene una carga de +2. Esta carga positiva hace que la partícula alfa robe electrones de las órbitas de los átomos vecinos. Cuando la partícula alfa atraviesa material, mueve electrones de las órbitas de los átomos a su paso. Para mover dichos electrones, se requiere energía, la cual se reduce en cada reacción. Eventualmente

la partícula consumirá energía cinética, gana 2 electrones en órbita, y llega a ser un átomo de Helio.

A causa de su fuerte carga positiva y su gran masa, la partícula alfa deposita una gran cantidad de energía en una pequeña distancia de trayecto. Esta rápida entrega de energía limita la penetración de las partículas alfa, [Figura 2.3](#). La mayoría de las partículas energéticas alfa se paran por unos pocos centímetros de aire o una hoja de papel.

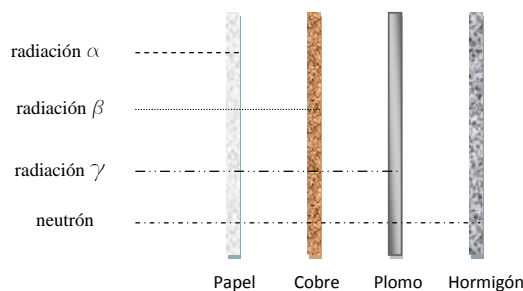


Figura 2.3: Distancias recorridas por las radiaciones

La Radiación β^- consiste, como se ha indicado anteriormente, en la emisión de una partícula β^- que es un electrón que ha sido expulsado a una alta velocidad de un núcleo inestable. Un electrón tiene una masa pequeña y una carga eléctrica de -1 . Las partículas beta causan ionización por desplazamiento de electrones de órbitas atómicas. Dicha ionización se produce por colisiones con electrones orbitales. Cada colisión cambia la energía cinética de la partícula beta, causando su moderación. Eventualmente la partícula beta se frenará suficientemente como para permitir ser capturada como un electrón en un átomo.

La Radiación β^+ más consiste en la emisión de positrones, los cuales son electrones cargados positivamente. Exceptuando su carga positiva, son idénticos a las partículas beta-menos e interactúan con la materia de manera similar. Los positrones son de vida muy corta y además son rápidamente aniquilados por interacción con un electrón cargado negativamente, produciendo dos emisiones gamma con una energía combinada igual a la resta de la masa de los electrones positivos y negativos.

La Radiación γ es una radiación electromagnética. Se refiere comúnmente a rayo γ y es muy similar a un rayo X. La diferencia es que los rayos γ se emiten desde el núcleo de un átomo, y los rayos X son producidos por electrones orbitales. El rayo X se produce cuando electrones orbitales se mueven a una órbita de menor energía o cuando electrones de rápido movimiento se acercan a un átomo, son desviados y decelerados y reaccionan con el campo eléctrico del átomo. El rayo γ se produce por el decaimiento de los núcleos excitados y por reacciones nucleares. Debido a que el rayo γ no tiene ni carga ni masa, es difícil de parar y tiene un alto poder penetrante.

Una pequeña fracción del flujo de rayos γ pasará a través de varios pies de hormigón o varios metros de agua.

Existen tres métodos de atenuar rayos γ .

1. *Efecto foto-eléctrico.*

Cuando un rayo γ de baja energía incide en un átomo, la energía total de las γ se emplea en expulsar un electrón de la órbita. El resultado es la ionización del átomo y la liberación de una elevada energía electrónica. Esta reacción es predominante con bajas energías γ interaccionando en materiales con alto peso atómico y raramente ocurre con γ que tienen una energía por encima de 1 MeV. El resultado es la eliminación de la radiación γ . La energía γ en exceso de la energía de enlace del electrón es llevada por el electrón en forma de energía cinética.

2. *Efecto de dispersión Compton.*

La gamma interacciona con un orbital o electrón libre de tal forma que el fotón pierde solamente una fracción de su energía. La pérdida de energía depende del ángulo de dispersión de la radiación gamma, aunque esta continúa en un nivel de menor energía, y la diferencia de energía se absorbe por el electrón. Esta reacción llega a ser importante para energías mayores a 0.1 MeV.

3. En niveles de energía mayores, predomina el *método de producción de pares.*

Cuando una alta energía gamma pasa suficientemente próximo a un núcleo pesado, la gamma desaparece completamente, y se forman un electrón y un positrón. Para que esta reacción tenga lugar, la energía gamma original debe tener al menos 1,02 MeV. La probabilidad de producción de par incrementa significativamente para energías gamma mayores.

La radiación de neutrones se caracteriza por que los neutrones no tienen carga eléctrica, lo cual tiene como consecuencia, que el neutrón es difícil de parar y tiene un alto poder de penetración. Además, los neutrones tienen aproximadamente la misma masa que un protón (un núcleo de átomo de hidrógeno), la cual es mucho mayor que la de un electrón, pero 1/4 de la masa de una partícula α .

Los neutrones pueden ser producidos por reacciones nucleares o por el decaimiento de los nucleidos radioactivos.

Los neutrones se atenúan por tres interacciones: dispersión elástica, dispersión inelástica, y absorción.

En la dispersión elástica, un neutrón choca con un núcleo. Esta reacción transmite algo de la energía cinética del neutrón al núcleo del átomo, de tal forma que el neutrón sufre un frenado tras la colisión y el átomo recibe la parte correspondiente de energía

cinética (movimiento) que pierde el neutrón en la colisión. Este es el proceso llamado efecto de la bola de billar.

En la reacción de dispersión inelástica, se produce la colisión entre neutrón y núcleo de tal forma que el núcleo recibe algo de energía interna como energía cinética. Esto frena al neutrón pero deja al núcleo en un estado excitado. Cuando el núcleo decae a su nivel de energía original, normalmente emite un rayo gamma.

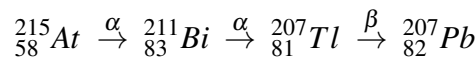
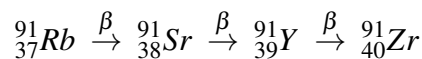
En la reacción de absorción, el neutrón es actualmente absorbido dentro del núcleo de un átomo. El neutrón se captura, pero el átomo se deja en un estado excitado. Si el núcleo emite uno o más rayos gamma para alcanzar un nivel estable, el proceso se llama captura radiactiva. Esta reacción ocurre en muchos niveles de energía del neutrón, pero es más probable en niveles más bajos de energía.

2.4.4. Cadenas de decaimiento

Cuando un núcleo inestable decae, el núcleo hijo resultante no es necesariamente estable. El núcleo resultante del decaimiento de un núcleo padre es frecuentemente inestable, y consecuentemente experimentará un decaimiento adicional. Esto es especialmente común en los nucleidos grandes.

Es posible definir los pasos que un átomo inestable va a seguir a través de múltiples decaimientos hasta conseguir la estabilidad. La lista de elementos: el nucleido original inestable, los nucleidos que son envueltos en los pasos intermedios en el decaimiento, y el nucleido final estable se conoce como cadena de decaimiento. La cadena se continúa hasta alcanzar un nucleido estable o un nucleido con una vida media mayor que 10^6 años.

Un método común para empezar la cadena de decaimiento es expresando cada uno de los nucleidos envueltos en el formato estándar A_ZX . Las flechas se usan entre los nucleidos para indicar el decaimiento que ocurre, con el tipo de decaimiento indicado bajo la flecha y la vida media.



2.4.5. Predicción del tipo de decaimiento

Los nucleidos radioactivos tienden a decaer siguiendo siempre la misma cadena de decaimiento hasta llegar a un nucleido hijo estable. Debido a esto, es posible predecir el tipo de decaimiento que un nucleido va a experimentar, basándose en su localización relativa en el diagrama de nucleidos, [Figura 2.4](#), que es el análogo a la

tabla periódica, pero considerando todos los posibles isótopos de cada elemento, lo que se conoce como *Carta Nuclear*.

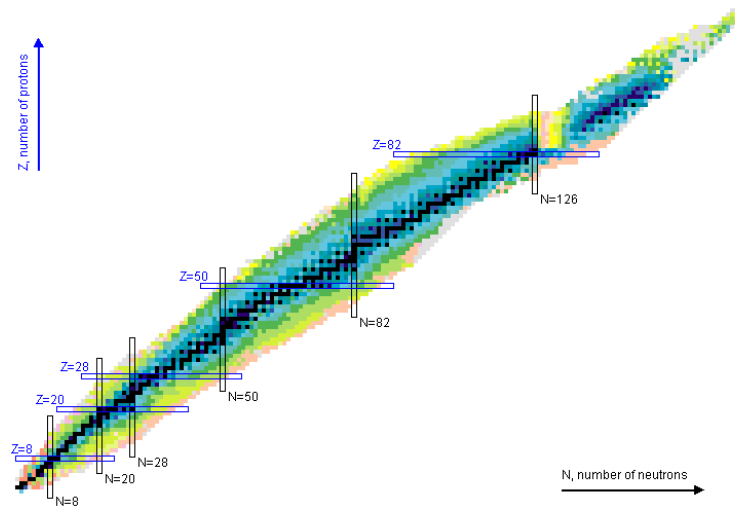


Figura 2.4: Carta nuclear.[83]

A cada uno de estos núcleos diferentes los llamamos *nucleidos*. La cantidad total de nucleidos identificados hasta el presente es muy grande, próxima a los 2000.

Se diseñó una carta o tabla de nucleidos para sistematizar la información sobre ellos. Se ordenan en casilleros: en distintas filas de acuerdo a la cantidad de protones y en distintas columnas de acuerdo a la cantidad de neutrones.

Dentro de cada casillero de la tabla de nucleidos se incluye normalmente información sobre el nucleido en particular, de utilidad para los científicos nucleares. Una información relevante es si el nucleido en cuestión es estable o inestable. Para ello, además de datos numéricos, es común dar a cada casillero un color particular. En la carta de nucleidos se ha pintado de naranja los casilleros de los nucleidos estables, mientras que los inestables tienen otro color.

Entre los nucleidos de la carta solo algunos (pocos) son llamados estables, es decir que no se transmutan por sí solos en otros isótopos y por lo tanto no se alteran con el paso del tiempo. Los otros, inestables, emiten radiaciones: son los isótopos radiactivos o radioisótopos. En la carta de los nucleidos, la curva que forman los casilleros negros es llamada *línea de estabilidad*, como si se pudiera trazar. A la derecha de la línea de estabilidad se ubican los isótopos radiactivos que tienen más neutrones que los isótopos estables. A la izquierda se ubican los isótopos radiactivos que tienen menos neutrones que los estables.

Los nucleidos que están por debajo y a la derecha de la línea de estabilidad normalmente experimentarán decaimiento β^- . Los nucleidos que están por encima y a la izquierda de la línea de estabilidad experimentarán decaimiento β^+ o captura elec-

trónica. Los nucleidos que experimentarán decaimiento β^- se encuentran en la región más superior a la derecha del diagrama.

2.4.6. La radioactividad

La radiactividad es la propiedad de ciertos nucleidos de emitir espontáneamente partículas o radiación gamma. El decaimiento de nucleidos radioactivos ocurre de manera aleatoria y no puede ser determinado el preciso momento en que un núcleo decaerá. Alguna vez se puede predecir utilizando métodos estadísticos. Los estudios han revelado que existe una cierta probabilidad, que en un intervalo de tiempo dado, una cierta fracción del núcleo de un nucleido particular decaerá. Esta probabilidad por unidad de tiempo de que un átomo de un nucleido decaiga se conoce como *constante de decaimiento radiactivo* λ .

En una reacción inducida por neutrones la concentración del elemento producido o tasa de activación es directamente proporcional al flujo de neutrones y al número de núcleos objetivo presentes que depende de la masa presente del elemento a analizar, por lo que es posible determinar ésta por la tasa de activación producida.

$$\text{Tasa de activación} \propto \text{masa del elemento}$$

La actividad (A) de una muestra es la proporción de decaimiento de dicha muestra. Esta proporción de decaimiento se mide como el número de desintegraciones que ocurren por segundo. Para una muestra que contiene millones de átomos, la actividad es el producto de la constante de decaimiento y el número de átomos presentes en la muestra y por lo tanto viene dada por la ecuación:

$$A = \lambda N$$

A = Actividad del nucleido (desintegraciones/ segundo).

λ = Constante de decaimiento del núcleo (segundo^{-1}).

N = Número de átomos de los nucleidos en la muestra.

Las unidades de medida de radiactividad para medir la actividad de una sustancia, son el Curie (Ci) y el Becquerel (Bq). Un curie es una medida de la proporción de decaimiento radiactivo igual a $3,7 \times 10^{10}$ desintegraciones por segundo. Esto es aproximadamente equivalente al número de desintegraciones que un gramo de ^{226}Ra tendría en un segundo. Un Becquerel es una unidad más fundamental de medida de decaimiento radiactivo que es igual a una desintegración por segundo.

La variación de la radioactividad con el tiempo viene dada por la siguiente expresión, la cual se obtiene a partir de la relación básica de la actividad, anteriormente citada.

$$N = N_0 e^{-\lambda t}$$

- N = Número de átomos presentes en el tiempo t .
 N_0 = Número de átomos inicialmente presente.
 t = tiempo.
 λ = Constante de decaimiento.

La actividad (A) y el número de átomos son siempre proporcionales, pueden usarse para describir la población de un radionucleido dado. Por lo tanto, la actividad viene dada por la expresión:

$$A = A_0 e^{-\lambda t}$$

- A_0 = actividad inicial presente.
 t = tiempo.
 λ = Constante de decaimiento.

La vida media radioactiva ($T_{1/2}$) se define como el tiempo necesario para que se desintegre la mitad de una determinada cantidad de un núcleo radiactivo.

A partir de la ecuación anterior de la actividad, se obtiene la expresión de la vida media.

A partir de la ecuación anterior de la actividad, se obtiene la expresión de la vida media:

$$A = A_0 e^{-\lambda t} \rightarrow t = \frac{-\ln \frac{A}{A_0}}{\lambda}$$

Considerando que el núcleo radiactivo se desintegra a la mitad, entonces:

$$\frac{A}{A_0} = \frac{1}{2}$$

y por lo tanto, llegamos a la expresión que nos da la vida media radioactiva para cualquier núcleo:

$$T_{1/2} = \frac{-\ln \frac{1}{2}}{\lambda}$$

El planteado del decaimiento radioactivo se usa para representar cómo varía la actividad de un nucleido a lo largo del tiempo. Los planteados de este tipo se pueden usar

para determinar cuando la actividad bajará de un cierto nivel. Normalmente se hace mostrando la actividad en una escala lineal o logarítmica.

El decaimiento de la actividad de un único nucleido en una escala logarítmica se ploteará como una línea porque el decaimiento es exponencial.

Si una sustancia contiene más de un nucleido radioactivo, la actividad total es la suma de las actividades individuales de cada nucleido.

El equilibrio radioactivo existe cuando un nucleido radioactivo decae en la misma proporción en la que se produce. Ya que la velocidad de producción y decaimiento son iguales, el número de átomos presentes permanece constante a lo largo del tiempo.

El equilibrio radiactivo viene dado por la expresión:

$$R = \lambda N$$

R = ratio de producción (átomos / segundo).

λ = constante de decaimiento (*segundo*⁻¹).

N = número de átomos.

El *equilibrio radioactivo transitorio* sucede cuando el nucleido padre y el nucleido hijo decaen en la misma proporción. Para que ocurra el equilibrio transitorio, el padre debe tener una vida media grande comparada con la del hijo.

El *equilibrio secular* ocurre cuando el padre tiene una vida media extremadamente grande. Cada uno de los descendientes ha alcanzado una cantidad de equilibrio y todo el decaimiento está en una proporción fijada por el padre original. La única excepción es el elemento estable final de la cadena.

2.4.7. Activación con neutrones y sección eficaz

Para determinar la frecuencia de las interacciones de los neutrones, es necesario describir la disponibilidad de los neutrones a causar interacción y la probabilidad de la misma, la cual se determina a través de la sección eficaz nuclear y del flujo de neutrones.

La sección eficaz, *cross section* en inglés, normalmente representada con la letra σ , se define como la probabilidad de interacción entre dos partículas y expresa la relación entre la tasa de activación, el número de núcleos objetivo N , y el flujo de neutrones ϕ . Es una magnitud de superficie y la unidad habitual es el *barn*, $10^{-28} m^2$.

$$\text{Tasa de activación} = \sigma \phi N$$

Las secciones eficaces para cada isótopo de un mismo elemento son diferentes y, cuanto mayor sea, mejor se activará.

Hay bases de datos (EXFOR - [40]) que nos dan las secciones eficaces de los isótopos en función de la energía de los neutrones.

El diámetro nuclear típico es de unos 10^{-12} cm por lo que las secciones eficaces entre núcleos son del orden de 10^{-24} cm² valor al que se le dio una unidad propia, el barn. Dependiendo de qué reacciones se trate las secciones eficaces pueden variar enormemente yendo desde los 1.000 barns hasta los 0.001 barn.

Estadísticamente los núcleos de los átomos de una placa se pueden considerar como diminutas esferas de radio r distribuidos a lo largo de un plano de superficie A . En el diagrama siguiente se representan un grupo de partículas a que inciden a velocidad v sobre un grupo de partículas X que actúan como blanco de las primeras, [Figura 2.5](#).

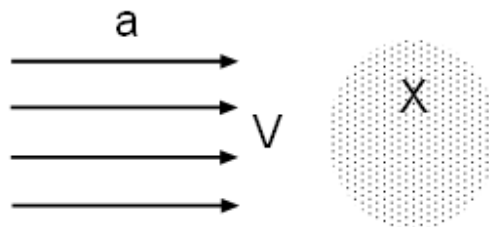


Figura 2.5: Sección eficaz.

La probabilidad de impactar contra una de esas partículas distribuidas en la lamina será de $\frac{n\pi r}{A}$. Donde n representa el número de partículas X distribuidas en la superficie A .

Las partículas X al recibir el impacto de las a dan, como resultado, un núcleo excitado que se desintegra tras la fusión dando lugar a una serie de posibilidades distintas o canales de salida, cada uno con su probabilidad de ocurrencia.

También se puede definir la sección eficaz como la probabilidad de la interacción de un neutrón con un núcleo para una reacción en particular, la cual sólo depende del tipo de núcleo envuelto, y de la energía del neutrón. En concordancia con esto, la absorción de un neutrón lento en muchos materiales es mucho más probable que la absorción de un neutrón rápido. Así, la probabilidad de interacción variará dependiendo del tipo de reacción involucrada.

La probabilidad de una reacción particular ocurrida entre un neutrón y un núcleo se denomina sección eficaz microscópica (σ) del núcleo para dicha reacción. Esta sección eficaz variará con la energía del neutrón. La sección microscópica eficaz puede ser descrita como el área efectiva del núcleo presente frente al neutrón para esa reacción en particular. A mayor área efectiva, mayor probabilidad de reacción.

La sección eficaz explicada anteriormente, se corresponde a escala microscópica y para un solo átomo. Para hacer más real el término probabilístico, se ha de definir

un concepto que de una mejor idea de la probabilidad de la reacción. Este concepto es lo que se denomina la sección eficaz macroscópica (Σ), que consistente en el producto de la sección eficaz microscópica por el número de átomos o densidad atómica (N) existentes en una unidad de volumen.

$$\Sigma = N(\text{átomos}/\text{cm}^3) \cdot \sigma (\text{cm}^2/\text{átomos}) = N \cdot \sigma \quad (\text{cm}^{-1})$$

La Densidad atómica es una propiedad importante de cualquier material y se define como el número de átomos de un tipo dado por unidad de volumen de dicho material.

$$N = \frac{\rho N_A}{M}$$

- N = densidad atómica (átomos/ cm^3).
 ρ = densidad (g/cm^3).
 N_A = número de Avogadro ($6,022 \cdot 10^{23}$ átomos).
 M = peso atómico (g).

Este nuevo concepto probabilístico es interpretado como la posibilidad de que una reacción ocurra en 1 cm de recorrido del neutrón, o viéndolo desde otro punto de vista, que distancia lineal ha de recorrer el neutrón en el medio antes de impactar contra el núcleo objetivo.

La diferencia entre la sección eficaz microscópica y la macroscópica es extremadamente importante.

La sección eficaz microscópica (σ) representa el área efectiva del blanco que un único núcleo presenta al bombardeo de una partícula. Las unidades se dan en *barns* o cm^2 .

La sección eficaz macroscópica (Σ) representa el área efectiva del blanco que se presenta por todo el contenido del nucleido en 1 cm^3 del material. Las unidades se dan en cm^{-1} .

Un neutrón que interacciona con un átomo del material actúa de dos formas básicas. A través de una interacción de dispersión o a través de una reacción de absorción. La probabilidad de que un neutrón sea absorbido por un átomo particular es la sección eficaz microscópica por absorción (σ_a). La probabilidad de que un neutrón se desvíe de un núcleo particular es la sección eficaz microscópica por dispersión (σ_d). La suma de la sección eficaz microscópica por absorción y la sección eficaz microscópica por dispersión es la sección eficaz microscópica total (σ_T).

$$\sigma_T = \sigma_a + \sigma_d$$

La sección eficaz de dispersión es la suma de la sección eficaz de dispersión elástica (σ_{de}) y la sección eficaz de dispersión inelástica (σ_{di}).

$$\sigma_d = \sigma_{de} + \sigma_{di}$$

La sección eficaz microscópica de absorción incluye todas las reacciones excepto las de dispersión. Para algunos propósitos es suficiente para separar en dos categorías, fisión (σ_f) y captura (σ_c).

$$\sigma_a = \sigma_f + \sigma_c$$

Otro concepto que es necesario definir es el Recorrido libre medio. El recorrido libre medio, para una sustancia dada, es el valor medio de la distancia que recorren las partículas de una naturaleza y energía determinada, entre dos interacciones consecutivas. Numéricamente, equivale a la inversa de la sección eficaz.

La mayoría de los materiales están compuestos de varios elementos, y como muchos elementos están compuestos de varios isótopos, la mayoría de esos materiales incluyen alguna sección eficaz, una por cada isótopo implicado. Para incluir todos los isótopos en un material dado, es necesario determinar la sección eficaz macroscópica por cada isótopo y la suma de todas las secciones eficaces macroscópicas individuales.

$$\Sigma = \sum N_i \sigma_i$$

N_i = número de núcleos por cm^3 del elemento i ésimo.

σ_i = sección eficaz microscópica del elemento i ésimo.

La sección eficaz microscópica de absorción varía significativamente en función de la energía del neutrón. Las secciones eficaces microscópicas suministradas en muchas tablas son medidas para una velocidad estándar neutrónica de 2200 metros por segundo, la cual corresponde a la temperatura ambiente de 68° F. De ahí que, si nuestro material está a alta temperatura, la sección eficaz de absorción será más baja, y las secciones eficaces que involucran la absorción deberán ser corregidas para la temperatura existente.

$$\sigma = \sigma_0 \sqrt{\frac{T_0}{T}}$$

- σ = sección eficaz microscópica corregida.
 σ_0 = sección eficaz microscópica a temperatura de referencia (68 F o 20 C).
 T_0 = temperatura de referencia (68° F) en grados Rankine (R) o Kelvin (K).
 T = temperatura para la que se corrige el valor que se calcula.
 R = $F + 460$

Flujo de neutrones

La sección eficaz para reacciones de neutrones determina la probabilidad de un neutrón por centímetro de viajar a través de un material, bajo una reacción específica. Si se quiere determinar cuantas reacciones ocurrirán, es necesario saber cuantos neutrones están viajando a través del material y en cuantos centímetros viajan por cada segundo.

Para ello es conveniente considerar el número de neutrones existente en un centímetro cúbico en un instante y la distancia total que ellos recorren por cada segundo en ese centímetro cúbico. El número de neutrones existentes en un cm^3 de material en un instante es, como ya se ha indicado anteriormente, la densidad neutrónica y se representa por el símbolo N (*neutrones/cm³*). La distancia total que esos neutrones pueden viajar en cada segundo se determinará por su velocidad.

Por lo tanto, una buena manera de definir el flujo de neutrones (Φ) es considerar el total del camino recorrido por todos los neutrones en un centímetro cúbico durante un segundo.

$$\Phi = N v$$

- Φ = flujo de neutrones (*neutrones/cm²segundo*).
 N = densidad neutrónica (*neutrones/cm³*).
 v = velocidad neutrónica (*cm/segundo*).

El flujo de neutrones térmicos en algunas aplicaciones (por ejemplo, medida de sección eficaz) se asimila a un haz paralelo de neutrones viajando en una única dirección.

2.4.8. Modalidades de las mediciones por activación neutrónica

En función del tiempo, las técnicas de análisis por activación neutrónica se clasifican en dos categorías:

- Análisis de activación neutrónica por rayos gamma instantáneos (NAAGP), donde las medidas se toman durante la irradiación.
- Análisis de activación neutrónica por rayos gamma decaídos (NAAGD), donde las medidas siguen el decaimiento radioactivo.

El último modo operacional es el más común. Así, cuando se menciona un NAA generalmente se asume que la medida se realiza con rayos gamma decaídos. Alrededor del 70 % de los elementos tienen propiedades convenientes para medición por NAA.

Análisis de activación neutrónica por rayos gamma instantáneos (NAAGP)

La técnica de NAAGP es conocida desde hace años como método de análisis elemental, pero solamente en las últimas décadas ha alcanzado su máxima potencialidad debido al desarrollo de detectores de alta eficiencia y excelente resolución para la radiación gamma.

Su principal ventaja es su amplia aplicación en la identificación de varios elementos presentes simultáneamente en una muestra, como asimismo en la determinación a nivel de trazas de varios elementos que no pueden ser determinados por métodos de activación neutrónica convencionales. Además se caracteriza por ser un método no destructivo que presenta baja actividad residual y es flexible en cuanto a los requerimientos de las muestras, es decir, las forma física y la geometría de la muestra son irrelevantes para el resultado del análisis.

El NAAGP es una técnica de rápida respuesta en que no hay espera por decaimiento radiactivo, ya que los núcleos en estado de excitación presentan una vida media muy corta, lo que le da el nombre a dicha técnica. Por tanto, los tiempos de medición para cada muestra dependen de la sección eficaz y del flujo térmico en el lugar de muestreo.

La muestra se expone a un haz de neutrones de tal manera que los núcleos de los elementos constituyentes de la muestra, denominados núcleos blancos (X), interactúan con los neutrones incidentes (η), denominados proyectiles, produciéndose la captura neutrónica lo que implica la formación inicial de un núcleo compuesto (X^*) por un blanco y el proyectil, que posteriormente se desintegrará en dos productos: el fotón γ , cuya vida media es muy corta, inferior a 10^{-13} segundos, que es la que se mide en la técnica NAADG y el producto pesado o núcleo radiactivo.

La probabilidad de que ocurra la reacción de captura neutrónica en un determinado núcleo esta representada por su sección eficaz de captura para neutrones de una energía dada.

El núcleo compuesto excitado emite radiación gamma de captura instantánea (producto liviano) y posteriormente, el núcleo pesado radiactivo buscará su estabilidad transformándose en un núcleo estable según diferentes procesos. El éxito de esta téc-

nica depende fundamentalmente del producto de la sección eficaz, de su abundancia isotópica y del flujo de neutrones.

El NAAGP no es sólo una herramienta para el análisis elemental, sino que también se utiliza para el análisis isotópico, pudiéndose determinar los distintos isótopos de un elemento natural.

Las ventajas de esta técnica son las siguientes:

- Se trata de un análisis inmediato.
- Técnica no destructiva.
- Permite el análisis de muchos elementos simultáneamente.
- Requerimientos flexibles de la muestra.
- Permite el análisis de muestras volumétricas.
- Representativa de la mayoría de los constituyentes.
- Permite la identificación de elementos que no puede ver el NAA tradicional.

Como principales inconvenientes a destacar:

- Sólo puede ser analizada una sola muestra por irradiación.
- Se requieren periodos largos de irradiación.
- Muchos elementos puede que no sean detectables a nivel de trazas.
- Requiere una cantidad relativamente grande de muestra, de entre 0.1 gramos a 10 gramos.
- Se obtienen espectros de gran complejidad.

La técnica de NAAGP es muy aplicable en los siguientes casos:

- Elementos con extremadamente altas secciones eficaces de captura de neutrones (Boro, Cadmio, Samario y Gadolinio).
- Elementos que decaen demasiado rápidamente como para ser medidos por NAAGD.
- Elementos que producen solamente isótopos estables.
- Elementos con débil decaimiento de intensidades gamma.

Análisis de activación neutrónica por rayos gamma decaídos (NAAGD)

Esta técnica puede ser descrita de forma similar a la expuesta en el punto anterior.

La muestra se somete a un haz de neutrones de tal manera que los núcleos de los elementos constituyentes de la muestra, denominados núcleos blancos (X), interactúan con los neutrones incidentes, denominados proyectiles (η), produciéndose la captura neutrónica lo que implica la formación inicial de un núcleo compuesto (X^*) por un blanco y el proyectil, que posteriormente se desintegrará en dos productos: el fotón γ cuya vida media es muy corta inferior a 10^{-13} segundos y el producto pesado o núcleo radiactivo.

El núcleo compuesto excitado emite radiación gamma de captura instantánea (producto liviano) y posteriormente, el núcleo pesado radiactivo buscará su estabilidad transformándose en un núcleo estable según diferentes procesos, una de ellas la emisión de radiación gamma retardada, que es la que se mide y da nombre a la técnica NAAGD.

La técnica NAAGD es útil para la mayoría extensa de elementos que produce nucleidos radiactivos. La técnica es flexible con respecto al tipo de radionucleido, de tal forma que la sensibilidad para un radionucleido que tenga una vida media relativamente larga y que sufra de una interferencia por un radionucleido de vida media más corta que el anterior puede ser mejorada esperando que el radionucleido de breve duración decaiga. Esta selectividad es una ventaja dominante del método NAAGD sobre otros métodos analíticos.

2.4.9. Medición de rayos gamma

Los modernos sistemas de medidas de radiación gamma consisten en un detector, normalmente detectores semiconductores de germanio tipo HPGe y en ciertas ocasiones cristales de centelleo de NaI (Cl). Estos detectores van conectados a un analizador multicanal (MCA) con un apropiado sistema electrónico.

La mayoría de los laboratorios de NAA utilizan detectores intrínsecos de germanio (HPGe) que funcionan a las temperaturas del nitrógeno líquido (77K) montando el cristal del germanio en un criostático al vacío, conectado térmicamente con una barra de cobre o un refrigerante denominado *dedo frío*. Aunque hay muchos y diversos tipos de detectores HPGe con diversos diseños y tamaños, el más común es el detector coaxial, para el cual, en NAA, es útil la medición de rayos gama con energías de entre 60 keV y 3 MeV.

El objetivo de los espectrómetros de medidas de rayos gamma es la determinación del número y energía de los fotones emitidos por la fuente. Para la medida de la energía, la escala de pulso debe estar calibrada con fuentes patrones que emitan fotones de energía conocida. El espectro gamma sigue una distribución de Poisson con una desviación de $N^{1/2}$ en la que el pico de la curva es la energía donde el nivel de

confidencia es del 68 %. Las dos características de funcionamiento más importantes que se requieren en un detector nuevo de HPGe son la resolución y la eficacia. Otras características a considerar son, entre otros, la forma y el cociente de pico Compton.

La resolución del detector es una medida de su capacidad para separar picos en un espectro. En general, la resolución del detector se expresa en términos de la anchura completa en un medio máximo (FWHM) del pico correspondiente a una energía de 122 keV del Co-57 y del pico correspondiente a la energía de 1332 keV del Co-60. Para la mayor parte de las aplicaciones NAA, es suficiente un detector con 1 keV de resolución para el pico de 122 keV; y de 1.8 keV para el pico de 1332 keV.

La eficiencia del detector depende de la energía de radiación, el ángulo sólido entre la muestra y el cristal del detector y el volumen activo del cristal. Un detector de mayor volumen tendrá una mayor eficiencia. En general, la eficiencia del detector es la medida relativa a un detector de Sodio Iodado (NaI) de unas 3 pulgadas x 3 pulgadas usando una fuente de Co - 60 (con un pico de energía de 1332 keV) a una distancia de 25 cm de la cara del cristal. Una regla general para detectores de germanio es 1 % de eficiencia por cada 5 cm^3 de volumen activo. Para la mayoría de las aplicaciones NAA es adecuado un detector HPGe de entre el 15 y el 30 % de eficiencia.

2.4.10. Uso del recuento de rayos gamma para calcular la concentración de elementos

Hay que tener en cuenta, que el procedimiento analítico puede ser más rápido y más económico por la simplificación del método, razón por la cual se trata de estandarizar el procedimiento de análisis. Las dos características principales del neutrón, es decir, la alta penetrabilidad del neutrón en reacciones inducidas y el asegurar la radiación gamma, hacen que la estandarización del procedimiento sea posible. Como la señal de concentración está próxima a la matriz independiente, la preparación de la muestra es fácil, por lo tanto, el peligro de errores sistemáticos se reduce.

Generalmente el producto de la activación produce más de una radiación gamma, cada una de una energía y una probabilidad de emisión diferente, por lo que es necesario considerar la eficiencia y las posibles interferencias para elegir la línea analítica más adecuada. En algunas ocasiones se pueden seleccionar más de una línea analítica con el fin de conseguir la precisión adecuada en las medidas realizadas.

La región del espectro de rayo gamma por debajo de 150 keV es bastante complejo y frecuentemente aconsejable para contar las muestras con un detector de baja energía fotónica.

Para determinar elementos de vida media corta, la corta irradiación y los tiempos de enfriamiento han de ser considerados como limitaciones técnicas. En este caso, se requieren algunos métodos especiales, como es el proceso de activación cíclica, método en el que las muestras son repetidamente irradiadas y contadas y entonces se

va sumando el espectro.

Los isótopos radiactivos de larga vida media producidos tras la irradiación durante largos periodos en un canal termal del reactor son medidos varias veces. Los tiempos de enfriamiento son de 1 semana, 1 mes o más en casos especiales. De esta forma, generalmente se pueden determinar 25 o 30 elementos determinados en diferentes tipos de muestras.

Desde que la técnica NAA se empezó a utilizar, se viene aplicando un procedimiento de estandarización. Las medidas cuantitativas pueden ser efectivas determinando el flujo de neutrones y contando el rayo gamma absoluto.

El método relativo clásico está basado en la radiación simultánea de la muestra y un patrón de cantidad conocida de los elementos en cuestión, seguida de la medición inducida de intensidades de ambas. La exactitud del método relativo depende del procedimiento de preparación del patrón. La desventaja de este método es el error que se comete en un análisis multielemental, ya que el procedimiento de preparación del patrón y de conteo es bastante laborioso, lo cual, se uniría a la pérdida de información que se originaría si un elemento inesperado apareciese en el patrón y no fuese irradiado.

El uso de patrones multielementales puede ser la respuesta a este problema, pero esto suscita la cuestión de homogeneidad y estabilidad.

Otro procedimiento usado para calcular la concentración de un elemento (en ppm) en una muestra desconocida es irradiar ésta y un comparador estándar que contiene una cantidad conocida del elemento de interés. Si se miden ambas en el mismo detector, la muestra desconocida y el comparador estándar, entonces se necesita corregir la diferencia del decaimiento entre los dos. El decaimiento normalmente corrige los recuentos medidos (o actividad) para ambas muestras al final de irradiación usando la vida media del isótopo medido.

Cuando se realizan pequeñas irradiaciones, la irradiación, el decaimiento y los tiempos de contaje son normalmente fijos para todas las muestras y estándares de tal manera que el tiempo depende de factores suprimidos. Así la ecuación simplificada para calcular la masa de un elemento en la muestra desconocida relativa al comparador estándar es:

$$C_{muestra} = C_{estandar} \frac{W_{estandar} A_{muestra}}{W_{muestra} A_{estandar}}$$

C = concentración del elemento.

W = peso de la muestra y estándar.

A = actividad de la muestra y estándar.

Las sensibilidades con NAA dependen de los parámetros de irradiación (flujo neu-

trónico, irradiación y tiempos de decaimiento), condiciones de medida (tipos de medida, eficiencia del detector) parámetros nucleares de los elementos que están siendo medidos (abundancia de isótopos, sección eficaz de neutrones, vida media y abundancia de rayos gamma). La precisión de una determinación NAA individual normalmente oscila entre 1-10% del valor.

2.4.11. Instrumentación y técnicas

En un Análisis de Activación Neutrónica típico, los nucleidos estables de la muestra (AZ , el núcleo blanco), reciben un flujo incidente de neutrones y se ven sometidos a la reacción de captura neutrónica. El nucleido radiactivo (${}^{A+1}Z$) producido en este proceso de activación, en la mayor parte de casos, *decaerá a través de la emisión de una partícula β y rayos γ con una vida media única*. Un espectrómetro de rayos gamma de alta resolución se usa para detectar estos rayos gamma decadentes desde la radiactividad inducida artificialmente en la muestra, para llevar a cabo los análisis cualitativos y cuantitativos.

Las energías de los rayos gamma decaídos se usan para determinar qué elementos están presentes en la muestra, y el número de rayos gamma de una energía específica se usa para determinar la cantidad de un elemento en la muestra.

El nucleido radiactivo excitado que se origina a partir del núcleo blanco mediante la reacción nuclear (vida media entre 10^{-14} y 10^{-15} segundos), una vez ha absorbido la partícula incidente (neutrón) se desintegra en las partículas emergentes. De esta forma, la reacción nuclear puede dividirse en dos procesos, la absorción de la partícula incidente y la desintegración del núcleo compuesto.

Cuantificación NAA

La proporción del valor medido de los rayos gamma en el decaimiento de un isótopo específico en la muestra irradiada puede calcularse a partir del conteo (n) del original, isótopo estable en la muestra a través de la ecuación:

$$R = \varepsilon I_{\gamma} A = \varepsilon I_{\gamma} n \phi \sigma (1 - e^{-\lambda t_i}) e^{-\lambda t_d} \quad (2.1)$$

Si el flujo de neutrones ϕ , la sección eficaz captura de neutrones σ , la eficiencia del detector ε y la abundancia rayos γ absolutos I_{γ} , son conocidos, entonces el número de átomos n de isótopo AZ en la muestra puede calcularse directamente. En muchos casos, puede ocurrir, que un estándar irradiado y valorado bajo mismas condiciones, como son la muestra y la masa del elemento en la muestra (W_{sam}) se calcula por comparación con la proporción de valor medido (R) para la muestra y para el estándar a través de la siguiente ecuación:

- R = proporción valor de rayos gamma medidos (valores por segundo).
 A = actividad absoluta del isótopo ^{A+1}Z en muestra.
 ε = eficiencia absoluta del detector.
 I_γ = número de átomos de isótopo AZ en muestra.
 n = abundancia de rayo gamma absoluto.
 ϕ = flujo de neutrones (*neutrones/cm²s*).
 σ = sección eficaz captura de neutrones (*cm²*) para isótopo AZ .
 λ = constante decaimiento radiactivo (s-1) para isótopo ^{A+1}Z .
 t_i = tiempo de irradiación (*s*).
 t_d = tiempo de decaimiento (*s*).

$$W_{muestra} = W_{estandar} \frac{R_{muestra}}{R_{estandar}}$$

- $W_{muestra}$ = masa del elemento en la muestra (g).
 $W_{estandar}$ = masa del elemento en estándar (g).
 $R_{muestra}$ = proporción valor rayos γ de muestra.
 $R_{estandar}$ = proporción valor rayos γ de estándar.

Ventajas y limitaciones

Una de las principales ventajas de NAA es que está prácticamente libre de los efectos de interferencia de la matriz, ya que la inmensa mayoría de las muestras son completamente transparentes para las dos: el neutrón y la señal analítica (el rayo γ). Además, el NAA que se puede aplicar más frecuentemente es el instrumental (sin necesidad de digestión o disolución de la muestra), por lo que hay poca posibilidad de contaminación en laboratorio.

Las interferencias pueden ocurrir cuando diferentes elementos en la misma muestra producen rayos gamma de una energía próxima. Usualmente este problema puede solucionarse por la elección de rayos γ alternativos para estos elementos o por la supresión de recuento de nucleidos de vida más corta. Otras interferencias que se pueden obtener son las originadas por otro tipo de reacciones nucleares que produzcan simultáneamente el radionucleido de interés.

El límite de detección para un elemento particular dependerá de la relación recuento medido (R) de los rayos γ siendo monitorizados y el escenario (fondo) sobre

el que se sitúan los picos rayos γ . De la ecuación de R , está claro que la proporción recuento medido (R) por un isótopo dado puede incrementarse:

1. Incrementando la eficiencia del detector que se logra moviendo la muestra más cercana al detector (ϵ).
2. Incrementando el tiempo de irradiación (t_i).
3. Disminuyendo el tiempo de decaimiento (t_d).

En la alternativa, la sensibilidad de la medición en algunos casos puede mejorar por aumento de la señal total o del número total de recuentos (R_{t_m}). Esto es, simplemente por el aumento del tiempo de medida, t_m .

Podemos mejorar el límite de detección para un elemento si aumentamos la proporción de la actividad de los rayos gamma de interés para el intervalo a través de alguna combinación de los pasos 1, 2 ó 3. Si al cambiar la eficiencia del detector, el tiempo de irradiación, o el tiempo de decaimiento se causa una menor proporción de picos se empeorará el límite de detección.

Otra limitación común de la NAA instrumental ocurre cuando la actividad generada por la irradiación de la matriz es tan grande que enmascara la señal de interés. Afortunadamente, en los pasos de NAA la excitación y la medición están lo suficientemente separados en tiempo para permitir el análisis, y cuando sea necesario, se puede emplear el tiempo de retraso para llevar a cabo una separación química para mejorar significativamente a la vez selectividad y sensibilidad.

2.5. Resultados de Tesis anteriores

En estas tesis se hizo un estudio bibliográfico exhaustivo pues el análisis por activación neutrónica es una técnica suficientemente conocida. Para llevarla a cabo se utiliza, muy frecuentemente reactores nucleares termales. En ellas se hace un pequeño repaso sobre los reactores de investigación de uso en activación neutrónica, y diversas entidades que realizan estos análisis. Este material fue consultado para la confección de esta tesis pero no aparece explícitamente por no considerarse necesario.

2.5.1. Desarrollo de un método rápido basado en técnicas de activación neutrónica para la determinación del contenido en flúor de muestras de mineral de fluorita

En esta tesis [95], y previamente al trabajo de campo, se estudiaron los isótopos presentes en las muestras de espato flúor y, se seleccionaron los isótopos estables con mayor abundancia. Se analizaron las reacciones que tenían lugar entre los isótopos estables mencionados con los neutrones procedentes de la fuente de Am-Be disponible (1 Ci de actividad). Se seleccionaron aquellas reacciones con mayor sección eficaz, es decir, mayor probabilidad de ocurrencia. Si la sección eficaz de una reacción era elevada y el producto generado era radiactivo, a partir de la base de datos denominada NUDAT [83], se estudiaban sus características radiactivas del producto de la reacción, tales como la vida media, el tipo de radiación emitida y la intensidad de la energía emitida durante el decaimiento. En total, se analizaron en total 468 reacciones y 29 productos radiactivos. De entre todas las reacciones se encontró la reacción ${}^{19}_9F(n, a){}^{16}_7N$, cuyo producto es el ${}^{16}N$ que tiene las propiedades de ser un producto artificial fruto de una reacción radiactiva que a su vez, es radiactivo, y o decae para producir ${}^{16}O$ emitiendo rayos γ de 6128 keV de energía con una vida media de 7.13 s. Esta energía gamma es fácilmente distinguible del resto del espectro de energías. Por otra parte, la intensidad de esta energía es proporcional a la concentración de ${}^{16}N$ y se comprobó que el ${}^{16}N$ no era producido por ninguna otra reacción entre otro isótopo presente en la muestra y los neutrones de la energía comprendida entre 3 y 5 MeV procedentes de la fuente de Americio Berilio.

Se utilizó un prototipo de desplazamiento manual entre las posiciones de activación y registro de la radiación gamma y un detector de radiación γ de NaI de 2"x 2".

Se comprobó la viabilidad real del método de activación neutrónica para la determinación del contenido en flúor de muestras de fluorita pues se encontró una correlación directa, en todo el rango de leyes, entre el número de cuentas registradas (intensidad de la radiación gamma) y la ley en fluorita de la muestra aunque con el inconveniente se utilizó un espectro obtenido con la suma de los espectros de energía

gamma de 35 experimentos pues con un solo experimento no se encontraba un espectro significativo, ya que la intensidad de la radiación era muy pequeña y por otro lado, en la correlación, un punto de ley sólo supone dos cuentas o fenómenos radiactivos, lo cual es una cantidad muy pequeña. Aún así, a pesar de estos inconvenientes, el método era adecuado, ya que el coeficiente de correlación entre los resultados del análisis de la muestra por el método de activación neutrónica y los resultados de los análisis químicos convencionales fue de 0.94.

A continuación presentamos las conclusiones alcanzadas en dicha tesis de manera más detallada:

1. De la visualización del espectro de emisión del ^{16}N se sacan las conclusiones siguientes:
 - Todos los espectros que se han obtenido en los distintos ensayos tienen un número de cuentas global especialmente bajo. Esto es debido a las particularidades de la activación del flúor por una parte y por otra a la baja actividad de la fuente, además de las características del detector utilizado.
 - Por las particularidades de la activación del flúor, como ya se ha indicado, se producen rayos gamma de alta energía, del orden de 6 MeV.
 - Por otra parte, el detector de NaI no se recomienda para trabajar con niveles de energía mayores de 2 MeV. debido a su bajo rendimiento en estos niveles de energía.
 - La fuente de neutrones utilizada tiene una actividad de 1 Ci. En la bibliografía se han encontrado referencias que indican que el flujo de neutrones necesario para análisis de activación es considerablemente mayor que el que aporta la fuente de neutrones de 1 Ci.
 - Todos estos factores apuntan hacia la misma dirección de obtención de pocas cuentas totales en el intervalo de posible interés.
 - Si tenemos 200 cuentas en canales que van desde el 3000 al 6000 se comprende que el número de cuentas por canal es extremadamente bajo. En todos los ensayos se comprobó este efecto no superándose nunca el valor de 3 cuentas por canal en ninguna circunstancia. Por esta razón la forma de un espectro individual no da ninguna información ni tiene un aspecto como el que se podría esperar. Para soslayar este inconveniente se ha ideado un procedimiento que consiste en sumar el mayor número de espectros posibles con una serie de características comunes, tales como que se obtuvieran con muestras de la misma ley, de la misma masa, e iguales tiempos de activación y lectura, y posteriormente representar gráficamente esa suma.

- En el espectro de la muestra de fluorita se aprecia forma clara que aparece un pico en torno a 6128 keV que se corresponde con el valor de la energía de los rayos gamma producida por el ^{16}N , (esto correspondería a las cuentas obtenidas por el efecto fotoeléctrico).
Aparecen otros dos picos en dos niveles de energía menores que el pico anterior y que distan de este unos 500 keV y 1000 keV respectivamente. Estos dos picos corresponderían a los picos de escape 1º y 2º producidos por la formación de pares electrón positrón.
La amplitud de estos picos es bastante mayor que la correspondiente al foto-pico ya que la cantidad de rayos gamma que interaccionan en el interior del detector por el fenómeno fotoeléctrico disminuye con el cubo de la energía, mientras que el fenómeno de formación de pares crece linealmente a partir de 1 MeV aprox. (1.022 MeV).
De esta manera, el fenómeno que cobra más importancia (como aparece indicado en toda la bibliografía), en el nivel de energía del espectro del ^{16}N , es la formación de pares.
La zona del espectro correspondiente al intervalo 3/5 MeV, contendrá cuentas correspondientes a los fenómenos de formación de pares y de efecto Compton.
- Se estudian los espectros correspondientes a las lecturas de fondo y se comparan con las lecturas de activación neutrónica de muestras de fluorita. Se observa relación entre la altura del espectro y la ley de la muestra.
La relación señal/fondo más conveniente se encuentra en los intervalos entre 4.5 y 6 MeV o bien entre 4.5 y 6.5 MeV. Si bien se observa que en el rango entre 3 y 4 MeV también hay señal, la relación señal/fondo en esta zona es peor.

2. Estudio del fondo detectado.

- Una vez establecido experimentalmente la responsabilidad de la fuente en la respuesta de fondo, se analizan las emisiones de los rayos gamma de alta energía de la fuente de neutrones.
Ni el Americio ni ninguno de sus descendientes emiten radiación gamma de una energía mayor de 1567 keV por lo que no son responsables de las cuentas leídas por el detector en las proximidades del contenedor.
- Como el número de cuentas decrece con la energía, se supone que los rayos γ producidos por las partículas α provenientes del ^{241}Am originarán un número de cuentas menor.
- Del análisis de los datos experimentales correspondientes a las medidas de fondo, se obtiene el espectro de el [Figura 2.6](#). La realización de este

espectro se ha basado en la suma de las lecturas de un elevado número de fondos, y se ha suavizado haciendo una media móvil de cinco puntos.

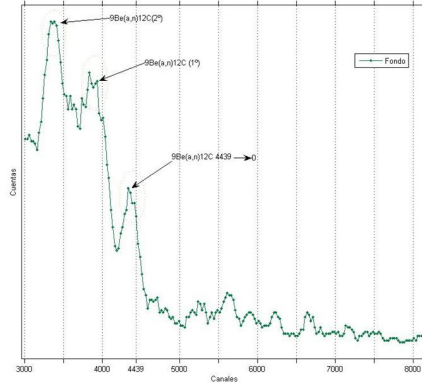


Figura 2.6: Posiciones del espectro teórico de la fuente de neutrones

3. Análisis de la respuesta de una muestra de masa y ley determinada. Se analizan muestras de fluorita de leyes en CaF_2 de 4,20 %, 27,85 %, 36,75 %, 74,33 % y 97,20 %. Se hicieron correlaciones con distintos tipos de ajuste: lineal, logarítmico, polinomial de segundo y tercer grado, potencial y exponencial, considerando o bien la media de los datos o todos los datos.
 - De las 48 comparaciones realizadas para distintas funciones de correlación y para distintas leyes, tanto si las realizamos con la media de los valores de las medidas como si lo realizamos con todas las medidas, se tiene que 45 veces resulta mejor el intervalo más estrecho de energías, y solamente tres veces se tiene menor correlación en el intervalo más amplio de energías. Como consecuencia de ello se concluye que se obtienen mejores coeficientes de correlación para el intervalo más estrecho de energías, es decir, entre 4,5 y 6 MeV. que para el intervalo más amplio, 4.5/6.5 MeV.
4. Análisis a través de modelos.

Se modeliza la señal (rayos γ), que llega a un detector procedente de la activación con neutrones de una muestra de fluorita considerando el efecto de la disminución del flujo de neutrones con la distancia a la fuente de neutrones y que los átomos de flúor debido a la activación, acaban emitiendo rayos gamma, y éstos en su recorrido hasta el detector, se atenúan de forma exponencial dependiendo de un coeficiente de atenuación característico de la muestra. Se demuestra que el intervalo de energías comprendido entre 4,5/6 MeV presenta siempre mejores correlaciones, y por eso, es el elegido para hacer el análisis.

5. Mejoras del proceso de activación neutrónica para la fluorita.

- El tiempo de activación en el proceso tiene una importancia relativa y para obtener una mayor lectura, no es suficiente con activar más tiempo, sino que hay que plantear de una manera conjunta el proceso de irradiación y el de lectura como se ve en [Figura 2.7](#).

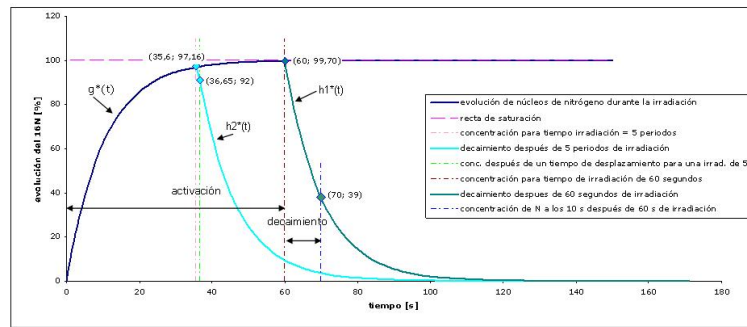


Figura 2.7: Evolución de los valores relativos de ^{16}N presentes en la muestra según el tiempo en un proceso de activación neutrónica.

- Tiempo de lectura óptimo para dar una señal máxima. Se estudia el tiempo de un ciclo considerando como tal el conjunto de los tiempos de activación y lectura, ver [Figura 2.8](#).

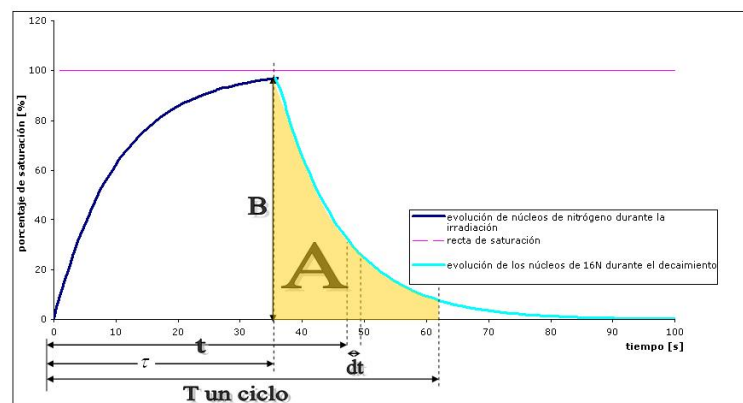


Figura 2.8: Ciclo de un periodo de irradiación y un periodo de medida

En realidad, es necesario un tiempo para desplazar la muestra desde su posición de irradiación hasta la posición de captura del espectro por el equipo de detección y medida. Denominamos este tiempo como tiempo de desplazamiento, y lo simbolizamos d .

Se considera que en el tiempo de proceso se incluyen dos veces el tiempo de desplazamiento, tal como se ve en [Figura 2.9](#), el primero de éstos se emplea en desplazar la muestra como se ha indicado anteriormente, y el segundo en el camino inverso. Vamos a repetir el estudio anterior considerando el tiempo de desplazamiento, inicialmente en un ciclo único, y después en varios ciclos.

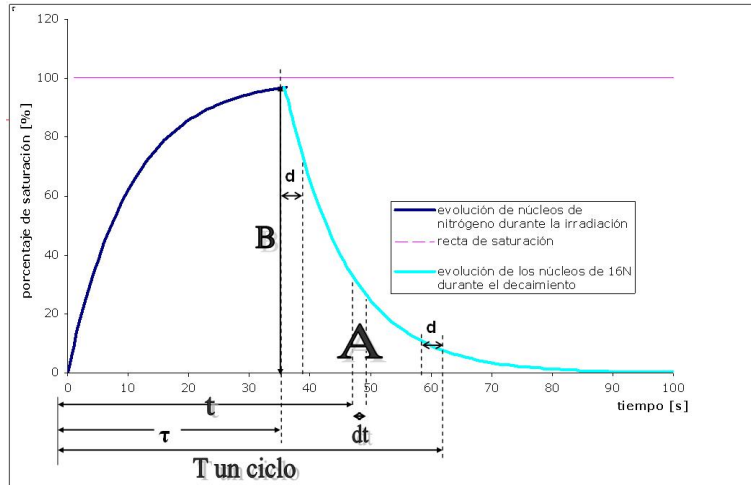


Figura 2.9: Ciclo de un periodo de irradiación y un periodo de medida con tiempo de desplazamiento.

- Es muy importante elegir bien los parámetros de tiempo de activación y de tiempo de lectura, ya que existe un amplio rango de posibilidades que dan lugar al mismo nivel de señal utilizando distinta cantidad del recurso que consideramos escaso, esto es el tiempo total de ciclo T .
- Para valores de tiempo de ciclo pequeños es mucho más importante activar exactamente al valor óptimo ya que pequeñas desviaciones producen importantes pérdidas de señal.
- Cuanto mayor es el tiempo de ciclo, mayor es la magnitud de la señal y cuanto mayor es el tiempo de ciclo la ganancia relativa de la señal es cada vez menor como puede verse en el valor de la derivada.
- Influencia del fondo en el tiempo óptimo de lectura. La variación de la señal en los primeros instantes decrece rápidamente y, en cambio, las líneas que representan al fondo son rectas y su variación es constante por lo que el fondo no influye en las ecuaciones de optimización del tiempo.
- Ciclo repetido.

- * A consecuencia del escaso número de cuentas alcanzado en los experimentos, incluso con muestras de alta ley, se plantea ahora la posibilidad de amplificar las lecturas aumentando el valor de las lecturas obtenidas utilizando el mismo ciclo de proceso total T , pero dividido en varios ciclos (n) de irradiación y lectura consecutivos, de duración individual de cada ciclo T/n
- * Se comprobó que, activando durante 6 ciclos de un tiempo individual de cada ciclo de 20s en vez de un solo ciclo de 120 s, la señal pasó a ser 2,319 respecto a 0.994 que era en el caso de un solo ciclo. También se comprobó que si se aumentaba el número de ciclos, la respuesta relativa no se incrementaba, sino que disminuía, pues pasaba de 2.319 a 1.778 con 12 ciclos de 10 segundos, e incluso a 1.073 con 24 ciclos de 5 s.
- * Evolución de la señal en relación con el número de ciclos de activación para unos tiempos de proceso determinados.

Sea cual sea el tiempo de proceso, se puede hacer uno o varios ciclos de activación/lectura, y los resultados pueden variar.

La mejora respecto a hacer una sola activación puede ser muy elevada si se selecciona correctamente el número de ciclos.

Si no se selecciona el número de ciclos adecuado, la ganancia puede ser poco significativa.

El número de ciclos necesario para obtener un beneficio se incrementa al aumentar el tiempo de proceso.

Para los tiempos de proceso puntuales analizados, existe un número de ciclos, para el cual se da una ganancia máxima de señal respecto a la señal obtenida si no se hiciera más que un solo ciclo de activación lectura. El tiempo de activación de cada ciclo óptimo, que proviene de la ecuación $\tau = T/2n$ tiende a un valor constante e igual a 13 s. El tiempo de activación ha de ser igual a la mitad del tiempo de lectura, y que todo el procedimiento se ha desarrollado detalladamente en el intervalo de 0 a 6 minutos.

Número óptimo de ciclos. El hecho de que se realice un procedimiento con ciclos consecutivos de activación y lectura hace que se amplifique la señal que pasa de

$$\left(1 - e^{-\frac{\lambda T}{2}}\right)^2$$

a ser:

$$n \cdot \left(1 - e^{-\frac{\lambda T}{2n}}\right)^2 = 0,0199T - 0,221$$

- Propuestas de investigaciones futuras en esta línea:

Aumentar el número de cuentas utilizando ciclos repetidos.

Automatizar el proceso de desplazamiento de la muestra y el tiempo de exposición frente a la fuente y frente al detector. Para ello se propone utilizar un servoposicionador eléctrico de precisión (motor lineal).

Utilizar el método en la determinación de otras sustancias relacionadas con las instalaciones mineras.

Comprobar los resultados utilizando detectores de otros tipos como el BGO y otras dimensiones, por ejemplo 3*3 pulgadas de NaI.

2.5.2. Activación neutrónica cíclica para la determinación del contenido en flúor de muestras de mineral de fluorita

Como continuación de la línea de investigación emprendida por el Dr. Rey Ronco y las propuestas de investigación futuras de su Tesis Doctoral resumida en la sección anterior surge la Tesis de la Dra. M^a Pilar Castro García [23] que se centró en la activación neutrónica de ciclos repetidos, utilizando un detector diferente, BGO, y empleando un equipo que permite automatizar el proceso de desplazamiento de la muestra y el tiempo de exposición frente a la fuente y frente al detector. El proceso por el que se gestionaron los archivos obtenidos en formato IEC para tratarlos con el programa de hoja de cálculo Excel de la empresa Microsoft fue tema de un Proyecto Fin de Carrera. Pasamos a exponer brevemente cada uno de estos temas.

Se empleó un **equipo de desplazamiento**, [Subsección 4.1.1](#), que permite automatizar el proceso de desplazamiento de la muestra y el tiempo de exposición frente a la fuente y frente al detector capturándose el espectro correspondiente a cada activación y tiempo de lectura mediante el programa *Gamma Adquisiton & Analysis*.

Durante el diseño del prototipo se hicieron las pruebas oportunas para determinar la mejor ubicación del detector en el prototipo, de modo que, por una parte, estuviera lo suficientemente alejado de la fuente de neutrones para evitar la lectura de la radiación directa, y por otra, lo suficientemente cerca de la fuente como para garantizar que el decaimiento ^{16}N , de apenas 7.13 s, continuara. La distancia entre la fuente y el detector fue de 450 mm.

Se realizaron diferentes experimentos, analizándose los espectros obtenidos con:

1. Diferentes tiempos de proceso.
2. Distinto número de ciclos.
3. Tiempos de activación y lectura iguales.

4. Tiempos de desplazamiento de 325 ms

Mediante el análisis del coeficiente de correlación se encontró que el intervalo de interés, es decir, aquél con mayor coeficiente de correlación y más representativo de los picos del ^{16}N era el comprendido entre 5250 y 6250 keV. En la tesis anterior el intervalo empleado era entre 4500 y 6000 keV.

Con un detector BGO se observó que el experimento con mayor coeficiente de correlación obtenido a través de la relación cuentas vs energía, $R^2 = 0,9902$ se lograba con 13 ciclos hechos con tiempos de activación y lectura iguales de 12s y tiempos de desplazamiento de 325 ms. En este caso un punto de ley supone 17 cuentas, por lo que se mejoró considerablemente el resultado de la tesis anterior y se confirmó la superioridad de la activación cíclica frente a la monocíclica. La lectura se hizo acumulada al final de todos los ciclos, pues se partía de un tiempo total de proceso que se subdividía en un número de ciclos individuales de activación y lectura, registrándose la lectura total del proceso completo.

Como líneas de investigación futura para mejorar la resolución del espectro e incrementar el número de cuentas por punto de ley se propuso incrementar el tiempo de proceso, hasta valores de varios minutos, pues en la experimentación realizada en esta tesis tiempos totales de ciclos eran inferiores a 2 min.

Gestión de los espectros obtenidos mediante una activación neutrónica cíclica en muestras de espato flúor

Dentro de los trabajos de esta Tesis se dirigió, conjuntamente con la directora de la presente Tesis, Dra. Teresa de Jesús Alonso Sánchez, el Proyecto Fin de Carrera *Gestión de los espectros obtenidos mediante una activación neutrónica cíclica en muestras de espato flúor*, del ingeniero D. Miguel Fernández Alonso.

La gestión de los archivos consistió en la preparación manual de los archivos IEC generados por los equipos de lectura para su tratamiento con el programa de hoja de cálculo Excel de la empresa Microsoft. Los pasos seguidos pueden resumirse:

1. Apertura para importación de (.IEC) con Excel para un ciclo determinado de un experimento dado.
2. Se establecen los separadores, 'espacio', contenidos en los datos.
3. Se selecciona 'General' como tipo de formato de datos, que permite convertir los valores numéricos en números, los valores de fechas en fechas, y todos los demás valores en texto.
4. Se copian en una plantilla para poder tenerlos agrupados. En esta plantilla, y en primer lugar, se realiza una ordenación de los canales del 1 al 1024 para tenerlos en una única columna.

5. Se repite el proceso manual anterior para cada ensayo disponiendo los datos de cada ensayo en una columna por lo que los datos de todos los canales quedarán representados en una matriz de 1025 filas por el número de columnas correspondiente al número de ensayos realizado.
6. Finalmente se guardan los datos con formato de archivo propio de Excel, *.xls, para poder trabajar sobre ellos.

Los ensayos a analizar en la presente Tesis Doctoral iban a gestionarse inicialmente del mismo modo que en la Tesis y Proyecto Fin de Carrera expuestos. Debido al gran número de archivos generados, 11 745, esto era inviable y se desarrolló un nuevo método que se explicará en [Sección 5.1](#).

Capítulo 3

Metodología

Para conseguir los temas objeto de la tesis, [Capítulo 1](#), es decir, la utilización de la activación neutrónica como método para obtener el contenido en sílice en una muestra de fluorita, la demostración de que no es necesaria la calibración de canales con fuentes isotópicas en procesos industriales, etc., se plantea utilizar una metodología en la que, por una parte, se estudiarán las reacciones nucleares que tienen lugar entre los elementos de varias muestras de fluorita y los neutrones con el fin de seleccionar las reacciones de decaimiento γ que permitan cuantificar el contenido en sílice.

Las muestras serán tomadas a lo largo del proceso mineralúrgico de concentración de fluorita en una planta de tratamiento en la que según, se enriquecen en flúor, se empobrecen en sílice.

Como equipo experimental se pretende utilizar el equipo de desplazamiento de las muestras utilizado en la tesis [23] y la misma instrumentación. El equipo será modificado para que registre el espectro acumulado al final de cada ciclo de activación mientras que, anteriormente, se registraba únicamente el espectro acumulado total de todos los ciclos que se realizaban.

Como método de análisis, dado el elevado número de ficheros de datos que se obtendrán, se desarrollará con R un método que permita tratarlos de forma automática y que, brevemente, se describe en la [Sección 3.4](#) de este capítulo.

3.1. Estudio teórico de las reacciones nucleares en una muestra de fluorita

Se estudiarán las reacciones nucleares que tienen lugar entre los elementos de varias muestras de fluorita y los neutrones. Estas muestras han sido tomadas a lo largo del proceso de concentración de fluorita en una planta de tratamiento en la que, según se enriquecen en flúor, su contenido en sílice disminuye.

Como se ha dicho, la activación neutrónica de isótopos estables de un elemento puede dar lugar a diferentes nucleidos dependiendo de la energía flujo de neutrones. Por eso es posible que distintas reacciones tengan lugar a través de reacciones nucleares diferentes de manera que produzcan el mismo núcleo. Es importante asegurarse que no hay reacciones que afecten a los resultados de la reacción elegida para el estudio por activación neutrónica de un elemento.

La composición elemental de las muestras es la siguiente:

- F que procede de la fluorita.
- Si que procede de la sílice y de los silicatos.
- Ca que procede de los carbonatos y de la fluorita.
- S de los sulfuros.
- Ba.
- Fe de los óxidos presentes.
- P.
- Mg.
- As.
- Hg.
- O que se encuentra en los carbonatos, la sílice o el agua.
- H del agua.

A continuación se muestra un estudio de las reacciones de los neutrones con cada uno de estos elementos, con objeto de analizar la viabilidad teórica de la detección de la sílice, y la posible interferencia con otros elementos presentes en la matriz.

Para el caso del silicio se detallarán las gráficas de las secciones eficaces de las reacciones nucleares de sus isótopos frente a la energía del neutrón incidente. Para el resto de elementos se presentará una tabla con las secciones eficaces de los isótopos en los que es relevante como para considerar la reacción de interés y, además, el rango de energías entra dentro del rango de energías de la fuente de Am-Be. Las reacciones en que no ocurra así, serán desechadas en este estudio, por no afectar a las posibles reacciones de interés de los isótopos del silicio.

3.1.1. Estudio de la Sílice

El silicio se encuentra en la naturaleza predominantemente en la forma $^{28}_{14}\text{Si}$ y, en mucha menor proporción, del orden de unas 30 veces menos, en las formas $^{29}_{14}\text{Si}$ y $^{30}_{14}\text{Si}$, tal como se puede ver en el [Cuadro 3.1](#).

Núclido	Abundancia(%)	Vida media	Decaimiento
^{28}Si	92.21	–	estable
^{29}Si	4.7	–	estable
^{30}Si	3.09	–	estable
^{31}Si	0	2.62 h	β^-
^{32}Si	0	1.0 E2 y	β^-

Cuadro 3.1: Isótopos del silicio

Se van a exponer a continuación todas las reacciones de los isótopos del Silicio que se han encontrado en la bibliografía científica. Para cada reacción se adjunta el gráfico de las distintas versiones de valores, según los autores, de las secciones eficaces, expresados en barn, según la energía del neutrón incidente, en MeV. Los autores, así como el año de la publicación aparecen en la misma gráfica.

La fuente de los datos son las bases de datos NUDAT [83] y EXFOR [40] y todas las reacciones a estudiar ya se han individualizado en la tesis del Dr. Rey Ronco, que buscaba interferencias con las reacciones del flúor, pero no se analizaron las posibles interferencias con las reacciones del silicio, ya que no era el elemento analizado.

Reacciones del ^{28}Si con los neutrones

De la [Figura 3.1](#) a la [Figura 3.11](#) muestran las secciones eficaces y los rangos de energías para las reacciones del ^{28}Si . Las reacciones de interés por sección eficaz y rango de energías se resumen en el [Cuadro 3.2](#) y se analizarán en las siguientes secciones.

Reacción	Energías activación	σ
$^{28}\text{Si}(N, P)^{28}\text{Al}$	En rango	0.3 barns
$^{28}\text{Si}(N, A)^{25}\text{Mg}$	6/11 MeV	1/800 mbarn
$^{28}\text{Si}(N, G)^{29}\text{Si}$	En rango	1E-4 barns

Cuadro 3.2: Reacciones de interés del ^{28}Si con los neutrones.

Reacción $^{28}\text{Si}(N, P)^{28}\text{Al}$

El producto de esta reacción, ^{28}Al , tiene el decaimiento cuyas características se dan en el [Cuadro 3.3](#).

Núcleo padre	$T_{1/2}$	Modo decaimiento	Valor GS-GS Q (keV)	Núcleo hijo
$^{28}_{13}\text{Al}$	2.2414 min	β^-	4641.8	$^{28}_{14}\text{Si}$

Cuadro 3.3: Características del decaimiento del $^{28}_{13}\text{Al}$

La emisión γ producida durante el decaimiento del $^{28}_{13}\text{Al}$ tiene las características del Cuadro 3.4.

Energía(keV)	Intensidad(%)
1778.85	100%

Cuadro 3.4: Energía de la emisión γ de decaimiento del $^{28}_{13}\text{Al}$

Será necesario comprobar que no hay otras energías de decaimiento de otros productos que puedan interferir con esta energía de 1778.85 keV.

Reacción $^{28}_{14}\text{Si}(N, A)^{25}_{12}\text{Mg}$

Carece de interés por ser estable el producto de la reacción, $^{28}_{13}\text{Al}$.

Reacción $^{28}_{14}\text{Si}(N, G)^{29}_{14}\text{Si}$

También es estable el producto de la reacción, $^{29}_{14}\text{Si}$, por lo que no producirá radiación.

Secciones eficaces de las reacciones del ^{28}Si en función de la energía del neutrón incidente

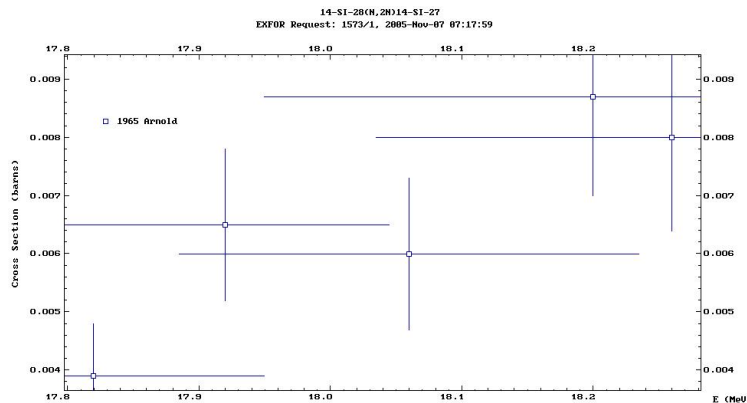


Figura 3.1: 14-Si-28(N, 2N)14-Si-27

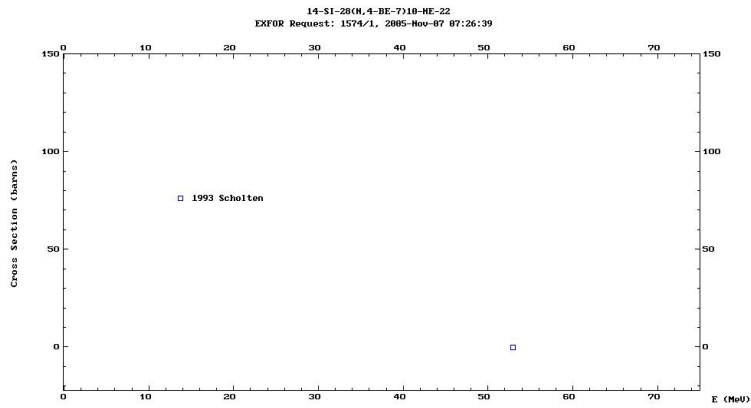


Figura 3.2: 14-Si-28(N, 4-BE-7)10-NE-22

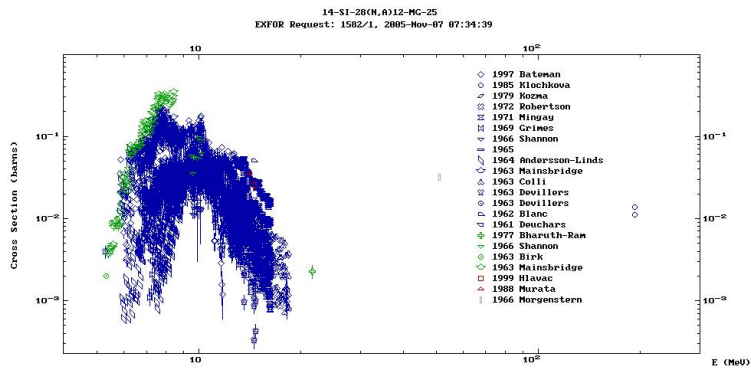


Figura 3.3: 14-Si-28(N, A)12-Mg-25

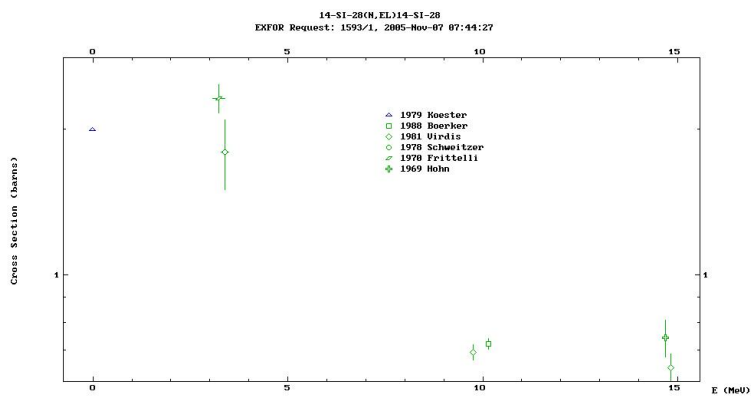


Figura 3.4: 14-Si-28(N, EL)

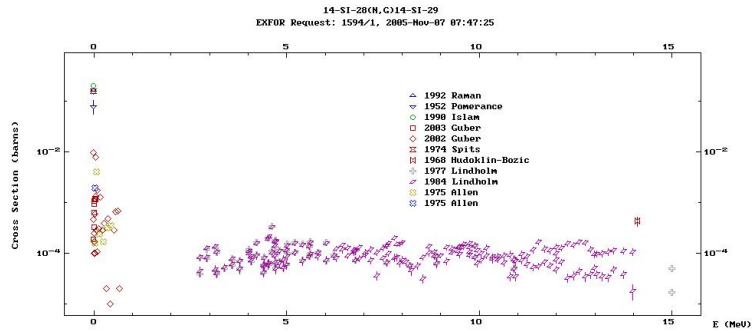


Figura 3.5: 14-Si-28(N, G)14-Si-29

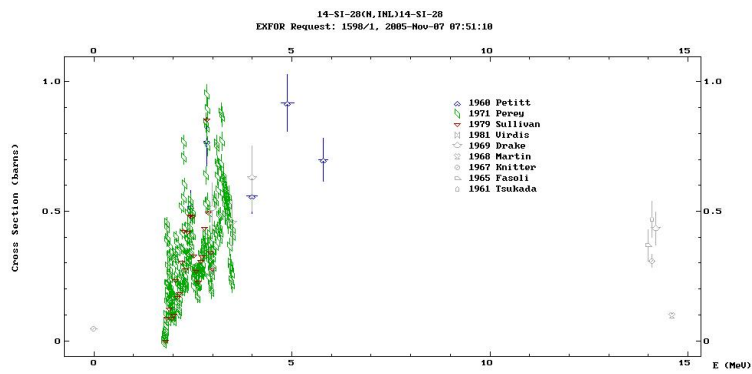


Figura 3.6: 14-Si-28(N, INL)14-Si-28

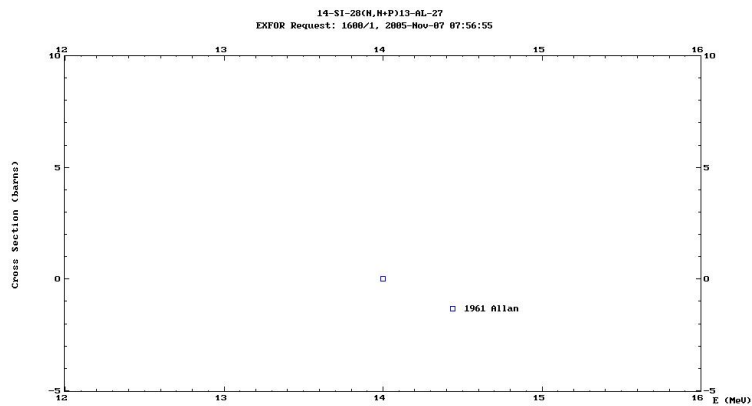


Figura 3.7: 14-Si-28(N, N + P)13-Al-27

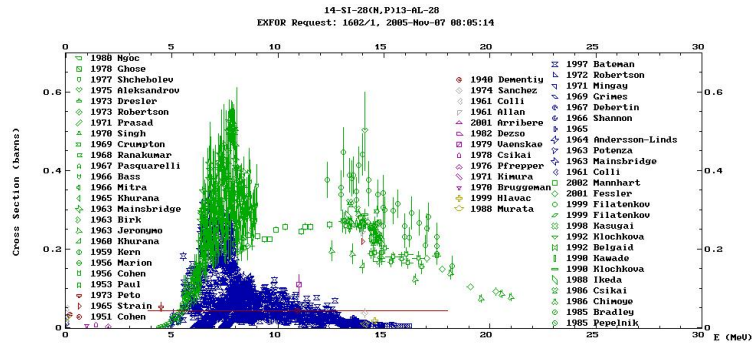


Figura 3.8: 14-Si-28(N, P)13-Al-28

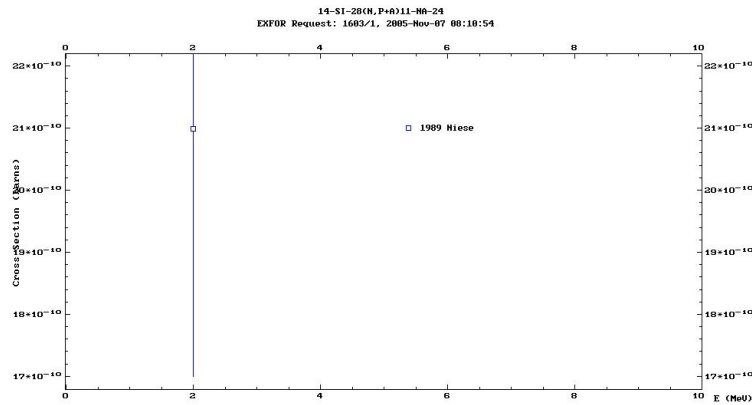


Figura 3.9: 14-Si-28(N, P + A)11-NA-24

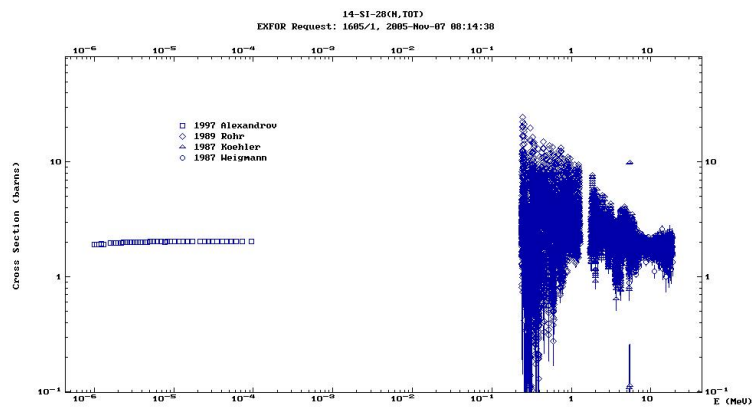


Figura 3.10: 14-Si-28(N, TOT)

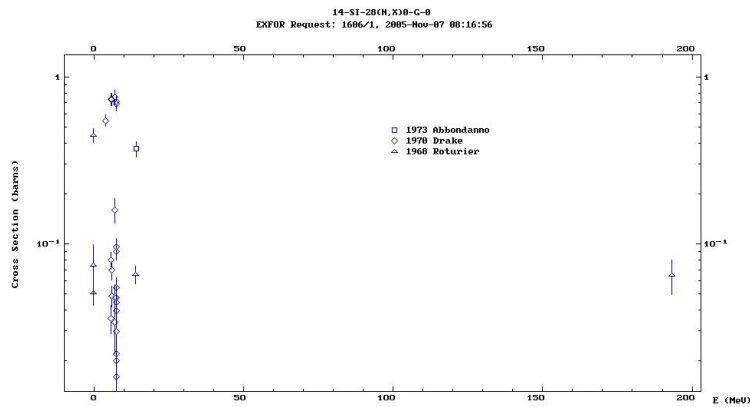


Figura 3.11: 14-Si-28(N, X)O-G-O

Reacciones del ^{29}Si con los neutrones

Las reacciones de interés por sección eficaz y rango de energías se resumen en el Cuadro 3.5.

Reacción	Energías activación	σ
$^{29}_{14}\text{Si}(N, A)^{26}_{12}\text{Mg}$	En rango	0.05 barn
$^{29}_{14}\text{Si}(N, P)^{29}_{13}\text{Al}$	En rango	0.06 barn

Cuadro 3.5: Reacciones de interés del ^{29}Si con los neutrones.

Reacción $^{29}_{14}\text{Si}(N, A)^{26}_{12}\text{Mg}$

Carece de interés por ser estable el producto de la reacción, $^{26}_{12}\text{Mg}$.

Reacción $^{29}_{14}\text{Si}(N, P)^{29}_{13}\text{Al}$

El producto de esta reacción, $^{29}_{13}\text{Al}$, tiene el decaimiento cuyas características se dan en el Cuadro 3.6.

Núcleo padre	$T_{1/2}$	Modo decaimiento	Valor GS-GS Q (keV)	Núcleo hijo
$^{29}_{13}\text{Al}$	6.56 min	β^-	3679.6	$^{29}_{14}\text{Si}$

Cuadro 3.6: Características del decaimiento del $^{29}_{13}\text{Al}$

La emisión γ producida durante el decaimiento del $^{29}_{13}\text{Al}$ tiene las características de el Cuadro 3.7.

Energía(keV)	Intensidad(%)
397.86	0.026 %
754.74	0.230 %
1038.86	0.005 %
1152.593	0.88 %
1273.368	90.6 %
1793.57	0.022 %
1793.57	0.022 %
2028.07	3.70 %
2425.906	5.7 %

Cuadro 3.7: Energía de la emisión γ del decaimiento del $^{29}_{13}\text{Al}$

Será necesario comprobar que no hay otras energías de decaimiento de otros productos que puedan interferir con esta energía de 1273.368 keV.

Secciones eficaces de las reacciones del ^{29}Si en función de la energía del neutrón incidente

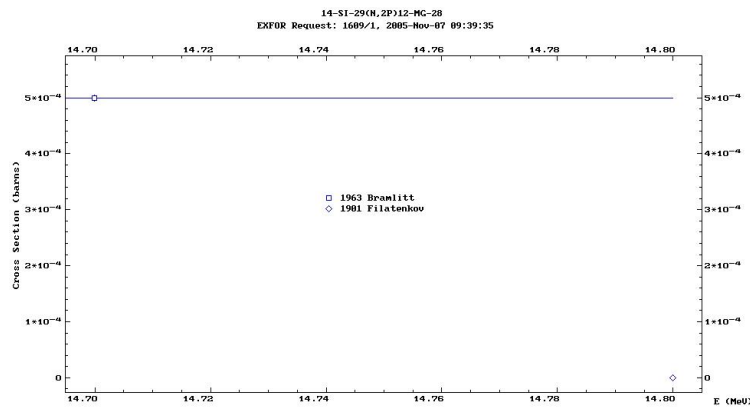


Figura 3.12: 14-Si-29(N, 2P)12-Mg-28

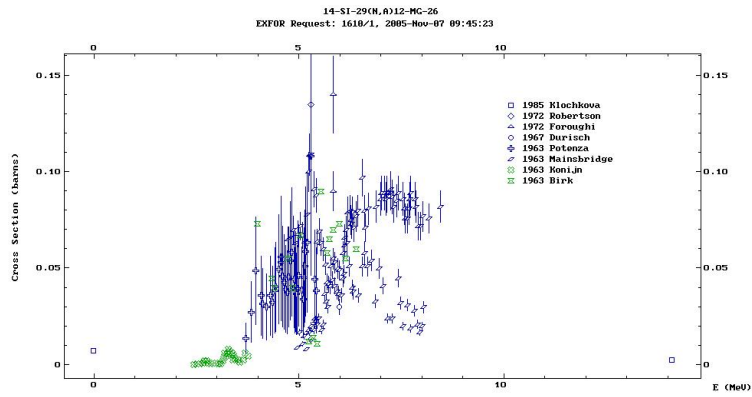


Figura 3.13: 14-Si-29(N, A)12-Mg-26

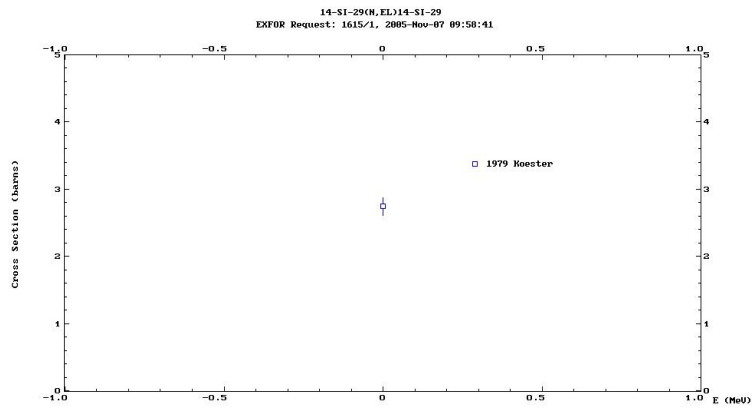


Figura 3.14: 14-Si-29(N, EL)

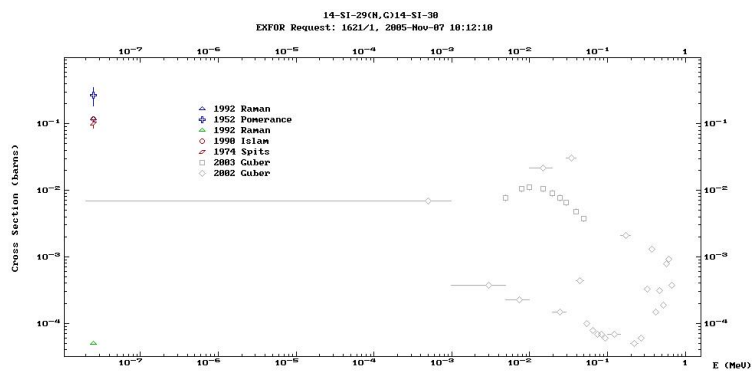


Figura 3.15: 14-Si-29(N, G)14-Si-30

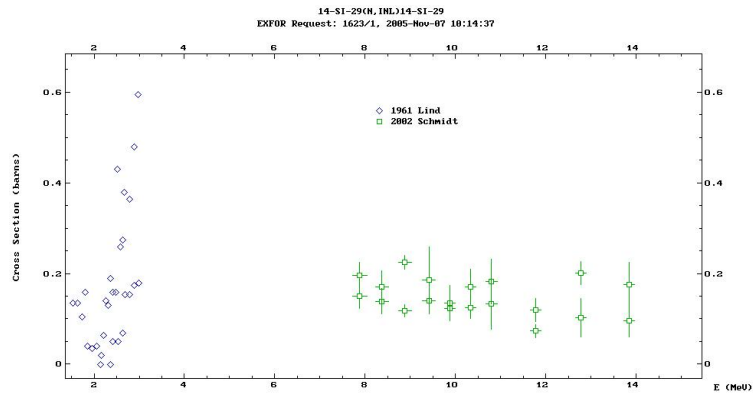


Figura 3.16: 14-Si-29(N, INL)14-Si-29

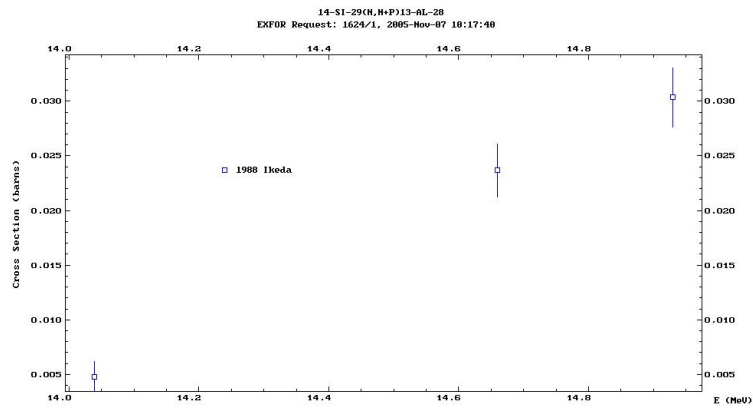


Figura 3.17: 14-Si-29(N, N + P)13-Al-28

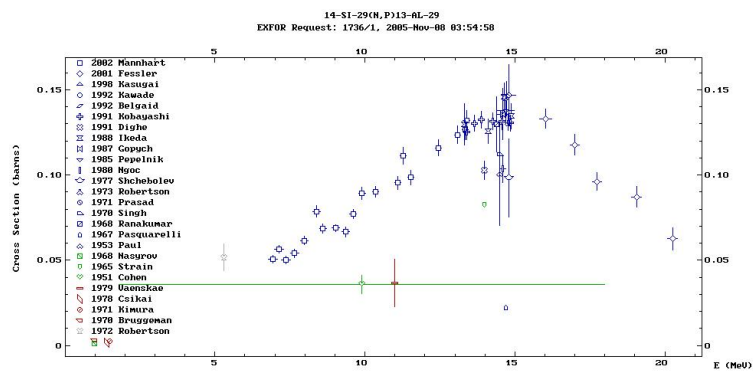


Figura 3.18: 14-Si-29(N, P)13-Al-29

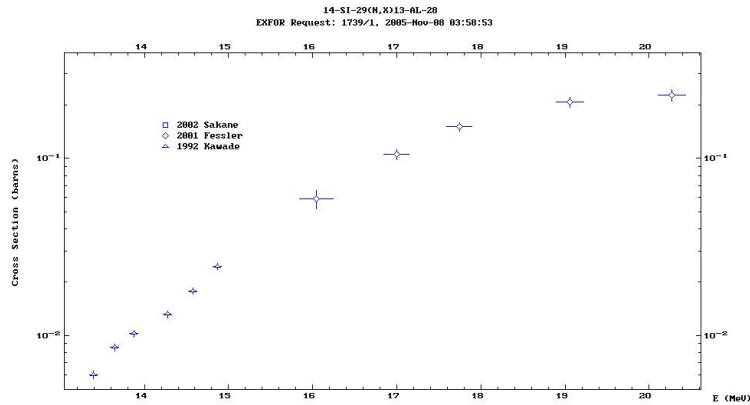


Figura 3.19: 14-Si-29(N, X)13-Al-28

Reacciones del ^{30}Si con los neutrones

Reacción $^{30}_{14}\text{Si}(N, A)^{27}_{12}\text{Mg}$

El producto de esta reacción, $^{27}_{12}\text{Mg}$, tiene el decaimiento cuyas características se dan en Cuadro 3.8.

Núcleo padre	$T_{1/2}$	Modo decaimiento	Valor GS-GS Q (keV)	Núcleo hijo
$^{27}_{12}\text{Mg}$	9.458 min	β^-	2610.6	$^{27}_{13}\text{Al}$

Cuadro 3.8: Características del decaimiento del $^{27}_{12}\text{Mg}$

La emisión γ producida durante el decaimiento del $^{27}_{12}\text{Mg}$ tiene las características de Cuadro 3.9.

Energía(keV)	Intensidad(%)
170.686	29 %
843.76	71.8 %
1014.44	28.0 %

Cuadro 3.9: Energía de la emisión γ del $^{27}_{12}\text{Mg}$

Secciones eficaces de las reacciones del ^{30}Si en función de la energía del neutrón incidente

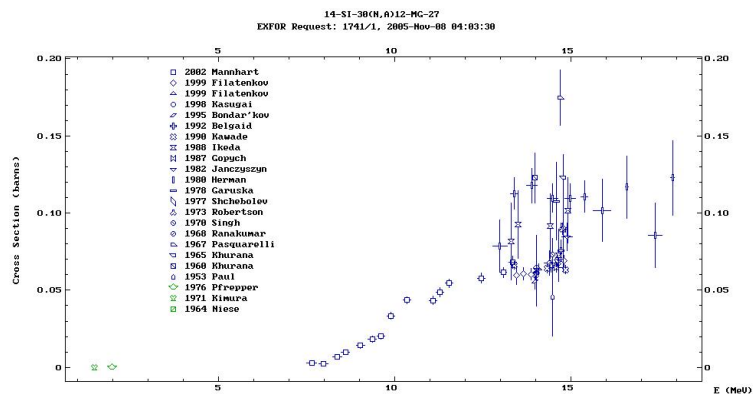


Figura 3.20: 14-Si-30(N, A)12-Mg-27

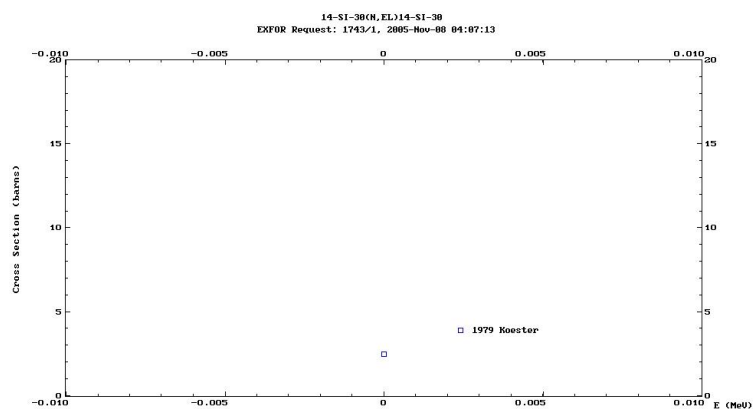


Figura 3.21: 14-Si-30(N, EL)14-Si-30

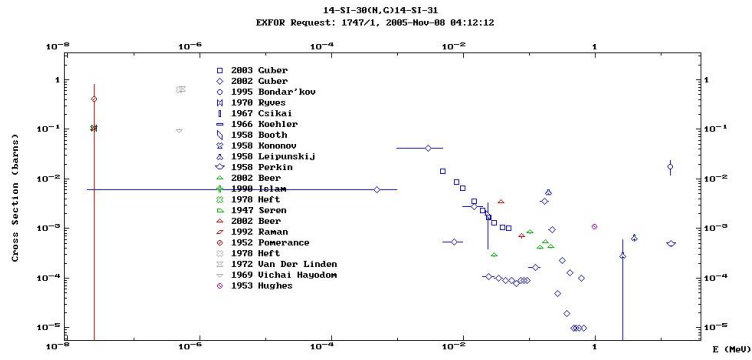


Figura 3.22: 14-Si-30(N, G)14-Si-31

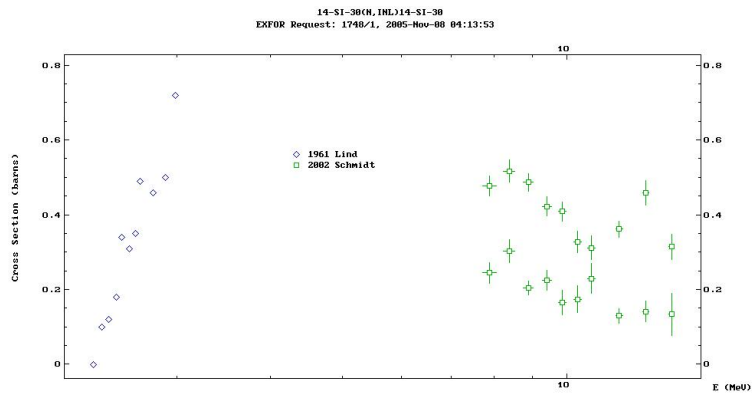


Figura 3.23: 14-Si-30(N, INL)14-Si-30

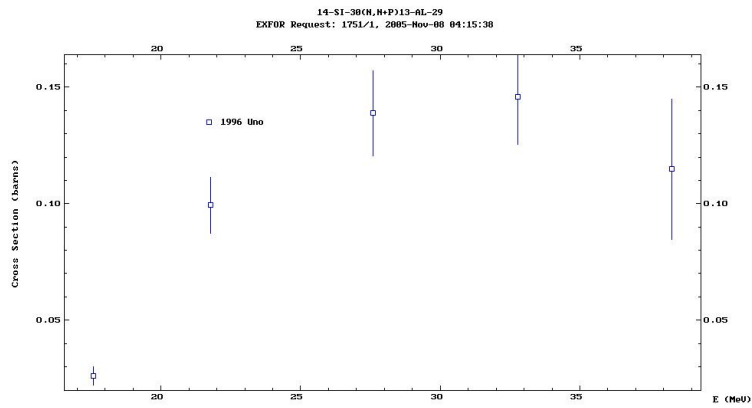


Figura 3.24: 14-Si-30(N, N + P)13-Al-29

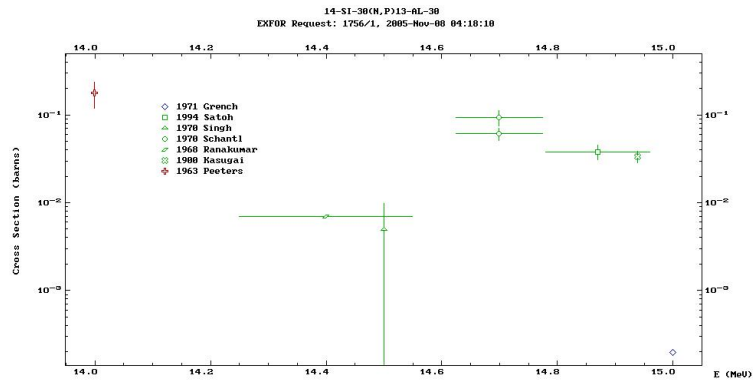


Figura 3.25: 14-Si-30(N, P)13-Al-30

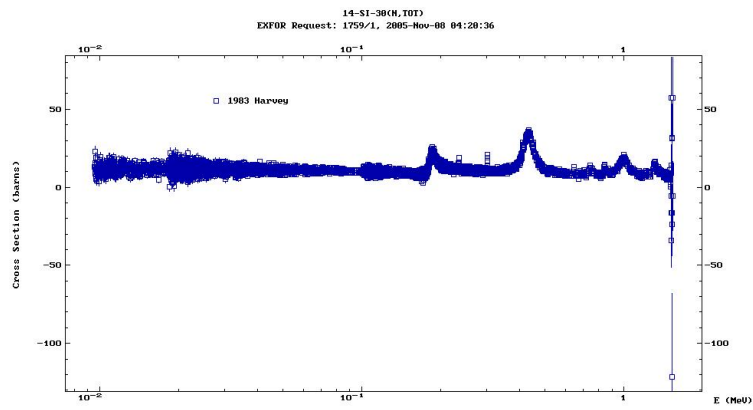


Figura 3.26: 14-Si-30(N, TOT)

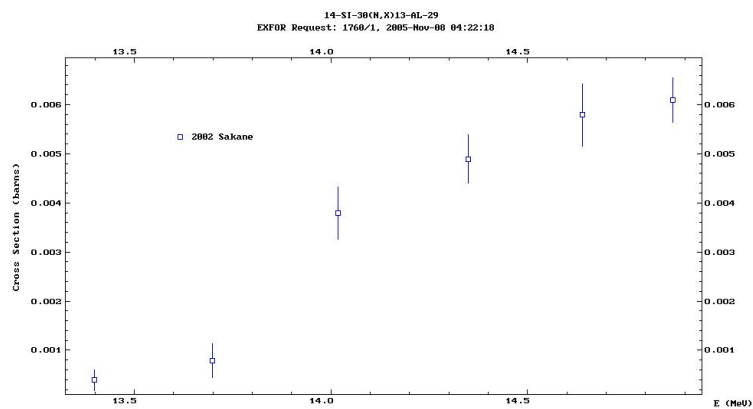


Figura 3.27: 14-Si-30(N, X)13-Al-29

3.1.2. Estudio del Flúor

El flúor se estudió en profundidad en la tesis de 2007 del Dr. Rey Ronco y se vio que no tenía interferencias con el silicio ni con ningún otro elemento de las muestras de fluorita, por lo que no sería necesario profundizar en él. No obstante, exponemos las reacciones básicas que se producen en la activación neutrónica de las muestras de fluorita al igual que con los otros elementos presentes.

El flúor se encuentra en la naturaleza únicamente en la forma del isótopo ^{19}F , tal como se ve en el [Cuadro 3.10](#)

Isótopo	Abundancia(%)	$T_{1/2}$	Decaimiento
^{18}F	0	1.83 h	$\beta-$, EC
^{19}F	100	–	estable

Cuadro 3.10: Isótopos del Flúor

Las reacciones de interés del ^{19}F , por encontrarse en el rango de activación de la fuente Am-Be que tienen una sección eficaz considerable, se dan en el [Cuadro 3.11](#)

Reacción	Energías activación	σ
$^{19}\text{F}(n, \alpha)^{16}\text{N}$	En rango	0/0.3
$^{19}\text{F}(n, \gamma)^{20}\text{F}$	Por debajo	<0.2
$^{19}\text{F}(n, p)^{19}\text{O}$	En rango	<0.01

Cuadro 3.11: Reacciones de interés del Flúor con los neutrones.

Analizaremos las tres reacciones de el [Cuadro 3.11](#) en los apartados siguientes.

Reacción $^{19}\text{F}(N, p)^{19}\text{O}$

El producto de esta reacción, ^{19}O , tiene el decaimiento cuyas características se dan en el [Cuadro 3.12](#).

Núcleo padre	$T_{1/2}$	Modo decaimiento	Valor GS-GS Q (keV)	Núcleo hijo
^{19}O	26.88 s	$\beta-$	4819.6	^{19}F

Cuadro 3.12: Características del decaimiento del ^{19}O

La emisión γ producida durante el decaimiento del ^{19}O tiene las características expuestas en [Cuadro 3.13](#).

Energía(keV)	Intensidad(%)
109,894	2,54
197,14	95,9
1149	5E-4
1236	0,0170
1356,843	50,4
1444,085	2,64
1553,970	1,39
2353,98	0,00181
2582,517	0,0189
3710,64	0,00110
3797,87	0,00133
3907,74	0,00384
4180,063	0,0792

Cuadro 3.13: Energía de la emisión γ del ^{19}O **Reacción $^{19}\text{F}(n, G)^{20}\text{F}$**

El producto de esta reacción, ^{20}F , tiene el decaimiento cuyas características se dan en [Cuadro 3.14](#).

Núcleo padre	$T_{1/2}$	Modo decaimiento	Valor GS-GS Q (keV)	Núcleo hijo
^{20}F	11.163 s	β^-	7024.53	^{20}Ne

Cuadro 3.14: Características del decaimiento del ^{20}F

La emisión γ producida durante el decaimiento del ^{20}F tiene las características dadas en [Cuadro 3.15](#).

Energía(keV)	Intensidad(%)
1633.602	99.1
3332.54	0.0082
4965.85	5E-5

Cuadro 3.15: Energía de la emisión γ del $^{20}_9F$ **Reacción** $^{19}_9F(n, \alpha)^{16}_7N$

El producto de esta reacción, $^{16}_7N$, tiene el decaimiento cuyas características se dan en [Cuadro 3.16](#).

Núcleo padre	$T_{1/2}$	Modo decaimiento	Valor GS-GS Q (keV)	Núcleo hijo
$^{16}_7N$	7.13 s	β^-	10419.1	$^{16}_8O$

Cuadro 3.16: Características del decaimiento del $^{16}_7N$

La emisión γ producida durante el decaimiento del $^{16}_7N$ tiene las características expuestas en [Cuadro 3.17](#).

Energía(keV)	Intensidad(%)
787,2	1,5E-6
867,7	2,100E-4
986,93	0,0034
1067,5	1,5E-5
1754,9	0,121
1954,7	0,038
2741,5	0,82
2822,2	0,13
6048,2	0,14
6128,63	67,0
6915,5	0,038
7115,15	4,9
8869,3	0,076

Cuadro 3.17: Energía de la emisión γ del $^{16}_7N$

3.1.3. Estudio del Calcio

La [Cuadro 3.18](#) da la abundancia, vida media y tipo de decaimiento de los dos isótopos del calcio con relevancia en las muestras de fluorita.

Isótopo	Abundancia(%)	$T_{1/2}$	Decaimiento
^{40}Ca	96.97		estable
^{44}Ca	2.06		estable

Cuadro 3.18: Isótopos del Calcio

Reacciones del ^{40}Ca con los neutrones

Las reacciones de interés del ^{40}Ca , por encontrarse en el rango de activación de la fuente Am-Be que tienen una sección eficaz considerable, se dan en el [Cuadro 3.19](#)

Reacción	Energías activación	σ
$^{40}_{20}\text{Ca}(n, a)^{37}_{18}\text{Ar}$	2/5 MeV	0.01 barn
$^{40}_{20}\text{Ca}(n, p)^{40}_{19}\text{K}$	2/6 MeV	<0.2 barn

Cuadro 3.19: Reacciones de interés del $^{40}_{20}\text{Ca}$ con los neutrones.

Reacción $^{40}_{20}\text{Ca}(n, a)^{37}_{18}\text{Ar}$

El producto de esta reacción, $^{37}_{18}\text{Ar}$, tiene el decaimiento cuyas características se dan en el [Cuadro 3.20](#).

Núcleo padre	$T_{1/2}$	Modo decaimiento	Valor GS-GS Q (keV)	Núcleo hijo
$^{37}_{18}\text{Ar}$	35.04 d	ϵ	81.5	$^{37}_{17}\text{Cl}$

Cuadro 3.20: Características del decaimiento del $^{37}_{18}\text{Ar}$

La emisión ϵ producida durante el decaimiento del $^{37}_{18}\text{Ar}$ no interferirá.

Reacción $^{40}_{20}\text{Ca}(n, p)^{40}_{19}\text{K}$

El producto de esta reacción, $^{40}_{19}\text{K}$, tiene el decaimiento cuyas características se dan en el [Cuadro 3.21](#).

Núcleo padre	$T_{1/2}$	Modo decaimiento	Valor GS-GS Q (keV)	Núcleo hijo
$^{40}_{19}K$	1.248E+9 años	ϵ	1504.69	$^{40}_{18}Ar$

Cuadro 3.21: Características del decaimiento del $^{40}_{19}K$

La emisión γ producida durante el decaimiento del $^{40}_{19}K$ tiene las características de el Cuadro 3.22.

Energía(keV)	Intensidad(%)
1460.822	10.66

Cuadro 3.22: Energía de la emisión γ del $^{40}_{19}K$

Reacciones del ^{44}Ca con los neutrones

La única reacción de interés del ^{44}Ca , por encontrarse en el rango de activación de la fuente Am-Be que tienen una sección eficaz considerable, se da en Cuadro 3.23.

Reacción	Energías activación	σ
$^{44}_{20}Ca(n,p)^{44}_{19}K$	>12 MeV	<0.04 barn

Cuadro 3.23: Reacciones de interés del $^{40}_{20}Ca$ con los neutrones.

Esta reacción no tiene interés por estar fuera del rango de energías de la fuente de Am-Be por lo que, aunque su porcentaje en el calcio es significativo, no afecta a nuestros ensayos.

3.1.4. Estudio del Azufre

Los isótopos del Azufre figuran en el [Cuadro 3.24](#).

Isótopo	Abundancia(%)	$T_{1/2}$	Decaimiento
^{32}S	95.02	–	estable
^{33}S	0.76	–	estable
^{34}S	4.22	–	estable
^{35}S	0	87.2 d	β^-
^{36}S	0.014	–	estable

Cuadro 3.24: Isótopos del Azufre

Reacciones del ^{32}S con los neutrones

La única reacción del ^{32}S que puede tener interés, por rango de energías y sección eficaz figura en el [Cuadro 3.24](#), pero el producto $^{29}_{14}\text{Si}$ es estable y no causará interferencias.

Reacción	Energías activación	σ
$^{32}_{16}\text{S}(n, a)^{29}_{14}\text{Si}$	<4 MeV	0.01/0.4 barn

Cuadro 3.25: Reacciones de interés del $^{32}_{16}\text{S}$ con los neutrones.

Reacciones del ^{34}S con los neutrones

Reacción	Energías activación	σ
$^{34}_{16}\text{S}(n, a)^{31}_{14}\text{Si}$	4.5/10 MeV	<0.1 barn

Cuadro 3.26: Reacciones de interés del $^{34}_{16}\text{S}$ con los neutrones.

El producto de esta reacción, $^{31}_{14}\text{Si}$, tiene el decaimiento cuyas características se dan en [Cuadro 3.27](#) y la emisión γ producida durante su decaimiento tiene la energía indicada en [Cuadro 3.28](#).

Núcleo padre	$T_{1/2}$	Modo decaimiento	Valor GS-GS Q (keV)	Núcleo hijo
$^{31}_{14}\text{Si}$	157.3 min	β^-	1490.5	$^{31}_{15}\text{P}$

Cuadro 3.27: Características del decaimiento del $^{31}_{14}\text{Si}$

Energía(keV)	Intensidad(%)
1266.15	0.07

Cuadro 3.28: Energía de la emisión γ del $^{31}_{14}\text{Si}$

3.1.5. Estudio del Bario

Los isótopos del Bario con presencia relevante en la naturaleza figuran en el [Cuadro 3.29](#).

Isótopo	Abundancia(%)	$T_{1/2}$	Decaimiento
^{134}Ba	2.42	–	estable
^{135}Ba	6.59	–	estable
^{136}Ba	7.81	–	estable
^{137}Ba	11.32	–	estable
^{138}Ba	71.66	–	estable

Cuadro 3.29: Isótopos del Bario

Reacciones del ^{134}Ba con los neutrones

La sección eficaz de la reacción posible del ^{134}Ba con los neutrones de una fuente Am-Be se da en el [Cuadro 3.30](#). Como el isótopo producido, $^{135}_{56}\text{Ba}$, es estable, no producirá interferencias.

Reacciones del ^{135}Ba con los neutrones

La única reacción del ^{135}Ba que puede tener interés, por rango de energías y sección eficaz figura en el [Cuadro 3.31](#), pero el producto $^{136}_{56}\text{Ba}$ es estable y no causará interferencias.

Reacción	Energías activación	σ
${}_{56}^{134}\text{Ba}(n, g){}_{56}^{135}\text{Ba}$	<10 MeV	<0.2 barn
${}_{56}^{134}\text{Ba}(n, INL){}_{56}^{134}\text{Ba}$	2/6 MeV	<0.1 barn

Cuadro 3.30: Reacciones de interés del ${}_{56}^{134}\text{Ba}$ con los neutrones.

Reacción	Energías activación	σ
${}_{56}^{135}\text{Ba}(n, g){}_{56}^{136}\text{Ba}$	<5 MeV	<0.01 barn
${}_{56}^{135}\text{Ba}(n, 2n){}_{56}^{135}\text{Ba}$	<7 MeV	<0.1 barn

Cuadro 3.31: Reacciones de interés del ${}_{56}^{135}\text{Ba}$ con los neutrones.

Reacciones del ${}_{56}^{136}\text{Ba}$ con los neutrones

La única reacción del ${}_{56}^{136}\text{Ba}$ que puede tener interés, por rango de energías y sección eficaz capaces de interactuar con los neutrones de una fuente Am-Be, figura en el Cuadro 3.32, pero el producto ${}_{56}^{137}\text{Ba}$ es estable y no causará interferencias.

Reacción	Energías activación	σ
${}_{56}^{136}\text{Ba}(n, g){}_{56}^{137}\text{Ba}$	<6 MeV	<0.01 barn

Cuadro 3.32: Reacciones de interés del ${}_{56}^{136}\text{Ba}$ con los neutrones.

Reacciones del ${}_{56}^{137}\text{Ba}$ con los neutrones

La única reacción del ${}_{56}^{137}\text{Ba}$ que puede tener interés, por rango de energías y sección eficaz capaces de interactuar con los neutrones de una fuente Am-Be, figura en el Cuadro 3.33, pero el producto ${}_{56}^{138}\text{Ba}$ es estable y no causará interferencias.

Reacción	Energías activación	σ
${}_{56}^{137}\text{Ba}(n, g){}_{56}^{138}\text{Ba}$	<5 MeV	<0.02 barn

Cuadro 3.33: Reacciones de interés del ${}_{56}^{137}\text{Ba}$ con los neutrones.

Reacciones del ^{138}Ba con los neutrones

La única reacción del ^{138}Ba que puede tener interés, por rango de energías y sección eficaz capaces de interactuar con los neutrones de una fuente Am-Be, figura en el Cuadro 3.34.

Reacción	Energías activación	σ
$^{138}_{56}\text{Ba}(n, g)^{139}_{56}\text{Ba}$	<4 MeV	<0.04 barn

Cuadro 3.34: Reacciones de interés del $^{138}_{56}\text{Ba}$ con los neutrones.

El producto de esta reacción, $^{139}_{56}\text{Ba}$, tiene el decaimiento cuyas características se dan en el Cuadro 3.35 y la emisión γ de intensidad >1 producida durante su decaimiento tiene la energía indicada en el Cuadro 3.36.

Núcleo padre	$T_{1/2}$	Modo decaimiento	Valor GS-GS Q (keV)	Núcleo hijo
$^{139}_{56}\text{Ba}$	83.06 min	β^-	2316.8	$^{139}_{57}\text{La}$

Cuadro 3.35: Características del decaimiento del $^{139}_{56}\text{Ba}$

Energía(keV)	Intensidad(%)
165,8575	24

Cuadro 3.36: Energía de la emisión γ del $^{139}_{56}\text{Ba}$

3.1.6. Estudio del Hierro

La Cuadro 3.37 da la abundancia, vida media y tipo de decaimiento de los isótopos del hierro presentes en la naturaleza.

Reacciones del ^{54}Fe con los neutrones

La reacción de interés del ^{54}Fe , por encontrarse en el rango de activación de la fuente Am-Be que tiene una sección eficaz considerable, se dan en el Cuadro 3.38.

El producto de esta reacción, $^{31}_{14}\text{Si}$, tiene el decaimiento cuyas características se dan en el Cuadro 3.39 y la emisión γ producida durante su decaimiento tiene la energía indicada en el Cuadro 3.40. Con la vida media tan larga en comparación con la de

Isótopo	Abundancia(%)	$T_{1/2}$	Decaimiento
^{54}Fe	5.82	–	estable
^{56}Fe	91.66	–	estable
^{57}Fe	2.19	–	estable
^{58}Fe	0.33	–	estable

Cuadro 3.37: Isótopos del Hierro

Reacción	Energías activación	σ
$^{54}_{26}\text{Fe}(n, a)^{51}_{24}\text{Cr}$	4/10 MeV	0.005/0.02 barn

Cuadro 3.38: Reacciones de interés del $^{54}_{26}\text{Fe}$ con los neutrones.

los productos de la sílice y la pequeña presencia en la naturaleza, no va a producir interferencias.

Núcleo padre	$T_{1/2}$	Modo decaimiento	Valor GS-GS Q (keV)	Núcleo hijo
$^{51}_{24}\text{Cr}$	27.701 d	ϵ	1490.5	$^{51}_{23}\text{V}$

Cuadro 3.39: Características del decaimiento del $^{51}_{24}\text{Cr}$

Energía(keV)	Intensidad(%)
320,0824	9,910

Cuadro 3.40: Energía de la emisión γ del $^{51}_{24}\text{Cr}$

Reacciones del ^{56}Fe con los neutrones

Las reacciones de interés del ^{56}Fe , por encontrarse en el rango de activación de la fuente Am-Be que tienen una sección eficaz considerable, se dan en el [Cuadro 3.41](#)

Reacción	Energías activación	σ
${}_{26}^{56}\text{Fe}(n, 2n){}_{26}^{55}\text{Fe}$	2/3 MeV	<0.1 barn
${}_{26}^{56}\text{Fe}(n, a){}_{24}^{53}\text{Cr}$	7/10 MeV	<0.008 barn
${}_{26}^{56}\text{Fe}(n, D){}_{25}^{55}\text{Mn}$		<0.01 barn
${}_{26}^{56}\text{Fe}(n, g){}_{26}^{57}\text{Fe}$	<2MeV MeV	<0.001 barn
${}_{26}^{56}\text{Fe}(n, p){}_{25}^{56}\text{Mn}$	4/12 MeV	<0.2 barn

Cuadro 3.41: Reacciones de interés del ${}_{26}^{56}\text{Fe}$ con los neutrones.**Reacción** ${}_{26}^{56}\text{Fe}(n, 2n){}_{26}^{55}\text{Fe}$

El producto de esta reacción, ${}_{26}^{55}\text{Fe}$, tiene el decaimiento cuyas características se dan en el [Cuadro 3.42](#).

Núcleo padre	$T_{1/2}$	Modo decaimiento	Valor GS-Gs Q (keV)	Núcleo hijo
${}_{26}^{55}\text{Fe}$	2.737 años	ϵ	231.38	${}_{25}^{55}\text{Mn}$

Cuadro 3.42: Características del decaimiento del ${}_{26}^{55}\text{Fe}$

Por el tipo de energía de decaimiento no afecta a la determinación del silicio.

Reacción ${}_{26}^{56}\text{Fe}(n, p){}_{25}^{56}\text{Mn}$

El producto de esta reacción, ${}_{25}^{56}\text{Mn}$, tiene el decaimiento cuyas características se dan en el [Cuadro 3.43](#) y la emisión γ producida durante su decaimiento tiene la energía indicada en el [Cuadro 3.44](#).

Núcleo padre	$T_{1/2}$	Modo decaimiento	Valor GS-GS Q (keV)	Núcleo hijo
${}_{25}^{56}\text{Mn}$	2.5789 h	β^-	3695.5	${}_{26}^{56}\text{Fe}$

Cuadro 3.43: Características del decaimiento del ${}_{25}^{56}\text{Mn}$

Energía(keV)	Intensidad(%)
846,754	98,9
1037,818	0,040
1238,25	0,09
1810,72	27,2
2113,0	14,3
2522,88	0,9
2598,40	0,0188
2657,45	0,653
2959,77	0,306
3369,60	0,16

Cuadro 3.44: Energía de la emisión γ del $^{56}_{25}\text{Mn}$

Reacciones del ^{57}Fe con los neutrones

La reacción de posible interés del ^{57}Fe , por encontrarse en el rango de activación de la fuente Am-Be, figura en el Cuadro 3.45 y el producto de esta reacción, ^4_2He , es una partícula α que no va a interferir con las medidas.

Reacción	Energías activación	σ
$^{57}_{26}\text{Fe}(n, X)^4_2\text{He}$	En rango	<0.05 barn

Cuadro 3.45: Reacciones de interés del $^{57}_{26}\text{Fe}$ con los neutrones.

3.1.7. Estudio del Fósforo

En la naturaleza existe solamente bajo la forma del isótopo ^{31}P , tal como se ve en el Cuadro 3.46.

Las reacciones de interés del ^{31}P , por encontrarse en el rango de activación de la fuente Am-Be que tiene una sección eficaz considerable, se dan en el Cuadro 3.47.

Isótopo	Abundancia(%)	$T_{1/2}$	Decaimiento
^{31}P	100	–	estable
^{32}P	0	14.28 d	β^-
^{33}P	0	14.28 d	β^-

Cuadro 3.46: Isótopos del Fósforo

Reacción	Energías activación	σ
$^{31}_{15}\text{P}(n, 2a)^{24}_{11}\text{Na}$	4 MeV	3 barn
$^{31}_{15}\text{P}(n, a)^{28}_{13}\text{Al}$	En rango	<0.15 barn
$^{31}_{15}\text{P}(n, p)^{31}_{14}\text{Si}$	En rango	<0.15 barn

Cuadro 3.47: Reacciones de interés del $^{31}_{15}\text{P}$ con los neutrones.**Reacción** $^{31}_{15}\text{P}(n, 2a)^{24}_{11}\text{Na}$

El producto de esta reacción, $^{24}_{11}\text{Na}$, tiene dos modos de decaimiento cuyas características se dan en el [Cuadro 3.48](#). Uno es demasiado rápido, teniendo lugar durante la irradiación de la muestra y el otro, de varias horas, por lo que no es necesario considerar su interferencia con las reacciones del silicio.

Núcleo padre	$T_{1/2}$	Modo decaimiento	Valor GS-GS Q (keV)	Núcleo hijo
$^{24}_{11}\text{Na}$	20.20 m/ 14.9590 hs	β^-	5513.6	$^{24}_{12}\text{Mg}$

Cuadro 3.48: Características del decaimiento del $^{24}_{11}\text{Na}$ **Reacción** $^{31}_{15}\text{P}(n, a)^{28}_{13}\text{Al}$

El producto de esta reacción, $^{28}_{13}\text{Al}$, ya ha sido estudiado en [Sección 3.1.1](#) y las características de su decaimiento y emisión γ aparecen en [Cuadro 3.3](#) y [Cuadro 3.4](#). Es el mismo producto de la principal reacción para la determinación de la sílice, por lo que podría producir un aparente aumento del contenido en sílice si el contenido de la muestra de fluorita en fósforo fuese elevado o en concentraciones muy bajas de sílice en la muestra de manera que el contenido relativo en fósforo fuese elevado respecto a la sílice. Las muestras ensayadas tienen contenidos en fósforo inferiores a 500 ppm, por lo que no será relevante.

Reacción ${}^{31}_{15}\text{P}(n, p){}^{31}_{14}\text{Si}$

El producto de esta reacción, ${}^{31}_{14}\text{Si}$, no coincide con ninguno de los productos de las reacciones del silicio, por lo que no ocurre el problema mencionado en el apartado anterior. Las características de su decaimiento y emisión γ aparecen en [Cuadro 3.49](#) y [Cuadro 3.50](#). La γ es del orden de la energía del decaimiento del ${}^{29}_{13}\text{Al}$, [Cuadro 3.6](#), por lo que podría ocasionar el mismo problema que en el apartado anterior si la reacción ${}^{29}_{14}\text{Si}(N, P){}^{29}_{13}\text{Al}$ fuese la indicada para la determinación del silicio.

Núcleo padre	$T_{1/2}$	Modo decaimiento	Valor GS-GS Q (keV)	Núcleo hijo
${}^{31}_{14}\text{Si}$	157.3 min	β^-	1490.5	${}^{31}_{15}\text{P}$

Cuadro 3.49: Características del decaimiento del ${}^{31}_{14}\text{Si}$

Energía(keV)	Intensidad(%)
1266.15 keV	0.07

Cuadro 3.50: Energía de la emisión γ del ${}^{31}_{14}\text{Si}$ **3.1.8. Estudio del Magnesio**

En la naturaleza existe bajo la forma de tres isótopos tal como se ve en la [Cuadro 3.51](#).

Isótopo	Abundancia(%)	$T_{1/2}$	Decaimiento
${}^{24}\text{Mg}$	78.7	–	estable
${}^{25}\text{Mg}$	10.13	–	estable
${}^{26}\text{Mg}$	11.17	–	estable

Cuadro 3.51: Isótopos del Magnesio

Reacciones del ${}^{24}\text{Mg}$ con los neutrones

Las reacciones de interés del ${}^{24}\text{Mg}$, por encontrarse en el rango de activación de la fuente Am-Be que tienen una sección eficaz considerable, se dan en el [Cuadro 3.52](#).

Reacción	Energías activación	σ
${}_{12}^{24}\text{Mg}(n, a){}_{10}^{21}\text{Ne}$	7.5 MeV	0.11 barn
${}_{12}^{24}\text{Mg}(n, p){}_{11}^{24}\text{Na}$	5/10 MeV	<0.15 barn

Cuadro 3.52: Reacciones de interés del ${}_{12}^{24}\text{Mg}$ con los neutrones.**Reacción ${}_{12}^{24}\text{Mg}(n, a){}_{10}^{21}\text{Ne}$**

El producto de esta reacción es estable.

Reacción ${}_{12}^{24}\text{Mg}(n, p){}_{11}^{24}\text{Na}$

El producto de esta reacción, ${}_{11}^{24}\text{Na}$, ya se ha visto al estudiar la reacción Reacción ${}_{15}^{31}\text{P}(n, 2a){}_{11}^{24}\text{Na}$ en [Sección 3.1.7](#).

Reacciones del ${}_{12}^{25}\text{Mg}$ con los neutrones

La única reacción de interés del ${}_{12}^{25}\text{Mg}$, por encontrarse en el rango de activación de la fuente Am-Be que tienen una sección eficaz considerable, se da en el [Cuadro 3.53](#). El producto es estable por lo que no ha de tenerse en cuenta.

Reacción	Energías activación	σ
${}_{12}^{25}\text{Mg}(n, a){}_{10}^{22}\text{Ne}$	5/7 MeV	<0.1 barn

Cuadro 3.53: Reacciones de interés del ${}_{12}^{25}\text{Mg}$ con los neutrones.**Reacciones del ${}_{12}^{26}\text{Mg}$ con los neutrones**

La única reacción de interés del ${}_{12}^{26}\text{Mg}$, por encontrarse en el rango de activación de la fuente Am-Be que tienen una sección eficaz considerable, se da en el [Cuadro 3.54](#).

Reacción	Energías activación	σ
${}_{12}^{26}\text{Mg}(n, g){}_{12}^{27}\text{Mg}$	<5 MeV	<0.3 barn

Cuadro 3.54: Reacciones de interés del ${}_{12}^{26}\text{Mg}$ con los neutrones.

El producto de esta reacción, $^{27}_{12}\text{Mg}$, tiene el decaimiento cuyas características se dan en el Cuadro 3.55.

Núcleo padre	$T_{1/2}$	Modo decaimiento	Valor GS-GS Q (keV)	Núcleo hijo
$^{27}_{12}\text{Mg}$	9.458 min	β^-	2610.6	$^{27}_{13}\text{Al}$

Cuadro 3.55: Características del decaimiento del $^{27}_{12}\text{Mg}$

La emisión γ producida durante el decaimiento del $^{27}_{12}\text{Mg}$ tiene las características de la Cuadro 3.56, que no causará interferencias con las emisiones del decaimiento de los productos del silicio.

Energía(keV)	Intensidad(%)
170,686	0,80
843,76	71,8
1014,44	28,0

Cuadro 3.56: Energía de la emisión γ del $^{26}_{12}\text{Mg}$

3.1.9. Estudio del Arsénico

En la naturaleza existe únicamente bajo la forma del isótopo ^{75}As tal como se ve en el Cuadro 3.57.

Isótopo	Abundancia(%)	$T_{1/2}$	Decaimiento
^{75}As	100	–	estable

Cuadro 3.57: Isótopos del Arsénico

Reacciones del ^{75}As con los neutrones

La reacción de interés del ^{75}As , por encontrarse en el rango de activación de la fuente Am-Be que tiene una sección eficaz considerable, se da en el Cuadro 3.58.

El producto de esta reacción, $^{76}_{33}\text{As}$, tiene el decaimiento cuyas características se dan en el Cuadro 3.59. Con las energías de emisión γ que tiene no afectará a la determinación de la sílice.

Reacción	Energías activación	σ
${}^{75}_{33}\text{As}(n, g){}^{76}_{33}\text{As}$	<10 MeV	1E-4/50 barn

Cuadro 3.58: Reacciones de interés del ${}^{75}_{33}\text{As}$ con los neutrones.

Núcleo padre	$T_{1/2}$	Modo decaimiento	Valor GS-GS Q (keV)	Núcleo hijo
${}^{76}_{33}\text{As}$	26.24 h	β^-	2962.0	${}^{76}_{34}\text{Se}$

Cuadro 3.59: Características del decaimiento del ${}^{76}_{33}\text{As}$

Energía(keV)	Intensidad(%)
170,686	0,80
843,76	71,8
1014,44	28,0

Cuadro 3.60: Energía de la emisión γ del ${}^{76}_{33}\text{As}$

3.1.10. Estudio del Mercurio

En la naturaleza existe bajo la forma de varios isótopos tal como se ve en el [Cuadro 3.61](#).

Isótopo	Abundancia(%)	$T_{1/2}$	Decaimiento
${}^{196}\text{Hg}$	0.146	–	estable
${}^{198}\text{Hg}$	10.02	–	estable
${}^{199}\text{Hg}$	16.4	–	estable
${}^{200}\text{Hg}$	23.13	–	estable
${}^{201}\text{Hg}$	13.2	–	estable
${}^{202}\text{Hg}$	29.8	–	estable
${}^{204}\text{Hg}$	6.85	–	estable

Cuadro 3.61: Isótopos del Mercurio

Por sección eficaz y rango de energías solamente los isótopos ${}^{198}\text{Hg}$ y ${}^{204}\text{Hg}$ tienen reacciones que se puedan producir en el rango de energías de la fuente de Am-Be.

Reacciones del ^{198}Hg con los neutrones

La reacción de interés del ^{198}Hg , por encontrarse en el rango de activación de la fuente Am-Be que tiene una sección eficaz considerable, se da en el [Cuadro 3.58](#).

Reacción	Energías activación	σ
$^{198}_{80}\text{Hg}(n, g)^{199}_{80}\text{Hg}$	<4.5 MeV	0.15 barn

Cuadro 3.62: Reacciones de interés del $^{198}_{80}\text{Hg}$ con los neutrones.

El producto de esta reacción, $^{199}_{80}\text{deHg}$, tiene el decaimiento cuyas características se dan en el [Cuadro 3.63](#). La emisión γ producida durante su decaimiento tiene las características el [Cuadro 3.64](#), que no causará interferencias con las emisiones del decaimiento de los productos del silicio.

Núcleo padre	$T_{1/2}$	Modo decaimiento	Valor GS-GS Q (keV)	Núcleo hijo
$^{199}_{80}\text{Hg}$	42.67 min	<i>IT</i>	2962.0	$^{199}_{80}\text{Hg}$

Cuadro 3.63: Características del decaimiento del $^{199}_{80}\text{Hg}$

Energía(keV)	Intensidad(%)
118,6	1,22E-5
158,3	52,3
255,2	0,0013
374,1	13,8
413,4	0,0272

Cuadro 3.64: Energía de la emisión γ del $^{199}_{80}\text{Hg}$

Reacciones del ^{204}Hg con los neutrones

La reacción de interés del ^{204}Hg , por encontrarse en el rango de activación de la fuente Am-Be que tiene una sección eficaz considerable, se da en el [Cuadro 3.65](#). No afectará a las emisiones γ de los productos del silicio.

El producto de esta reacción, $^{203}_{80}\text{Hg}$, tiene el decaimiento cuyas características se dan en el [Cuadro 3.66](#).

Reacción	Energías activación	σ
${}_{80}^{204}\text{Hg}(n, 2n){}_{80}^{203}\text{Hg}$	>7 MeV	<0.5 barn

Cuadro 3.65: Reacciones de interés del ${}_{80}^{204}\text{Hg}$ con los neutrones.

Núcleo padre	$T_{1/2}$	Modo decaimiento	Valor GS-GS Q (keV)	Núcleo hijo
${}_{80}^{203}\text{Hg}$	46.594 d	β^-	492.1	${}_{81}^{203}\text{Tl}$

Cuadro 3.66: Características del decaimiento del ${}_{80}^{203}\text{Hg}$

3.1.11. Estudio del Oxígeno

Los isótopos del Oxígeno presentes en la naturaleza figuran en el [Cuadro 3.67](#).

Isótopo	Abundancia(%)	$T_{1/2}$	Decaimiento
${}^{16}\text{O}$	99.759	–	estable
${}^{17}\text{O}$	0.037	–	estable
${}^{18}\text{O}$	0.204	–	estable

Cuadro 3.67: Isótopos del Oxígeno

El único isótopo relevante es el ${}^{16}\text{O}$ y única reacción que puede tener interés, por rango de energías y sección eficaz figura en el [Cuadro 3.68](#), pero el producto ${}^{13}\text{C}$ es estable y no causará interferencias.

Reacción	Energías activación	σ
${}_{8}^{16}(n, a){}_6^{13}\text{C}$	>3 MeV	<0.2 barn

Cuadro 3.68: Reacciones de interés del ${}_{16}^{32}\text{S}$ con los neutrones.

3.1.12. Estudio del Hidrógeno

Los isótopos del hidrógeno presentes en la naturaleza figuran en el [Cuadro 3.69](#).

Ninguno de los isótopos del hidrógeno presenta ninguna reacción con una sección eficaz significativa con los neutrones procedentes de una fuente de Americio-Berilio.

Isótopo	Abundancia(%)	$T_{1/2}$	Decaimiento
1H	99.984	–	estable
2H	0.0156	–	estable

Cuadro 3.69: Isótopos del Hidrógeno

3.1.13. Conclusiones sobre las reacciones de los elementos presentes en las muestras de fluorita con los neutrones

Con el fin de analizar las emisiones teóricas tras la irradiación con neutrones provenientes de una fuente de Americio-Berilio, en un análisis del tipo DGNAA, (es decir, con lecturas de la radiación gamma emitida posteriormente a la activación), se ha realizado el siguiente plan de estudio:

Se han distinguido los distintos elementos que se pueden encontrar en la muestra. De ellos se han resaltado 12 elementos.

Se han analizado las reacciones de los elementos con los neutrones, y se ha estudiado el decaimiento de productos de estas reacciones. Hay 39 posibles tipos de reacciones para cada elemento, por lo que se han estudiado 468 posibles reacciones. De estas no todas son viables por lo que se han seleccionado y analizado aquéllas con sección eficaz suficiente para una energía entre 3 y 10 MeV, que son los característicos de una fuente de Americio-Berilio.

De esta fase se han identificado y analizado el decaimiento de 29 productos radiactivos que se originan en las reacciones, y de ellos se ha extraído información acerca de la energía de rayos γ causados en su decaimiento y el tiempo de decaimiento, seleccionando las reacciones del Cuadro 3.70 como aquéllas con posibles interferencias en la detección del silicio.

De este proceso minucioso, se extraen las siguientes conclusiones:

- En el rango de energías de los productos de decaimiento, destaca, por su elevado valor, la energía de 1778.85 keV de los rayos gamma originados en el decaimiento del $^{28}_{13}Al$, con una vida media de 2.2414 minutos.
- Con vidas medias 3 y 4 veces mayores están los decaimientos de $^{29}_{13}Al$ y $^{27}_{12}Mg$ y energías menores.
- El decaimiento de las reacciones del flúor cuyos rangos de emisión de energía son próximos a los de los productos de reacciones del silicio no afectarán por no estar bastante cerca sus energías si tomamos un intervalo de determinación estrecho y por ser sus vidas medias cortas comparadas con la del $^{28}_{13}Al$, por lo

que se producirán principalmente durante la irradiación y no durante la lectura de radiación diferida.

- El $^{56}_{26}\text{Fe}$ tiene una reacción próxima en energía de emisión γ con la del $^{28}_{13}\text{Al}$, pero la diferencia entre ellas de unos 32 keV y una intensidad de 27.2% hace que no afecte para la detección de la sílice.
- Ocurre lo mismo que en el punto anterior con el Manganeseo pero además la diferencia de energías es mayor.
- El fósforo tiene una reacción cuyo producto, $^{28}_{13}\text{Al}$, es el mismo que uno de los de las reacciones del silicio. Por tanto, el fósforo puede afectar en que el resultado obtenido de silicio parezca mayor de 1 que en realidad es si la presencia de fósforo es significativa, sobre todo con leyes bajas de silicio.

Con una vida media de los productos de las reacciones neutrónicas del silicio del orden de minutos, la medida de la radiación γ diferida parece adecuada, siempre que el tiempo entre la activación y la lectura no sea largo. La presencia de fósforo puede hacer que se determine un contenido de silicio mayor del real por tener un mismo producto de la reacción. No es el caso en el mineral de fluorita del que proceden las muestras cuyo contenido en fósforo es del orden de 300-500 ppm, lo que hace que su presencia sea irrelevante.

Reacción	$T_{1/2}$ producto de la reacción	Energía(keV)	Intensidad(%)
${}^{28}_{14}\text{Si}(N, P){}^{28}_{13}\text{Al}$	2.2414 min	1778.85	100
${}^{28}_{14}\text{Si}(N, P){}^{29}_{13}\text{Al}$	6.56 min	1273.368	90.6
${}^{30}_{14}\text{Si}(N, A){}^{27}_{12}\text{Mg}$	9.458 min	843.76	71.8
${}^{19}_9\text{F}(N, p){}^{19}_8\text{O}$	26.88 s	1356.843	50.4
${}^{19}_9\text{F}(n, G){}^{20}_9\text{F}$	11.163 s	1633.602	99.1
${}^{56}_{26}\text{Fe}(n, p){}^{56}_{25}\text{Mn}$	2.5789 h	846.754	98.9
${}^{31}_{15}\text{P}(n, a){}^{28}_{13}\text{Al}$	2.2414 min	1778.85	100
${}^{24}_{12}\text{Mg}(n, p){}^{24}_{11}\text{Na}$	14.9590 h	1368.33	100

Cuadro 3.70: Reacciones con posibles interferencias en la detección del Silicio

3.2. Metodología de los experimentos

El equipo e instrumentación es el empleado en otras tesis y consta básicamente de fuente de neutrones, detector de radiación gamma sistema automático de desplazamiento de las muestras, etc.

La diferencia entre la instrumentación y los equipos empleados respecto al anterior es el sistema de registro de los espectros. Mientras en casos anteriores se registraba el espectro acumulado al final de la activación cíclica, en este caso se tiene que registrar el espectro después de cada ciclo de activación. Esto supone una modificación en el programa que tendrá que hacerse incluyendo un nombre de manera automática al registrar el espectro acumulado al final de cada ciclo.

3.3. Comentario respecto al tratamiento de espectros

Los métodos de tratamiento de los datos de espectros utilizados en tesis anteriores mediante hojas de cálculo no son adecuados cuando se pretende analizar un gran número de espectros.

Se utilizará software libre de tratamiento estadístico de datos con un lenguaje de programación propio, *R*.

Inicialmente se investigó si había algún paquete ya desarrollado que nos permitiese los análisis deseados de los datos con correcciones de fondo individuales para cada ciclo y determinación de zonas de intervalos cuyas áreas fuesen adecuadas para el cálculo de leyes de elementos en las muestras.

Se encontraron dos paquetes de *R*, *prospectr*, y *baseline* desarrollados para tratamiento de espectros:

- *Prospectr* [109]: adaptado a espectrografía infrarroja y el procesado y análisis de sus datos. Utiliza, para la corrección del fondo, un fondo medio único resultante de la toma de muchos espectros y no uno adaptado a cada toma. Por otra parte se aplica a espectros de longitudes de onda.
- *Baseline* [71]: colección de algoritmos para corrección del fondo mediante los cuáles estima el fondo de los espectros. No es nuestro propósito pues el fondo lo hemos medido por separado de los espectros.

Ninguno de los paquetes sirve a nuestro propósito y será necesario desarrollar algoritmos con *R* que sirvan a nuestros objetivos.

3.4. Metodología para la gestión y análisis de espectros

Para tratar un elevado número de ficheros será necesario desarrollar un tratamiento y análisis diferente al utilizado en tesis anteriores que resumimos a continuación y que se desarrollará a partir de [Sección 5.1](#).

1. Desarrollo de un método de división del espectro en un número determinado i de intervalos iguales, [Sección 5.5.2](#).
2. Cálculo de los intervalos anteriores con desplazamiento, *offset*, de medio intervalo para tener intervalos del mismo tamaño que abarquen las zonas de división de los primeros intervalos. Habrá, en el caso de intervalos con *offset*, $i + 1$ intervalos, de los cuales los dos extremos tendrán la mitad del tamaño de un intervalo originario y los $i - 1$ centrales restantes serán del mismo tamaño, [Sección 5.5.2](#).

3. Cálculo de parámetros, es decir, la suma de cuentas de los canales de cada intervalo, [Sección 5.5.2](#).
4. Correlación de los parámetros con el análisis químico del elemento a analizar, [Código 5.41](#). En nuestro caso sílice o flúor. Como método de correlación se utilizará R^2 pues, en tesis anteriores, se vio que la correlación de flúor y parámetro determinado por suma de cuentas de un intervalo adecuado, era lineal.
5. Aplicación del método al espectro desde un intervalo único, $n = 1$, es decir, cuentas totales del espectro, hasta un número de intervalos, n , de tamaño menor, [Código 5.42](#). El método permitirá fijar el número de intervalos a dividir, por lo que podría no empezarse con el espectro entero que, en principio, no tiene sentido que correlacione bien pero que, en esta tesis, comprobaremos si lo hace.
6. Determinación del intervalo del espectro, para cada número de divisiones, que mejor correlaciona, R_{max}^2 , con el análisis químico, [Sección 5.6](#).
7. Determinación del tamaño de intervalo, dentro de los del punto anterior, que tiene R_{max}^2 . Suponemos que la disminución de tamaño del intervalo acota de manera más precisa la zona óptima y, por tanto, debería haber una convergencia hacia ese intervalo, [Sección 5.6](#).
8. Para el intervalo óptimo anterior, se calcularán los parámetros y correlaciones de espectros unitarios y no acumulados para comprobar que su evolución con el aumento del número de ciclos sigue la pauta del desarrollo matemático de las curvas de activación y decaimiento, [Sección 5.7](#).
9. Determinación de la precisión del método y del número de ciclos adecuado para la determinación del contenido del elemento a analizar, [Sección 5.8](#).

La gestión del elevado número de ficheros a analizar se tiene que plantear de una forma automática. En casos anteriores el número de archivos era suficientemente pequeño como para permitir la manipulación manual. En este caso, dado el número de muestras que se analizarán, los distintos tipos de detectores que se van a utilizar y el elevado número de ciclos de activación a los que se va a someter cada muestra, es previsible que el número de archivos sea muy elevado, por lo que se plantea un método automatizado para tratar y analizar dichos espectros.

Capítulo 4

Desarrollo experimental

El proceso seguido con el fin de lograr los objetivos explicitados en [Capítulo 1](#) supuso:

- La activación de la muestra en un dispositivo que permite desplazar de manera motorizada las muestras de forma fiable, segura y con control de los tiempos de activación , desplazamiento y lectura [Subsección 4.1.1](#).
- La captura del espectro correspondiente a cada ciclo de activación mediante el programa *Gamma Adquisiton & Analysis* de *Genie2000*, y su posterior archivado con un nombre codificado.
- Repetición de la activación y del nuevo registro del espectro hasta finalizar el proceso.
- Como el experimento realizado implica la ejecución varios ciclos, por cada ciclo se obtiene un espectro. El almacenamiento es sencillo, puesto que nada más que se ejecuta el primer ciclo se le asigna un nombre y, una vez hecho esto, los siguientes ciclos son almacenados de forma automática, asignando por defecto el nombre dado y a continuación el número de ciclo que se está ejecutando.
- Estos espectros se guaron en archivos con la extensión (.IEC), formato particular que fue necesario tratar para obtener la información a estudiar.
- Sistematización de un método que permitió tratar y estudiar el elevado número de ficheros obtenido de manera que los archivos no *pesasen* demasiado e hiciesen que su tratamiento fuese largo en tiempo de procesamiento digital [Sección 5.1](#).
- Análisis de los resultados experimentales y comparación con el desarrollo teórico realizado en [Sección 5.7](#).

- Conclusiones [Capítulo 6](#)

4.1. Equipos e instrumentación empleados

4.1.1. Dispositivo empleado

Se empleó un equipo de desplazamiento, [Figura 4.1](#), que permitía automatizar la traslación de la muestra y el tiempo de exposición frente a la fuente y frente al detector, capturando los espectros y tiempos de lectura correspondientes a cada activación mediante el programa *Gamma Adquisiton & Analysis*.

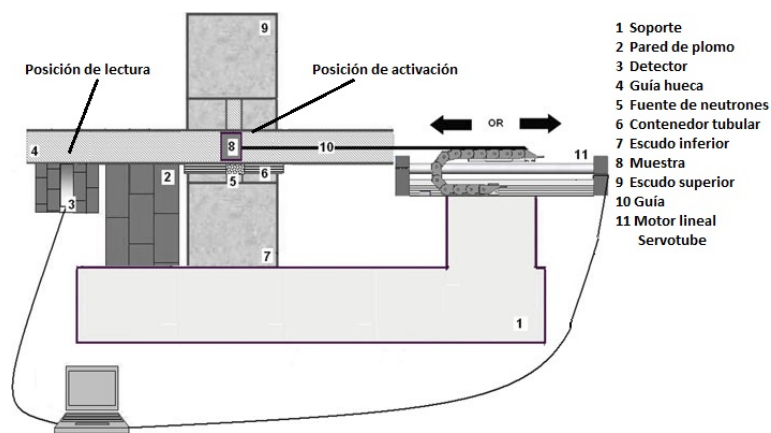


Figura 4.1: Equipo de desplazamiento

El desplazamiento repetitivo de las muestras entre las posiciones de activación y lectura, [Figura 4.2](#), supuso incorporar en el prototipo un medio para su desplazamiento rectilíneo de forma rápida y fiable. Se consiguió incorporando un **motor lineal** Servotube formado por:

- Dos soportes situados uno en cada extremo, que se encargan de delimitar la carrera del motor.
- Una cadena de arrastre.
- Frenos de seguridad situados a cada lado de la barra imantada.
- Una guía o barra imantada tubular.
- Un módulo móvil que rodea totalmente a la guía imantada.

En el interior de la guía del portamuestras siempre hubo un recipiente portamuestras con la muestra de fluorita en su interior y, un segundo recipiente portamuestras relleno de plomo para evitar la salida de la radiación gamma a través de la sección circular del tubo guía.

La distancia entre la fuente y el detector fue de 450 mm.

La presencia de paredes de plomo en posiciones estratégicas entre el detector y la fuente de neutrones puede llegar a reducir la cantidad de rayos gamma que llegan al detector. La experiencia obtenida con la disposición de los ladrillos de plomo en el prototipo manual anterior sirvió para mejorar el prototipo automático, de modo que se aumentó la pared de plomo alrededor del detector y la pared entre el detector y la fuente.

La posición del detector respecto a la muestra en el prototipo es fundamental, si se quiere garantizar que toda la radiación que le llega, procede única y exclusivamente de la muestra previamente activada.

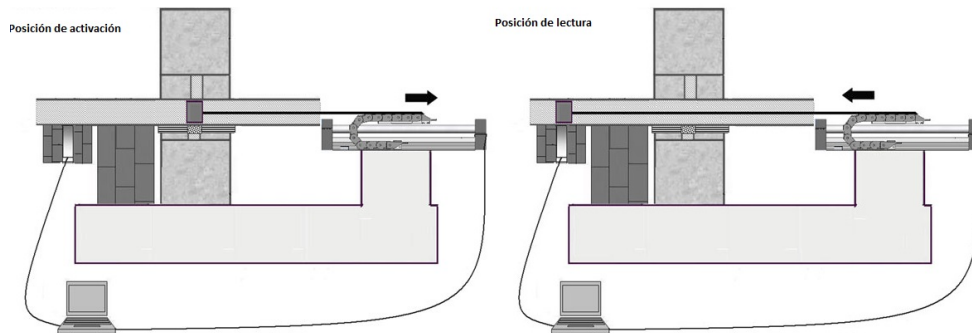


Figura 4.2:

4.1.2. Fuente de neutrones

La fuente de neutrones empleada fue la misma que en los experimentos previos para la tesis del Dr. Rey Ronco. Esta fuente estaba formada por una aleación de dos metales, Americio 241 y Berilio 9, montada en una doble cápsula cilíndrica de acero inoxidable de 35 mm de longitud por 30 mm de diámetro. Su contenido en Americio era de 0.309 g y tenía una actividad de 1 Ci con una emisión de $3,7 \cdot 10^{10}$ neutrones por segundo.

4.1.3. Detectores

Se emplearon, además del detector BGO utilizado en [23], dos detectores de radiación y del tipo NaI. Para realizar los análisis con el prototipo automático, se utilizaron

detectores de:

- NaI(Tl) 2" de diámetro y 2" de longitud.
- NaI(Tl) 3" de diámetro y 3" de longitud.
- BGO de 2" de diámetro y 2" de longitud.

4.1.4. Equipo multicanal

Multicanales (MCA). Para poder digitalizar la señal registrada por el cristal del detector fue necesario disponer de un analizador multicanal (MCA) Osprey. La señal procedente del detector se digitalizó por medio de una conexión USB incluida en el propio multicanal y el Software Genie 2000, que incluía el programa Gamma Acquisition & Analysis empleado para el procesamiento de los espectros de radiación gamma.

4.1.5. Calibración

Para la calibración de los detectores se utilizaron dos fuentes radiactivas:

- Una fuente de Cesio 137 (Cs137) que emite radiación gamma de una energía de 661.65 keV,
- Una fuente de Cobalto 60 (Co60) que emite radiación en 1173.22keV y en 1332.49keV

4.2. Proceso experimental

El procedimiento empleado para la obtención de los espectros con el prototipo automático descrito fue el siguiente:

1. Colocación de la muestra en el portamuestras.
2. El motor lineal desplaza la muestra hasta la posición de irradiación.
3. Irradiación de la muestra durante el tiempo de activación.
4. Desplazamiento de la muestra frente al detector.
5. Lectura del espectro de la muestra irradiada durante el tiempo de lectura.
6. Registro y almacenamiento de archivos en formato IEC.

4.2.1. Modificación del programa de captación de espectros y manipulación del motor lineal

Se necesitan dos programas para el control de los equipos, es decir, uno para controlar el movimiento del motor y otro para registrar los espectros radiactivos. Tener que manejar dos programas, no resulta práctico. Como solución se desarrolló un programa con Microsoft Visual Studio, Compax 3, capaz de ejecutar simultáneamente los programas C3ServoManager2 SingleMode y Gamma Gamma Acquisition & Analysis capaz de registrar el espectro acumulado al final de todos los ciclos para la tesis de la Dra. Castro, [Subsección 2.5.2](#).

El programa Compax 3 ejecuta cada uno de estos dos programas en el momento indicado manteniendo el otro en modo pausa para evitar la lectura de cuentas procedentes del fondo, en el detector, durante el desplazamiento del motor. En él se introducen los datos de posición de la fuente, tipo de detector y multicanal, tiempo de proceso y tiempo de desplazamiento del motor.

Fue necesario modificar este programa respecto al anterior para registrar individualmente los espectros acumulados después de cada ciclo asignando un nombre predefinido a cada archivo. El código figura en [Apéndice A](#). Se modificaron las funciones *SaveData (LPVOID parametro)*, líneas 776–844 y *SendInfo (LPVOID parametro)*, líneas 846–1080.

4.2.2. Experimentos

El equipo de desplazamiento descrito permitió la realización de varios ciclos iguales de activación, desplazamiento y lectura, permitiendo controlar los tiempos en milisegundos.

La selección del tiempo de irradiación de 12 s se debió a que en la tesis de la Dra. Castro [23], resumida en la [Subsección 2.5.2](#), se encontró que el tiempo idóneo de activación era del orden de 12 s independientemente del tiempo de proceso y del número de ciclos óptimo para el tiempo de proceso. Se consideró que 145 ciclos era un número bastante elevado que no se había hecho anteriormente.

Hemos de analizar dos elementos, sílice y flúor. Las vidas medias de los productos de las reacciones ${}_{14}^{28}\text{Si}(N, P){}_{13}^{28}\text{Al}$, 2.414 minutos, y ${}_{9}^{19}\text{F}(n, a){}_{7}^{16}\text{N}$, 7.13 segundos, suponen frente a tiempos de irradiación y lectura de 12 segundos un 1200% y 58%, lo que tiene su importancia respecto a la acumulación cíclica de espectros, como se verá en [Subsección 5.7.3](#).

Los registros de los espectros se realizaron acumuladamente al final de cada ciclo mientras que en [Subsección 2.5.2](#) se registraba únicamente el acumulado al final de todos los ciclos. Esto hace que el número de ficheros a tratar, 11745, haya sido muy elevado.

Se procederá ahora a describir los experimentos hechos con el dispositivo empleado y descrito en [Subsección 4.1.1](#).

Se dispuso de 8 muestras de fluorita de 350 gramos con diversas concentraciones, obtenidas en distintos pasos del proceso de concentración en un lavadero de fluorita. Identificaremos cada muestra con dos dígitos y consideraremos otra muestra más, correspondiente al fondo, que fue identificada como 00, es decir, como concentración 0%. Así, las muestras fueron las indicadas en el [Cuadro 4.1](#).

muestras	leyes	CaF_2	SiO_2
1	00	0,00	0,00
2	02	2,28	75,42
3	11	11,39	38,23
4	27	27,05	55,17
5	42	42,05	36,88
6	60	59,92	25,26
7	76	76,50	14,06
8	91	90,98	5,04
9	98	97,60	0,92

Cuadro 4.1: Muestras activación neutrónica

Estas muestras fueron sometidas a activación neutrónica 3 veces, es decir, cada experimento tuvo 3 ensayos o réplicas, *A*, *B* y *C* hechas con el tiempo suficiente entre ellas como para que no hubiese influencia de la activación anterior. Para cada ensayo de 145 ciclos con cada muestra se registraron los espectros en 1025 canales.

Detectores	:	BGO, NaI2x2 y NaI3x3
Réplicas	:	A, B y C.
Ciclos	:	001 – 145
Multicanal	:	Osprey
Tiempo de desplazamiento (ms)	:	325
Tiempo de lectura (ms)	:	12000
Tiempo de activación (ms)	:	12000

Cuadro 4.2: Datos de proceso

Los datos de proceso de los experimentos realizados con los tres detectores, 9 muestras de leyes y tres réplicas de cada experimento simétrico en tiempos de activación y lectura figuran en [Cuadro 4.2](#).

Por tanto, se hicieron 9 muestras x 3 réplicas x 145 ciclos = 3915 ensayos con cada detector y un total de 11 745 ensayos. Cada ensayo supuso el registro de las cuentas obtenidas en cada uno de los 1 025 canales, por lo que la base de datos albergó 12 038 625 de datos.

Los tiempos de proceso para cada número de ciclos se reflejan en el [Cuadro 4.3](#).

ciclos (num)	t (min)	ciclos (num)	t (min)	ciclos (num)	t (min)	ciclos (num)	t (min)	ciclos (num)	t (min)	ciclos (num)	t (min)
1	0,41	25	10,27	49	20,13	73	29,99	97	39,85	121	49,71
2	0,82	26	10,68	50	20,54	74	30,40	98	40,26	122	50,12
3	1,23	27	11,09	51	20,95	75	30,81	99	40,67	123	50,53
4	1,64	28	11,50	52	21,36	76	31,22	100	41,08	124	50,94
5	2,05	29	11,91	53	21,77	77	31,63	101	41,49	125	51,35
6	2,47	30	12,33	54	22,19	78	32,05	102	41,91	126	51,77
7	2,88	31	12,74	55	22,60	79	32,46	103	42,32	127	52,18
8	3,29	32	13,15	56	23,01	80	32,87	104	42,73	128	52,59
9	3,70	33	13,56	57	23,42	81	33,28	105	43,14	129	53,00
10	4,11	34	13,97	58	23,83	82	33,69	106	43,55	130	53,41
11	4,52	35	14,38	59	24,24	83	34,10	107	43,96	131	53,82
12	4,93	36	14,79	60	24,65	84	34,51	108	44,37	132	54,23
13	5,34	37	15,20	61	25,06	85	34,92	109	44,78	133	54,64
14	5,75	38	15,61	62	25,47	86	35,33	110	45,19	134	55,05
15	6,16	39	16,02	63	25,88	87	35,74	111	45,60	135	55,46
16	6,57	40	16,43	64	26,29	88	36,15	112	46,01	136	55,87
17	6,98	41	16,84	65	26,70	89	36,56	113	46,42	137	56,28
18	7,40	42	17,26	66	27,12	90	36,98	114	46,84	138	56,70
19	7,81	43	17,67	67	27,53	91	37,39	115	47,25	139	57,11
20	8,22	44	18,08	68	27,94	92	37,80	116	47,66	140	57,52
21	8,63	45	18,49	69	28,35	93	38,21	117	48,07	141	57,93
22	9,04	46	18,90	70	28,76	94	38,62	118	48,48	142	58,34
23	9,45	47	19,31	71	29,17	95	39,03	119	48,89	143	58,75
24	9,86	48	19,72	72	29,58	96	39,44	120	49,30	144	59,16
										145	59,57

Cuadro 4.3: Tiempos de proceso para los distintos ciclos.

Capítulo 5

Gestión y análisis de los espectros obtenidos

5.1. Gestión de ficheros de espectros

Se describirá, paso a paso, el sistema de tratamiento informático con R de los espectros de manera que, cualquier persona con los conocimientos técnicos, podría repetir los resultados a partir de los ficheros originales. Su comprensión permite aplicar el sistema a cualquier número de experimentos con varios detectores, ciclos, réplicas y número de canales de registro obtenidos, bien por activación neutrónica, bien por otros métodos de análisis que produzcan datos digitales por canales.

Se dice que el 80 % del análisis de datos se emplea en su limpieza y preparación [34], menos del 5 % del esfuerzo se dedica a su análisis y el resto del tiempo a escribir sobre lo hecho [1]. Se han podido comprobar estas aseveraciones.

Los datos correspondientes a la activación neutrónica para cada número de ciclos se han guardado en un archivo en formato IEC.

Se codificará el nombre de cada archivo de modo que sea fácil reconocer a qué ensayo pertenecen. Una correcta codificación es, por otra parte, imprescindible para su tratamiento informático, incluso para algo tan sencillo como que los archivos aparezcan correctamente listados; así, para hacerlo consecutivamente, el número de ciclos se da con 3 dígitos. Cualquier discrepancia con el criterio establecido puede dar lugar a errores en el tratamiento informático.

Los archivos correspondientes a los ensayos con cada detector se han guardado en una carpeta específica: *BGO*, *NaI2x2* y *NaI3x3*.

Dentro de cada carpeta, correspondiente a cada ensayo, hay otra subcarpeta para las activaciones correspondientes a cada réplica con cada muestra, con la codificación *ley_replica_detector*. Por ejemplo, la carpeta correspondiente a la réplica A del fondo, 00 en el detector *BGO* tendrá el nombre *00_A_BGO*.

La codificación utilizada para nombrar los archivos de cada espectro dentro de cada una de las carpetas *ley_replica_detector* fue *ley_ciclo_replica_detector*. Así, dentro de la carpeta *00_A_BGO* anterior, el espectro correspondiente al ciclo 10 es *00_010_A_BGO*.

Como es fácil cometer errores al nombrar los archivos, o decidir, una vez nombrados con un criterio, cambiar a otro o, como es el caso, si inicialmente no se habían nombrado con un criterio consistente, se ha utilizado el programa *Renamer.exe*, que se puede obtener en www.den4b.com, para renombrar todos los archivos con el criterio expuesto.

Como hemos dicho anteriormente, el programa de adquisición de espectros usado y denominado *Gamma Acquisition & Analysis* de *Genie2000*, proporciona los datos registrados en unos ficheros con extensión (.IEC). Estos ficheros tal y como son obtenidos, proporcionan los datos de tal manera que es complicado su manipulación con un programa distinto.

En tesis anteriores se utilizó el método descrito, [Sección 2.5.2](#), pasando a una hoja de cálculo excel los datos correspondientes a los 145 ciclos hechos en cada ensayo (detector, muestra, réplica) de una manera manual. Este modo de proceder es sumamente laborioso y, el agrupamiento en 81 hojas distintas (3 detectores x 9 muestras x 3 réplicas), no permite tratar los datos conjuntamente. Cada hoja de cálculo es muy pesada, del orden de 20 MB y, por tanto, los cálculos son lentos. Además, el proceso de selección con 1025 filas y 145 columnas, es engorroso y los cálculos son difíciles de automatizar.

Por los inconvenientes anteriores, se toma la decisión de emplear el programa estadístico de software libre *R*, versión 3.0.1, Copyright 2013 *The R Foundation for Statistical Computing*. Este programa permite tratar estadísticamente bases de datos en texto simple, muchísimo menos pesadas que en formato excel, de forma ágil y obtener gráficas. El tratamiento se puede automatizar al ser *R* también un lenguaje de programación especial para estas funciones. Por otro lado, los bucles prácticamente se pueden evitar al tener librerías que permiten actuar sobre conjuntos de datos.

Hay que importar los datos desde los ficheros IEC a bases de datos de *R*. Se prepara un pequeño programa que extraerá los datos que interesen y se les dará el formato deseado. Se transcribe éste con sus comentarios explicativos, suficientes para entender su funcionamiento, que se complementará cuando sea necesario.

El programa se inicia con los comentarios sobre la naturaleza de los ficheros originados durante los experimentos. Cada uno de los ficheros recogerá el espectro con fondo, acumulado hasta el ciclo a que corresponde.

Se comienza con la organización de ficheros y carpetas correspondientes a los ensayos con cada detector, [Código 5.1](#).

Código 5.1: Estructura ficheros IEC

```
# 1 - Los ficheros originales, *.IEC, son organizados
# en carpetas por detector.
# Cada una de estas carpetas contiene subcarpetas
# con los 145 archivos correspondientes a los
# ensayos por muestra (ley) y replica. Su
# denominación sigue el criterio LRD: 2 dígitos
# para la ley, 1 dígito para la réplica y nombre
# del detector Los archivos de estas carpetas
# siguen un criterio similar, LCRD, donde C se
# refiere a 3 dígitos para el número de ciclo.
# Las carpetas con archivos repetidos y que no
# contienen todos los ciclos se eliminan.
# Quedan en total 11975 archivos. 3915 por cada
# detector.
# Para asegurar la consistencia de los nombres,
# se renombraron con el programa 'Renamer',
# que puede obtenerse en
# 'http://www.den4b.com/wiki/ReNamer' .
```

Es necesario importar los espectros a un formato de base de datos que sea fácil de utilizar con R, [Código 5.2](#).

Código 5.2: Importación de variables.

```
# 2 - Importación de variables.
# Para obtener los datos de los espectros, debemos
# importarlos desde los ficheros *.IEC.
# Los 11975 ficheros IEC tienen un tamaño de 194MB
# y ocupan 229 MB en disco.
# Tras su importación con R, la base de datos se ha
# reducido considerablemente hasta 10.8 MB.

# Para importar las lecturas de los 1025 canales
# de los ficheros IEC crearemos una función
# 'get.data()'.
# La utilizaremos estableciendo el directorio de
# trabajo sucesivamente en cada carpeta con los
# ficheros de los ensayos de cada detector para
# importar los datos respectivos. No se crea
# ningún objeto adicional de R ya que todos los
# objetos creados dentro de la función pertenecen
# únicamente a ese entorno y se destruyen al
```

```

# salir de la función cuando se transfieren los
# datos a cada objeto dataframe de R con los
# datos de los ensayos por cada detector --BGO,
# NaI2x2 y NaI3x3.

# Es necesario despreciar las primeras 58 filas
# del fichero *.iee, skip = 58, con información
# adicional, pues las cuentas comienzan en la
# fila 59.
# A partir de la fila 59 habrá 7 columnas, la
# primera con un texto comodín, la segunda con
# un identificador del número de canal de la
# lectura indicada en la columna 3, que variará
# de 5 en 5 unidades, y 5 columnas más, 3ª a 7ª,
# con lecturas de canales.
# Por tanto, deberemos pasar a cada variable las
# lecturas de las 5 últimas columnas de las
# filas 59 a 263, reordenados en una única y por
# orden creciente de canal. Se desprecian las
# 2 primeras columnas con 'espectro[ , -(1:2)]'.
#
# espectro <- data.matrix(t(espectro))
#
# transpone la matriz de las 263 filas y 5
# columnas de lecturas, dim(263 x 5), en una de
# dim(5 x 263), y ncol = 1 hace que estén en
# una única columna. Estas variables se
# incorporarán sucesivamente a una dataframe
# 'data' cuyas columnas se renombrarán con los
# nombres de los ficheros.

```

La función `get.data(directory)` permite, colocándonos en la carpeta de los ensayos realizados con cada detector, importar los espectros a una base de datos por detector: BGO, NaI2x2 y NaI3x3, [Código 5.3](#).

Código 5.3: `get.data(directory)`

```

library(tools)
# basename para extraer nombre fichero sin extensión

get.data <- function(directory) {
  files_csv <- list.files(all.files = TRUE,
                          full.names = TRUE,

```

```

        recursive = TRUE,
        include.dirs = FALSE,
        no.. = FALSE)

for (i in 1:length(files_csv)) {
    espectro <- read.csv(files_csv[i],
                        header=FALSE,
                        sep="",
                        na.strings="NA",
                        dec=".",
                        skip = 58,
                        strip.white=TRUE)

    espectro <- espectro[ , -(1:2)]
    espectro <- matrix(t(espectro),
                       ncol = 1)
                       # Una columna

    if ( i == 1)
        data <- espectro
    else
        data <- data.frame(data, espectro)
    }
    colnames(data) <- basename(file_path_sans_ext(
        files_csv))

    return(data)
}

```

Situándose, como directorio de trabajo, en cada carpeta o directorio con los ficheros de los ensayos de cada detector, [Código 5.4](#). Podría hacerse directamente para todos los detectores colocándonos en una carpeta que alojase sus carpetas, pero puede haber problemas de memoria.

Código 5.4: BGO - NaI2x2 - NaI3x3

```

#   setwd() en la carpeta donde están los ficheros
#   iec con las lecturas.

#   Para cada base de datos se debe fijar el
#   directorio de trabajo respectivo a la carpeta
#   con sus datos y se crean respectivamente con:

setwd("~/BGO")
BGO <- get.data(getwd())

```

```

setwd("~/NaI2x2")
NaI2x2 <- get.data(getwd())
setwd("~/NaI3x3")
NaI3x3 <- get.data(getwd())

#   Los nombres de las columnas no tienen X delante,
#   sólo L_C_R_D.

#   Se puede hacer una base de datos única con las
#   medidas de todos los detectores estableciendo
#   como fichero de trabajo el que tiene todas las
#   carpetas de las medidas con los distintos
#   detectores.

#   espectro.acum.cf <- get.data(getwd())

```

Se une en una base de datos única, *espectro.acum.cf*, las correspondientes a los 3 detectores utilizados en los experimentos, [Código 5.5](#).

Código 5.5: espectro.acum.cf

```

espectro.acum.cf <- cbind(BGO, NaI2x2, NaI3x3)

#Los nombres de las columnas no tienen X delante,
#   sólo L_C_R_D.
#   Si lo hacemos con cbind() seguirán sin la X
#   delante, cosa que no ocurre si se hace con
#   data.frame()
#   espectro.acum.cf <- data.frame(BGO, NaI2x2, NaI3x3)
#   pone X delante de los nombres

```

El resultado es la base de datos *espectro.acum.cf* con los espectros con fondo acumulados en cada ciclo para los ensayos hechos de cada muestra con cada detector.

Las primeras 5 columnas de las 5 primeras variables se muestran en el [Cuadro 5.1](#).

Los 11 975 ficheros *.iec (hubo 3 carpetas que no se trataron por tener menos de 145 iec y ser repetidas) tienen un tamaño de 194 MB y ocupan en disco de 229 MB, lo que los hace bastante difíciles de tratar informáticamente sin un gran ordenador y requieren tiempos de computación muy largos. La base de datos resultante en R tiene un tamaño aproximado de 10.8 MB.

La base de datos *espectro.acum.cf* tiene 1 025 filas y 11 975 columnas. Cada columna corresponde al espectro, es decir, los datos de las lecturas de cuentas con fondo

00_001_A_BGO	00_002_A_BGO	00_003_A_BGO	00_004_A_BGO	00_005_A_BGO
0	0	0	0	0
0	0	0	0	0
0	4	4	7	11
0	56	111	161	210
0	57	113	169	234

Cuadro 5.1: Base de datos *espectro.acum.cf*

en los 1025 canales, correspondientes a cada ensayo. R considera cada columna como una variable y el nombre de la misma es el del fichero iec correspondiente de acuerdo con el criterio de denominación explicado, lo que nos permite identificar perfectamente cada ensayo.

En un primer momento se pretendía filtrar las variables por su nombre para su tratamiento estadístico por grupos seleccionando aquellos grupos con las mismas características de leyes –L–, ciclo –C–, detector –D– o réplica –R–. Parecía lo adecuado por la experiencia de otros lenguajes de programación. Sin embargo, R no permite fácilmente filtrar por nombres de variables si no es con bucles tradicionales, lo que complica la programación y la hace más farragosa, difícil de seguir y propensa a errores.

Por otro lado, la base de datos parecía la mínima con todos los datos tanto de lecturas o mediciones –filas– como de identificadores, contenidos en los nombres de las columnas–LCRD– sin necesidad de repetir datos de identificación innecesariamente, lo que sobrecargaría la base de datos a tratar.

Sin embargo, los estadísticos, para los que se ha pensado en la construcción de R, prefieren separar las variables medidas, en este caso los espectros o, yendo a la unidad, las lecturas de los canales, de las variables de acceso o identificación.

Así, cada variable medida se identificará con el valor correspondiente para cada una de las variables de identificación LCRD. A continuación plasmamos el código de programa que permite generar las variables de identificación. Aunque posteriormente se generará a partir del nombre de las variables, el código siguiente y sus explicaciones permitirán comprender mejor cuáles son las variables de identificación y el porqué de sus denominaciones. Primero se presentará su confección paso a paso, después se resumirá en una única función mediante la cual las variables intermedias serán temporales y, finalmente, se ofrecerá la función final, más compacta, cuyo funcionamiento será posible entender gracias a las explicaciones del programa fraccionado. La exposición paso a paso se justifica también porque el código puede ser necesario tenerlo a mano si se quiere obtener algún resultado intermedio, cosa que no puede hacerse con las funciones que dan el resultado final deseado en principio.

Las notas explicativas del programa se presentan en [Código 5.6](#).

Código 5.6: Diseño tratamiento de datos.

```

# 3 - Diseño del tratamiento de datos.
# Definiremos 'get.experimentos()' para pasar las
# variables de 'espectro' a una base de datos con
# columnas de identificación de cada ensayo.
# Para entender el fin perseguido lo haremos paso
# a paso primero, luego construiremos la función
# 'get.experimentos.prev()' (3a) y, finalmente,
# (3b) se definirá la función de un modo
# completamente distinto que obtendrá las columnas
# de identificación a partir de los nombres de las
# variables.
# Obtendremos la BD con columnas de identificación
# 'detector' --D--, 'replica --R--, 'leyes' --L--,
# 'ciclo' --C-- y columnas de mediciones 'CaF2',
# 'SiO2' y 'espectro' (total de cada espectro,
# 1025 canales, en una celda por ensayo)

#####

# 3a- Tenemos varias muestras que identificaremos por
# un código (factor):
#
# leyes <- factor(c("00", "02", "11", "27", "42",
#                  "60", "76", "91", "98"))
#
# Este código de identificación nos servirá para
# añadir, posteriormente, los resultados de los
# análisis químicos de $Ca_F$2 y $SiO_2$.
# Con cada muestra haremos 3 ensayos (réplicas):
#
# replica <- c("A", "B", "C")
#
# De cada muestra y ensayo medimos los resultados
# de activaciones neutrónicas desde 1 ciclo hasta
# 145 ciclos, por lo que tendremos otro factor de
# identificación del ciclo al que daremos, para
# que sea fácil ordenarlos, 3 cifras de
# identificación de '001' a '145'.
#
# ciclo <- "001" ... "145"
#
# Habrá que hacer una pequeño script que nos genere

```

```

#   el vector 'ciclo' hasta el número de ciclos
#   deseado introduciendo el relleno de '0' a 3 cifras.
#   Con los 3 códigos de identificación anteriores,
#   LRC abreviadamente, crearemos una tabla con todas
#   las posibles combinaciones:
#
#   9 (L) x 3 (R) x 145 (C) = 3915 ensayos
#
#   Todos los ensayos anteriores se repitieron con 3
#   detectores (D)
#
#   detector <- c("BGO", "NaI2x2", "NaI3x3")
#
#   por lo que introduciendo este nuevo factor, la
#   base de datos tendrá
#
#   3 (D) x 3915 = 11745 ensayos
#
#   El resultado de cada ensayo será un espectro.
#   Vendrá dado por las lecturas de 1025 canales.
#   Crearemos también una pequeña base de datos
#   'muestra', con los contenidos en sílice y flúor
#   de las muestras (variables medidas)
#   y una variable de identificación, 'leyes', común
#   con la base de datos anterior, lo que permitirá
#   unirlos.
#   Al final, la base de datos tendrá 4 columnas
#   con variables identificación --LRCD -- y 3
#   columnas con variables medidas --CaF2, SiO2 y
#   'espectro' --.
#   La variable 'espectro' alojará en cada celda de
#   su respectiva columna un espectro completo. Si
#   queremos, podemos añadir otra columna que nos
#   permita acceder a la base de datos con las
#   lecturas de los 1025 canales separados que
#   utilizamos para rellenar la columna 'espectro'.

```

Primeramente se verán las instrucciones detalladas individualmente.

Comienza definiendo las variables de identificación de los ensayos, *detector* –D–, *replica* –R–, *ciclo* –C– y *leyes* –L–, y su unión con los resultados de los análisis químicos, CaF_2 y SiO_2 de las muestras ensayadas, [Código 5.7](#).

Código 5.7: Plantilla pl.experimentos

```

# Base de datos 'muestras' con los análisis químicos
# como variables medidas y los códigos de leyes como
# variable de identificación.

leyes <- factor(c("00", "02", "11", "27", "42", "60",
                 "76", "91", "98"))

CaF2 <- c(0.00, 2.28, 11.39, 27.05, 42.05, 59.92,
          76.50, 90.98, 97.60)

SiO2 <- c(0.00, 75.42, 38.23, 55.17, 36.88, 25.26,
          14.06, 5.04, 0.92)

muestras <- data.frame(leyes, CaF2, SiO2)

#####
# Variables 'replica' de ensayos, 'ciclo' y
# 'detector'

# La variable 'leyes' ya la creamos antes y la
# usamos para formar la data.frame 'muestras'

replica <- c("A", "B", "C")

# Creación del vector de ciclos con 3 dígitos

num_ciclos <- 145

ciclo <- c()

# Padding nombres_ciclos a 3 dígitos.
# ifelse equivale a (x ? y : z) de C
# sprintf es una instrucción tipo print() de C

#####
for (i in 1: num_ciclos) {
  ciclo <- cbind(ciclo, ifelse(nchar(i) < 3,
                              ifelse(nchar(i) == 1, sprintf("00 %d", i),
                                      sprintf("0 %d", i)), i))
}

detector <- c("BGO", "NaI2x2", "NaI3x3")

```

```
#####
# Creamos una base de datos que nos servirá de
# plantilla para las bases de datos
# 'pl.experimentos' inicialmente expandiendo las
# variables de medida 'leyes', 'ciclo' y 'replica'.
# Posteriormente añadiremos las columnas con el
# tipo de detector y los espectros obtenidos.

pl.experimentos <- expand.grid(ciclo, leyes, replica,
                             detector)

# Como asigna un nombre de variable automática a
# ciclos y leyes, hay que cambiar el nombre

names(pl.experimentos) <- c("ciclo", "leyes",
                           "replica", "detector")

#####
# Podemos ahora añadir los contenidos en CaF2 y SiO2
# de la tabla 'muestras' uniendo las dos con
# join() del paquete plyr.
library(plyr)

pl.experimentos <- join(pl_experimentos, muestras,
                       by = "leyes")
```

Se tiene ahora un corsé o plantilla con la identificación de cada ensayo. Se le une, en cada celda de cada fila correspondiente de una nueva columna *espectro*, [Código 5.8](#), el total del espectro acumulado con fondo que ya se tiene en la base de datos *espectro.acum.cf*.

Código 5.8: unir_df(plantilla, df1, df2, df3)

```
# Tenemos una plantilla con los identificadores de
# todos los ensayos de dim(11745 x 6). Sus 6
# columnas por orden son:
# 1 - 'ciclo'
# 2 - 'leyes'
# 3 - 'replica'
# 4 - 'detector'
# 5 - 'CaF2'
# 6 - 'SiO2'
# Y tenemos 3 bases de datos correspondientes a
```

```

# todos los ensayos con cada detector, cada una de
# dim(1025 x 3915). Cada columna corresponde a un
# espectro.
# Uniremos estas 3 últimas bases de datos por
# columnas creando una única de dim(1025 x 11745).
# La transpondremos y la uniremos en una sola
# columna 7 - 'espectro' que tendrá en cada fila
# el espectro completo de cada ensayo.

#####
# Primero unimos las bases de datos de los ensayos
# con los 3 detectores en una única
# 'espectro.acum.cf'.

espectro.acum.cf <- data.frame(BGO, NaI2x2, NaI3x3)

# Ahora dividimos 'espectro.acum.cf' por columnas y
# asignamos cada una a cada ensayo dado en cada
# fila de 'p.experimentos'.

espectro <- split(as.matrix(espectro.acum.cf),
                  col(espectro.acum.cf))

# Finalmente, unimos las dos:

ensayos <- data.frame(pl.experimentos, I(espectro))

# Podemos eliminar la base de datos 'espectro',
# de 47.1 MB, que ya no es necesaria.
# rm(espectro)

# Lo anterior se puede hacer con una función que
# no generará una base definitiva 'espectro' si
# no temporal, por lo que no sería necesario
# eliminarla.

unir_df <- function(plantilla, df1, df2, df3) {
  espectro <- data.frame(df1, df2, df3)
  espectro <- split(as.matrix(espectro),
                    col(espectro))
  return(data.frame(plantilla,
                    I(espectro)))
}

```

```
unir_df(pl.experimentos, BGO, NaI2x2, NaI3x3)

#   La I() fuerza a que las 1025 columnas del
#   espectro de cada ensayo se metan como un único
#   vector de tipo 'AsIs'.
```

Una única función `get_experimentos_prev(C, L, R, D, quim.1, quim.2)` puede agrupar el código descrito anterior sin guardar bases de datos intermedias que no se necesitarán, [Código 5.9](#).

Código 5.9: `get_experimentos_prev(C, L, R, D, quim.1, quim.2)`

```
#   Los pasos 2 y 3 anteriores se pueden fundir en
#   una función, 'get_experimentos_prev', y su llamada
#   con los argumentos adecuados (ciclo, leyes,
#   replica, detector, CaF2, SiO2).
#   Pero BGO, NaI2x2 y NaI3x3, contenidas dentro de
#   la base de datos 'espectro' tienen que estar
#   creadas y cargadas cuando se las llame.

#   Introducción de datos:

leyes <- factor(c("00", "02", "11", "27", "42", "60",
                 "76", "91", "98"))

CaF2 <- c(0.00, 2.28, 11.39, 27.05, 42.05, 59.92,
          76.50, 90.98, 97.60)

SiO2 <- c(0.00, 75.42, 38.23, 55.17, 36.88, 25.26, 14.06,
          5.04, 0.92)

replica <- LETTERS[1:3]

detector <- c("BGO", "NaI2x2", "NaI3x3")

ciclo <- 145

library(plyr)

get.experimentos.prev <- function (C, L, R, D, quim.1,
                                   quim.2)
{
```

```

Cs <- c()
for (i in 1: C) {
  Cs <- cbind(Cs,
             ifelse(nchar(i) < 3,
                    ifelse(nchar(i) == 1,
                           sprintf("00 %d", i),
                           sprintf("0 %d", i)),
                    i)
             )
}

args <- as.list(match.call())

pl.experimentos <- expand.grid(Cs, L, R, D)
# names(pl.experimentos) <- c("ciclo", "leyes",
# "replica", "detector")
names(pl.experimentos) <- c(args[2], args[3],
                           args[4], args[5])

# args[1] es el nombre de la función:
# get_experimentos. Los argumentos empiezan en 2.

muestras <- data.frame(L, quim.1, quim.2)
# names(muestras) <- c("leyes", "CaF2", "SiO2")
names(muestras) <- c( args[3], args[6], args[7])

pl.experimentos <- join(pl.experimentos, muestras,
                      by = "leyes")

# Search by name for an object (get) or zero or
# more objects (mget).
# Con .GlobalEnv especificamos que busque BGO,
# NaI2x2 y NaI3x3 fuera de la función y las unimos
# en una única data.frame, 'espectro' que luego
# separamos por columnas y ls unimos como filas a
# la plantilla.
espectro <- data.frame(mget(D, .GlobalEnv))
espectro <- split(as.matrix(espectro), col(espectro))
return(data.frame(pl.experimentos, I(espectro)))

```

Y, con dicha función, se obtendría la base de datos *exp.conj.acum.cf*, [Código 5.10](#), en la que *exp.conj* se refiere a los experimentos, comprendiendo los espectros como

un único conjunto de datos en una única celda por fila. Posteriormente, se utilizará el calificativo *unit* cuando se necesite una base de datos similar pero con cada espectro en 1025 columnas, una por canal.

Código 5.10: exp.conj.acum.cf

```
exp.conj.acum.cf <- get.experimentos.prev(ciclo, leyes,
                                         replica,
                                         detector,
                                         CaF2, SiO2)
```

Ahora se desarrollará la función *get.experimentos(data, L, quim.1, quim.2)* que resume los pasos anteriores facilitando su uso. Con ella se obtiene, como se ha dicho, la misma base de datos *espectro.acum.cf* con una columna de variable de medida para el total de cada espectro y columnas de identificación para leyes, ciclo, réplica y detector, [Código 5.11](#).

Código 5.11: get.experimentos

```
leyes <- factor(c("00", "02", "11", "27", "42", "60",
                 "76", "91", "98"))

CaF2 <- c(0.00, 2.28, 11.39, 27.05, 42.05, 59.92,
          76.50, 90.98, 97.60)

SiO2 <- c(0.00, 75.42, 38.23, 55.17, 36.88, 25.26, 14.06,
          5.04, 0.92)

library(plyr)           # join
library(stringr)       # str_split_fixed

get.experimentos <- function (data, L, quim.1, quim.2)
{
  LCRD <- data.frame(str_split_fixed(names(data),
                                     "_", 4))

  names(LCRD) <- c ("leyes", "ciclo", "replica",
                  "detector")

  muestras <- data.frame(L, quim.1, quim.2)

  names(muestras) <- c("leyes", "CaF2", "SiO2")
```

```

pl.experimentos <- join(LCRD, muestras,
                      by = "leyes")

# Unimos a la plantilla anterior los espectros
# totales en cada fila de una columna "espectro"

espectro <- split(as.matrix(data), col(data))
return(data.frame(pl_experimentos, I(espectro)))
}

```

La obtención de *exp.conj.acum.cf* se logra en un solo paso, [Código 5.12](#).

Código 5.12: *exp.conj.acum.cf*

```

exp.conj.acum.cf <- get.experimentos(espectro.acum.cf,
                                   leyes, CaF2, SiO2)

```

El resultado de *exp.conj.acum.cf* para las primeras 5 filas de las 5 primeras variables se muestra en el [Cuadro 5.2](#).

leyes	ciclo	replica	detector	CaF2	SiO2	espectro
00	001	A	BGO	0	75.42	c(0, 0, 0, 0, 0, ...)
00	002	A	BGO	0	75.42	c(0, 0, 4, 56, 57, ...)
00	003	A	BGO	0	75.42	c(0, 0, 4, 111, 113, ...)
00	004	A	BGO	0	75.42	c(0, 0, 7, 161, 169, ...)
00	005	A	BGO	0	75.42	c(0, 0, 11, 210, 234, ...)
00	006	A	BGO	0	75.42	c(0, 0, 13, 284, 302, ...)

Cuadro 5.2: Base de datos *exp.conj.acum.cf*

5.2. Trazado espectros familia de leyes acumulado con fondo

El programa Genie2000 permite ver gráficamente los espectros representando las cuentas en ordenadas y las energías de los canales en abscisas. Pero tiene sus limita-

ciones en cuanto a la forma de representación para establecer comparaciones pues los presenta apilados y no con el mismo origen de ordenadas.

Se va a desarrollar un método que permita trazar, para el conjunto de muestras analizadas o familia de leyes, los espectros realizados con el detector, replica y ciclo que se deseen. A continuación, con ese programa, se obtendrá la representación gráfica del ciclo número 100 de todos los ensayos para ver qué conclusiones se pueden sacar de la visualización conjunta de los espectros de cara a su posterior análisis.

Los espectros de las familias de leyes se presentarán con una leyenda que indique a qué ley pertenece cada gráfica del espectro. No se puede hacer con la función `plot()` de `Rbase` y se hará con el paquete `ggplot2`, desarrollado por Hadley Wickham para R. Para ello se necesita *fundir* la base de datos con el paquete `reshape2` del mismo desarrollador.

Por base de datos fundidas se entiende una base de datos en que los valores medidos *value* están en una única columna y las variables de identificación en el resto de columnas. Por valores medidos se considera, para el trazado de espectros, el valor de las cuentas obtenidas en cada canal, por lo que habrá de añadirse una nueva columna de identificación de éste con los valores 1 a 1025 que serán, posteriormente, el eje de abscisas.

Si se quisiera, se podría usar la energía correspondiente a la calibración hecha pero como es una mera identificación del canal, parece más sencillo utilizar el número de canal. Por otra parte, se pretende encontrar un método de análisis de espectros general y se va a demostrar que no es necesario conocer la energía del canal para encontrar aquéllos canales en los que se detecta el decaimiento de los productos de la activación neutrónica de CaF_2 y SiO_2 .

Si se desea utilizar las energías, como la escala es lineal y, para los 1025 canales, van de -9.80379 a 8258.7607 keV, se podría obtener la energía de cada canal con el [Código 5.13](#) en el que figuran, como comentarios, los intervalos de energías que se consideraron en anteriores tesis como adecuados para el análisis de CaF_2 :

Código 5.13: Energías de los canales

```
# Energías de los canales tras la calibración.
energias <- seq(from = -9.80379,
               to = 8258.7607,
               length = 1025)
canales <- 1:1025
energias.canales <- data.frame(canales, energias)

# Para CaF2 el pico de energía del decaimiento de
# 7-N-16, 6127.02142 keV, se
# correspondería con el canal 761
```

```

# Para SiO2 el pico de energía del decaimiento de
# 13-Al-28, 1778.85 keV, se
# correspondería con el canal 234

# ch 761 - 6127.02142 keV. Pico fluorita 6128.63 keV
#
# P_2007:      4.5 - 6 Mev
#
# energias.canales[energias.canales$energia > 4400 &
#                 energias.canales$energia < 6100, ]
#
#                 energias[4495.918, 6005.900]
#                 canales [559, 746]
#
#
# P_2012:      5.25 - 6.25 MeV
# energias.canales[energias.canales$energia > 5200 &
#                 energias.canales$energia < 6300, ]
#
#                 energias[5222.647, 6022.049]
#                 canales [649, 748]

```

La función `get.experimentos.melt(data, pos=0)`, [Código 5.14](#), permite fundir una base de datos de espectros tanto unitarios como acumulados con la estructura de `espectro.acum.cf`.

Código 5.14: `get.experimentos.melt(data, pos = 0)`

```

# Función para obtener la base de datos fundida
# desde la base de datos 'espectro.acum.cf' o de
# 'espectros.unitarios' con o sin fondo.
# 'pos' define si el nombre de la variable tiene
# prefijo (p. ej. X, con lo cual pos=1) o no
# (pos=0, empezando por los dos dígitos de L)

library(reshape2)
get.experimentos.melt <- function (data, pos = 0) {
  # Identificamos las filas con el número
  # (canal)
  data.id <- cbind(id = 1:nrow(data), data)
  data.id.f <- melt(data.id, id = "id")
  # Como variable quedaron los nombres de las

```

```

# columnas, que vamos a separar en columnas
# de identificación.
variable <- data.id.f$variable
L <- substr(variable, pos + 1, pos + 2)
C <- substr(variable, pos + 4, pos + 6)
R <- substr(variable, pos + 8, pos + 8)
D <- substr(variable, pos + 10, length(variable))
# Combinamos id (nº canal), LCRD y value.
id.LCRD.value <- data.frame(data.id.f$id,
                           L, C, R, D,
                           data.id.f$value)
names(id.LCRD.value) <- c("canal", "leyes",
                          "ciclo", "replica",
                          "detector", "value")

return(id.LCRD.value)
}

```

Esta función permite obtener la base fundida *exp.acum.cf.melt* a partir de *espectro.acum.cf*, [Código 5.15](#).

Código 5.15: exp.acum.cf.melt

```

exp.acum.cf.melt <-
  get.experimentos.melt(espectro.acum.cf)
# exp.acum.cf.melt[sample(nrow(exp.acum.cf.melt), 10), ]

```

La estructura de *exp.acum.cf.melt* puede verse en el [Cuadro 5.3](#) con 10 filas tomadas al azar.

Ahora que se tiene la base de datos con la estructura adecuada para trazar con *ggplot2*, se definirá una función de ploteado, *p.leyes()*, para no tener que reescribir el código de ploteado con cada grupo de leyes, [Código 5.16](#).

Código 5.16: p.leyes(data, replica, ciclo, detector)

```

# FUNCIONES PARA PLOTEAR CON ggplot2

# Función para plotear con ggplot2 una familia de
# leyes correspondientes a un ciclo, replica y
# detector desde la base de datos de experimentos
# fundidos, 'experimentos.melt':

```

canal	leyes	ciclo	replica	detector	value
112	98	083	C	BGO	486
192	42	029	B	BGO	58
19	98	087	A	NaI2x2	4143
680	11	079	A	NaI3x3	3
28	02	040	A	NaI3x3	2565
813	27	113	B	NaI3x3	0
714	91	089	A	BGO	139
262	42	138	B	NaI2x2	104
407	02	140	B	NaI3x3	2
1012	91	102	C	NaI3x3	2

Cuadro 5.3: exp.acum.cf.melt

```

library(ggplot2)
p.leyes <- function(data, replica, ciclo, detector) {
  ensayo <- data[data$ciclo == ciclo &
                data$replica == replica &
                data$detector == detector
                , ]
  p <- ggplot(ensayo, aes(canal, value, group = leyes))
  p <- p + geom_line(aes(colour = leyes, size = leyes))
  p <- p + scale_size_manual(values = c(0.1,0.2,0.3,
                                         0.4,0.5,0.6,0.7,0.8,1.2))
  p
}

```

Con esta función se pueden plotear los espectros acumulados con fondo del ciclo 100 mediante [Código 5.17](#).

Código 5.17: Plot espectros acumulados con fondo 100

```

# Ploteado familia de leyes de espectros unitarios o
# acumulados

p.leyes(exp.acum.cf.melt, "A", "100", "BGO")
p.leyes(exp.acum.cf.melt, "B", "100", "BGO")

```

```

p.leyes(exp.acum.cf.melt, "C", "100", "BGO")

p.leyes(exp.acum.cf.melt, "A", "100", "NaI2x2")
p.leyes(exp.acum.cf.melt, "B", "100", "NaI2x2")
p.leyes(exp.acum.cf.melt, "C", "100", "NaI2x2")

p.leyes(exp.acum.cf.melt, "A", "100", "NaI3x3")
p.leyes(exp.acum.cf.melt, "B", "100", "NaI3x3")
p.leyes(exp.acum.cf.melt, "C", "100", "NaI3x3")

# Para modificar el rango a plotear en x o y:
last_plot() + xlim(725, 800)

# Para CaF2 el pico de energía del decaimiento de
# 7-N-16, 6127.02142 keV, se
# correspondería con el canal 761

# Para SiO2 el pico de energía del decaimiento de
# 13-Al-28, 1778.85 keV, se
# correspondería con el canal 234

last_plot() + ylim(0, 150)

```

Se representarán también los fondos del ciclo 100 de todas las muestras con los distintos detectores para ver claramente su gráfica y comprender la relación que tiene con los espectros con fondo, [Código 5.18](#).

Seleccionamos los fondos (*ley = 00*) del ciclo 100 de la base de datos *espectro.acum.cf*. Obtendremos una dataframe de 1025 filas (cuentas en canales) por 9 columnas (fondos por detector y réplica):

Código 5.18: Plot espectros fondos acumulados 100

```

fondos.acum.100 <-
  espectro.acum.cf[ ,grepl("00_100",
                           names(espectro.acum.cf))]

# Ploteado
plot.ts(fondos.acum.100[ ,1], main = "00_100_A_BGO",
        xlab="Canal", ylab="Cuentas ciclo 100")
plot.ts(fondos.acum.100[ ,2], main = "00_100_B_BGO",
        xlab="Canal", ylab="Cuentas ciclo 100")
plot.ts(fondos.acum.100[ ,3], main = "00_100_C_BGO",

```

```

        xlab="Canal", ylab="Cuentas ciclo 100")
plot.ts(fondos.acum.100[,4], main = "00_100_A_NaI2x2",
        xlab="Canal", ylab="Cuentas ciclo 100")
plot.ts(fondos.acum.100[,5], main = "00_100_B_NaI2x2",
        xlab="Canal", ylab="Cuentas ciclo 100")
plot.ts(fondos.acum.100[,6], main = "00_100_C_NaI2x2",
        xlab="Canal", ylab="Cuentas ciclo 100")
plot.ts(fondos.acum.100[,7], main = "00_100_A_NaI3x3",
        xlab="Canal", ylab="Cuentas ciclo 100")
plot.ts(fondos.acum.100[,8], main = "00_100_B_NaI3x3",
        xlab="Canal", ylab="Cuentas ciclo 100")
plot.ts(fondos.acum.100[,9], main = "00_100_C_NaI3x3",
        xlab="Canal", ylab="Cuentas ciclo 100")

```

En las gráficas de los espectros acumulados con fondo para el ciclo 100, [Figura 5.1](#) a [Figura 5.9](#), y de los fondos respectivos, [Figura 5.10](#) a [Figura 5.18](#), se aprecian los mismos picos de la figura [Figura 2.2](#), y se sacan las siguientes conclusiones:

■ Detector BGO:

- Las gráficas de todas las leyes en las 3 réplicas están alineadas, por lo que el calibrado fue siempre el mismo.
- Hacia el canal 750 se aprecian dos pequeñas lomas que no hay en las gráficas de los fondos. El canal 761 se corresponde con el pico de energía del decaimiento del producto de activación neutrónica de la CaF_2 , ${}^{16}_7N$, 6127.02142 keV y 512 keV más abajo está el pico de escape. Abarcan aproximadamente desde el canal 680 hasta el 780.
- Por debajo del canal 250, hay otra loma que se corresponde con el pico de energía del decaimiento del producto de activación neutrónica de la SiO_2 , ${}^{28}_{13}Al$, 1778.85 keV, canal 234. No hay loma en esa zona en la gráfica del fondo. Es una loma estrecha detectada en unos 30 canales, aproximadamente del 200 al 235.

■ Detector NaI2x2:

- Los fondos de las 3 réplicas son prácticamente idénticos. Ocurre lo mismo con las gráficas de todas las leyes. No obstante, en la réplica C, algo ocurrió con la ley 02 que queda por debajo del fondo.
- Se aprecia una pequeña loma achaparrada en el intervalo de canales 575/700 que podría asociarse con el pico de energía del decaimiento del

producto de activación neutrónica de la CaF_2 , ${}^{16}_7N$, 6127.02142 keV, canal 761, y su pico de escape sin definición suficiente como para distinguir ambos picos como ocurre con el detector BGO.

- Por debajo de 250 se aprecia una loma menos clara que con el detector BGO correspondiente, en principio, con el pico de energía del decaimiento del producto de activación neutrónica de la SiO_2 , ${}^{28}_{13}Al$, 1778.85 keV, canal 234. Hay una ligera desalineación de los picos en esa estrecha franja.
 - Las cuentas detectadas son inferiores a las detectadas con el detector BGO. No parece que sea fácil detectarlas con el método que pretendemos desarrollar.
- Detector NaI3x3:
- La escala de cuentas detectadas es muy superior al caso de detectores BGO y, por supuesto, NaI2x2. Hay una gran desalineación entre las gráficas de las distintas leyes en las 3 réplicas por lo que, aunque se puede lograr mayor resolución, su puesta en marcha experimental requiere de un mayor cuidado para poder aprovechar los ensayos. Además, las escalas no se corresponden con las de los detectores BGO y NaI2x2 pues se ven comprimidas.
 - Se aprecian las lomas de los picos de los productos de la activación neutrónica de CaF_2 y SiO_2 desplazados hacia canales más bajos y sin alineación entre las distintas leyes. Se aprecia más consistente en la réplica C, con una menor desalineación aunque con una mayor compresión de la gráfica a un menor número de canales utilizado.
 - Esta desalineación no debería permitir detectar los picos con el método que vamos a desarrollar.

Ante las descalibraciones de algunos de los ensayos se hacen dos planteamientos: desecharlos y realizar nuevos experimentos o aprovecharlos en el estudio para obtener conclusiones acerca de los mismos a los que no se podría llegar con todos bien alineados. Se opta por utilizar todos los espectros en el análisis con el fin de detectar el comportamiento del método en estos casos. En especial, los ensayos con NaI3x3, en principio no válidos para determinar coeficientes de correlación pero que permitirán comprobar que en casos como éstos el método a desarrollar no detecta falsos picos. En [Sección 5.6](#), se revisarán nuevamente estos espectros.

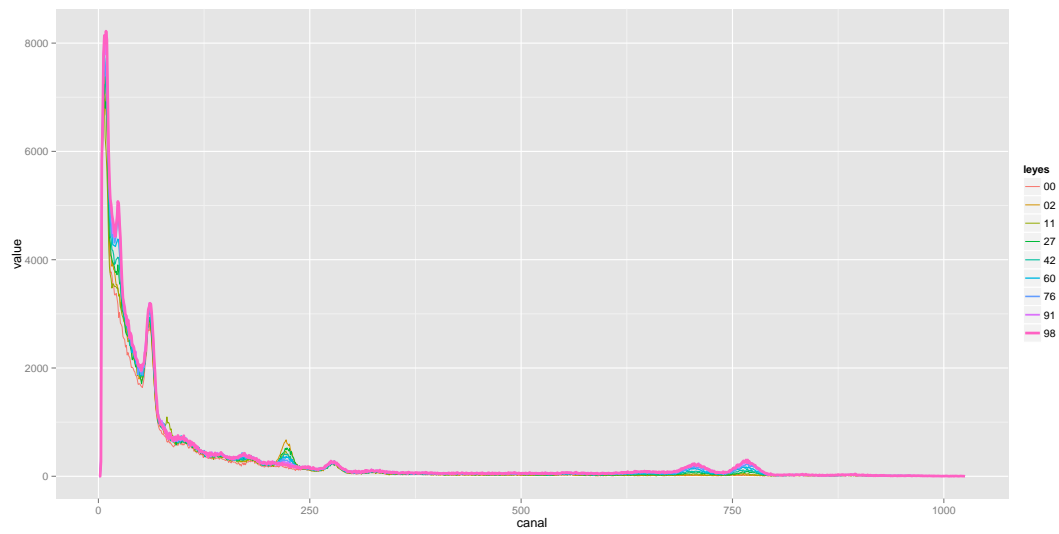


Figura 5.1: Espectros acumulados con fondo A_100_BGO

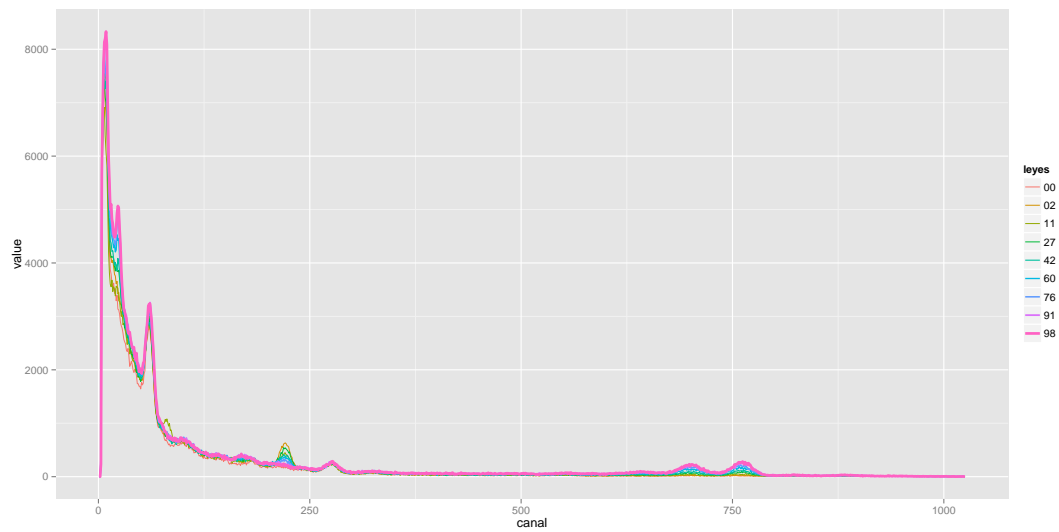
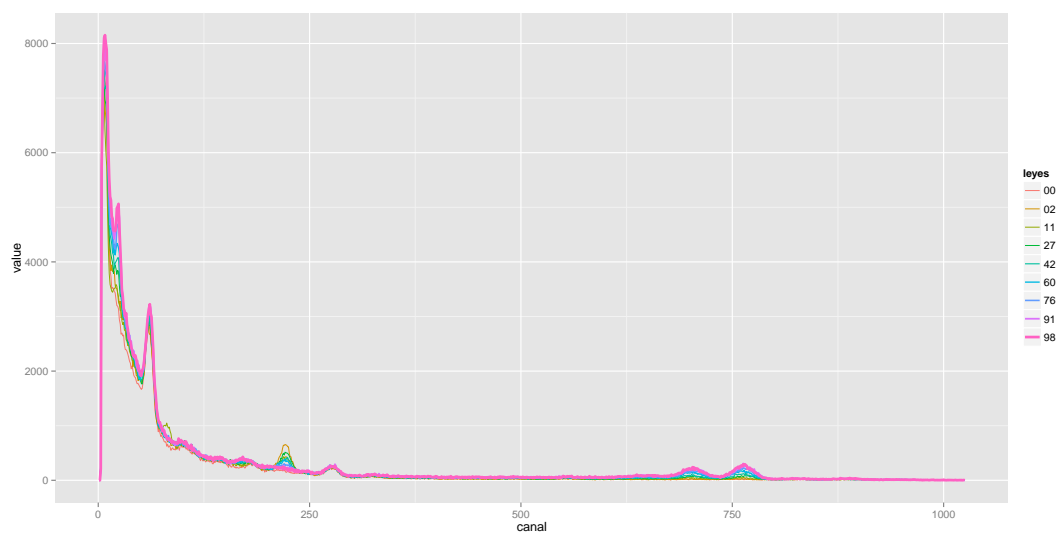
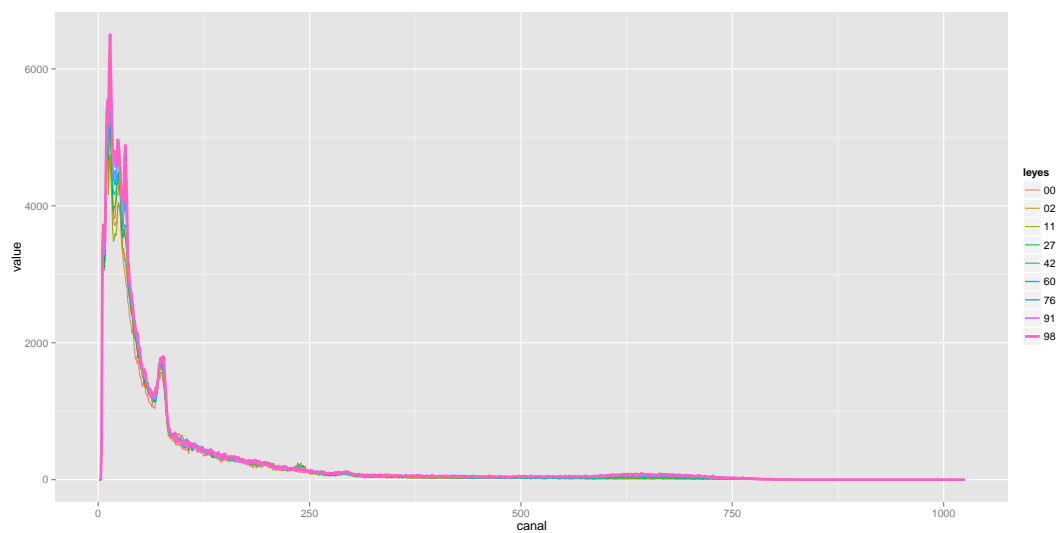


Figura 5.2: Espectros acumulados con fondo B_100_BGO

Figura 5.3: Espectros acumulados con fondo C₁₀₀BGOFigura 5.4: Espectros acumulados con fondo A₁₀₀NaI_{2x2}

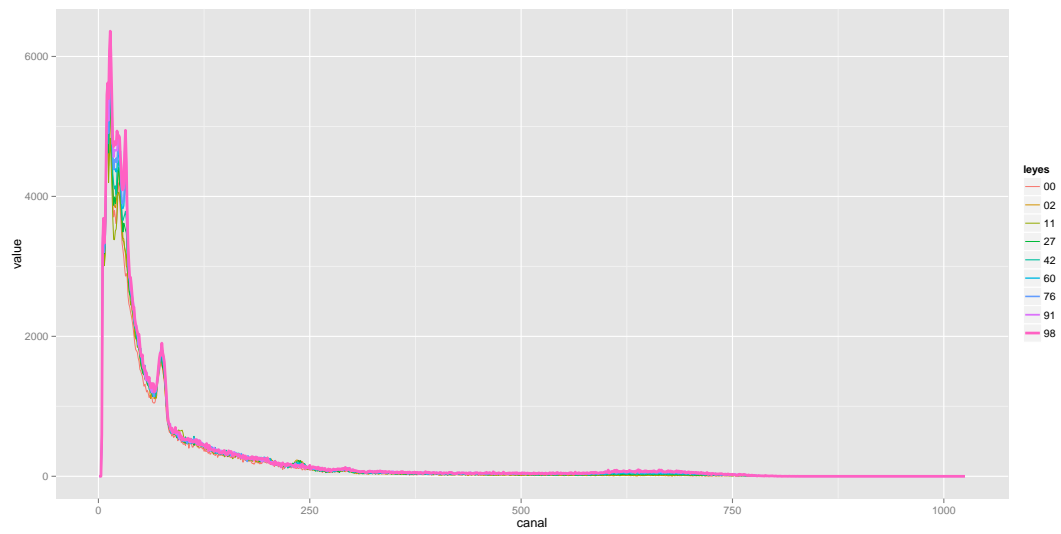


Figura 5.5: Espectros acumulados con fondo B_100_NaI2x2

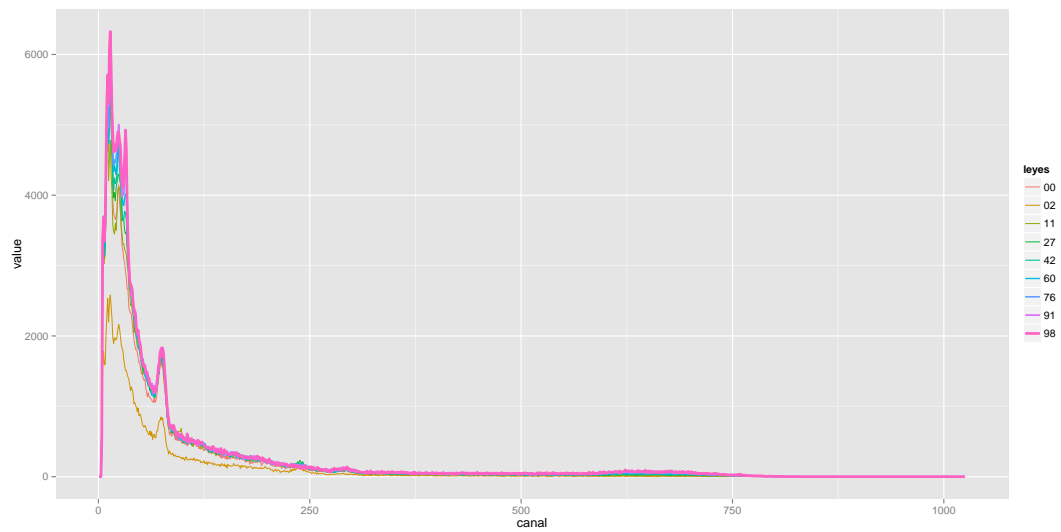


Figura 5.6: Espectros acumulados con fondo C_100_NaI2x2

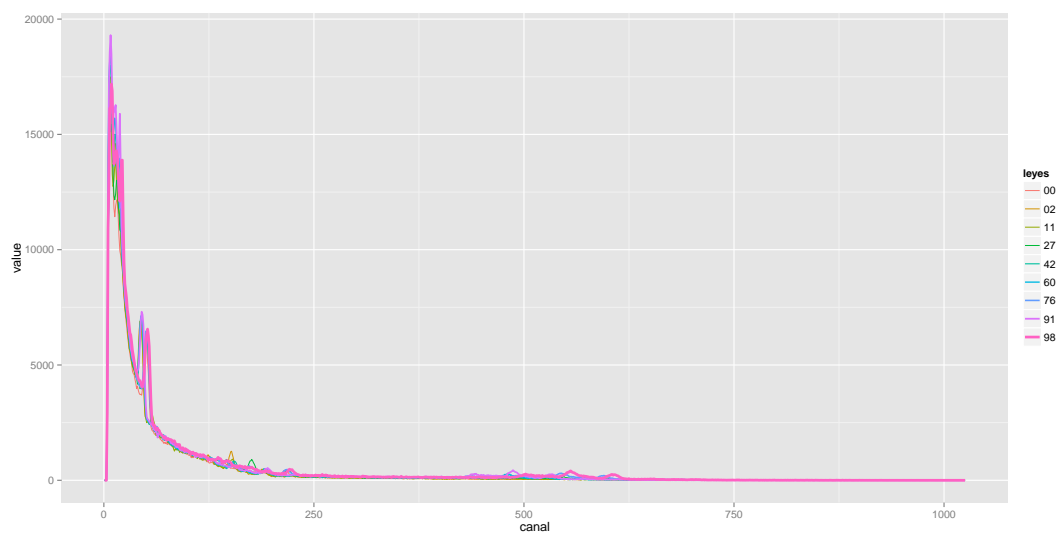


Figura 5.7: Espectros acumulados con fondo A_100_NaI3x3

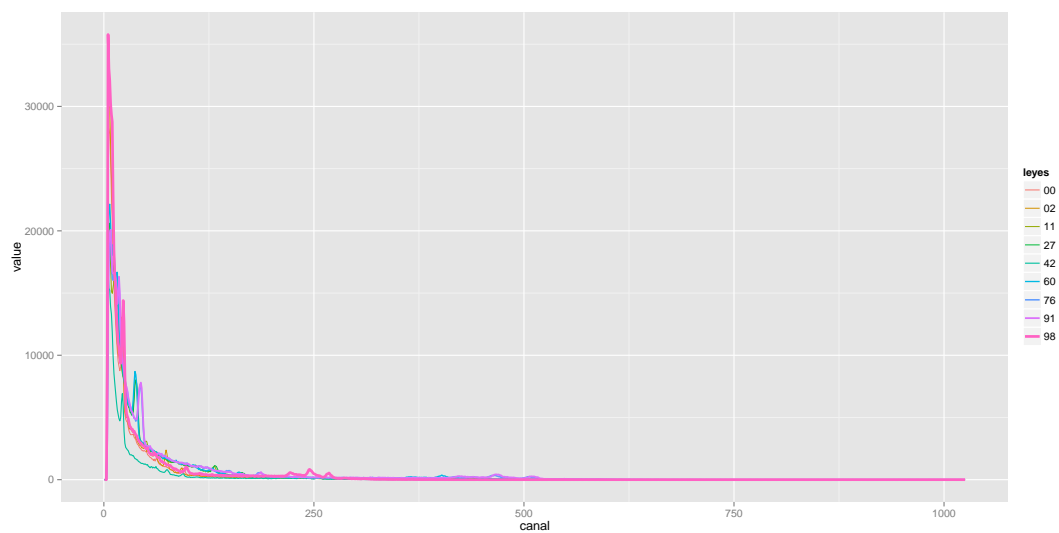


Figura 5.8: Espectros acumulados con fondo B_100_NaI3x3

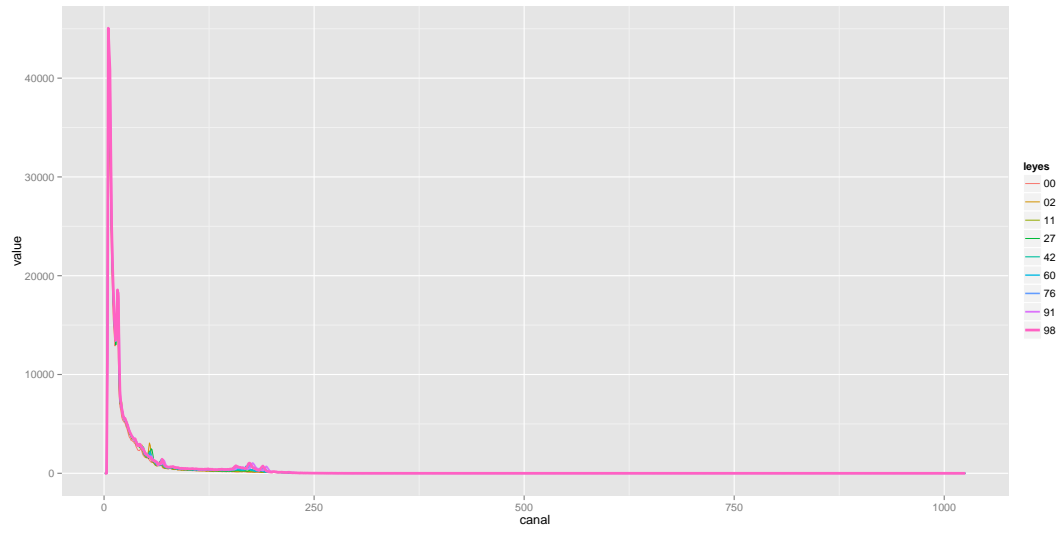


Figura 5.9: Espectros acumulados con fondo C_100_NaI3x3

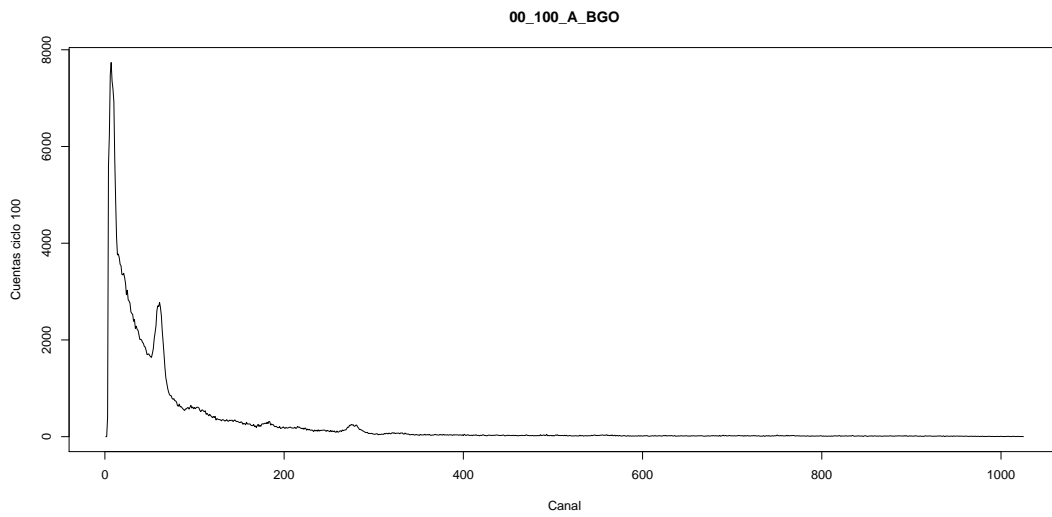


Figura 5.10: Fondo (Ley 00) - Detector BGO, réplica A, ciclo 100

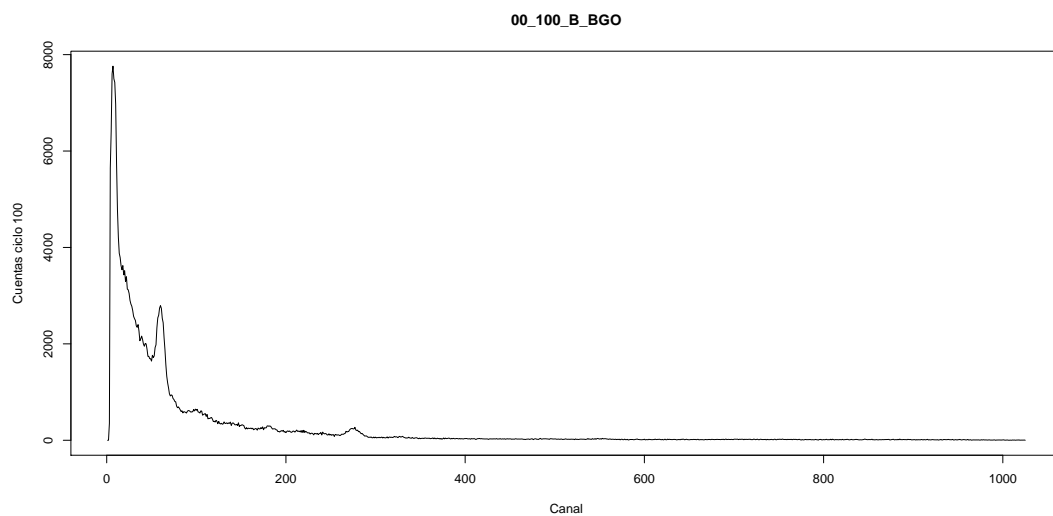


Figura 5.11: Fondo (Ley 00) - Detector BGO, réplica B, ciclo 100

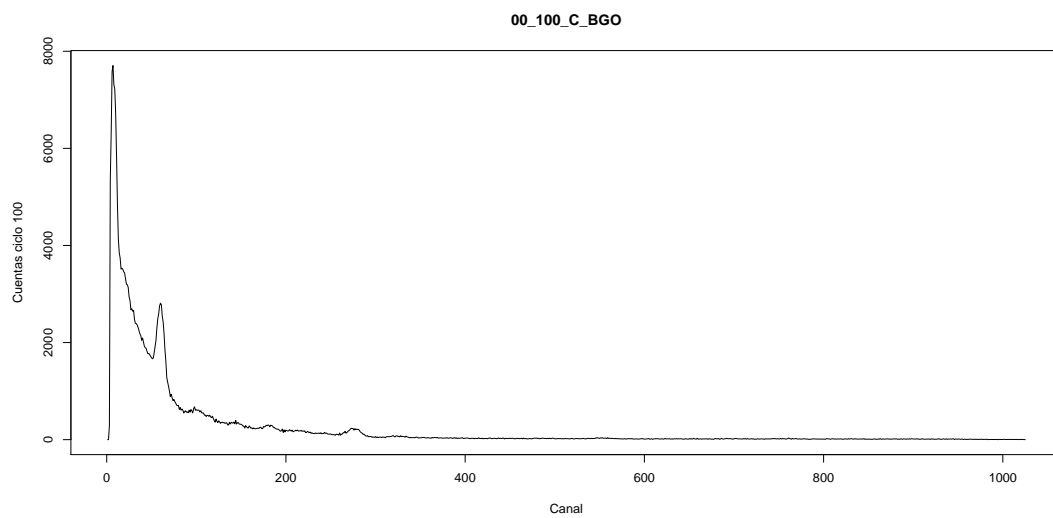


Figura 5.12: Fondo (Ley 00) - Detector BGO, réplica C, ciclo 100

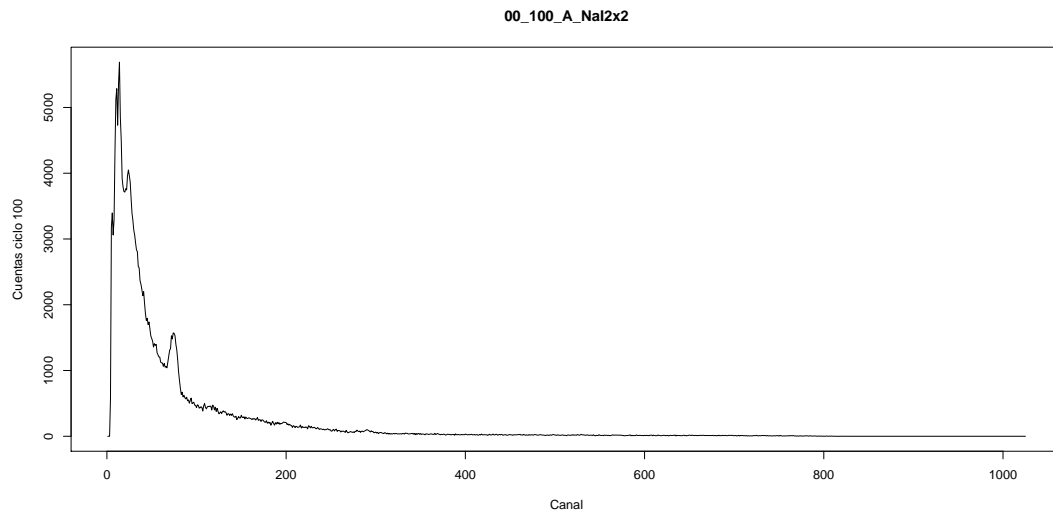


Figura 5.13: Fondo (Ley 00) - Detector NaI2x2, réplica A, ciclo 100

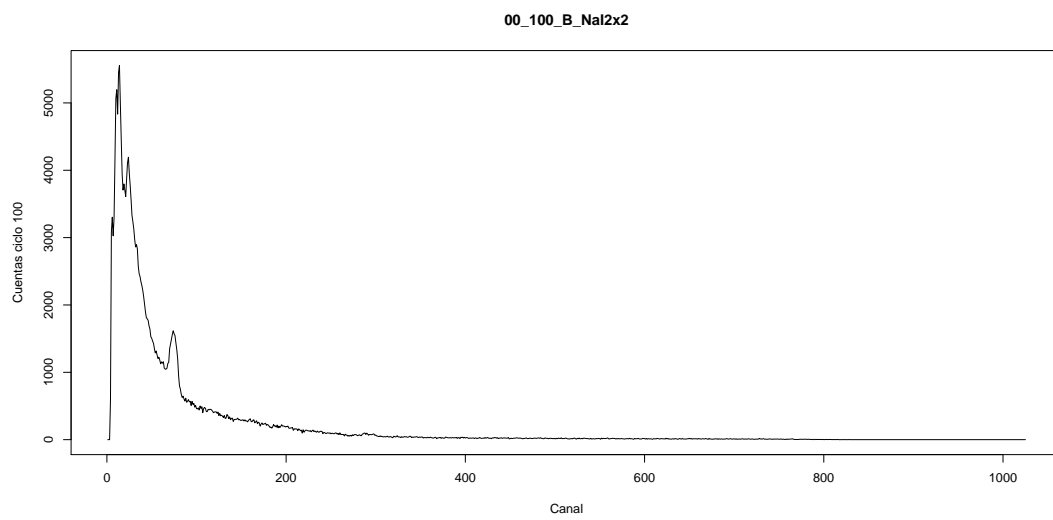


Figura 5.14: Fondo (Ley 00) - Detector NaI2x2, réplica B, ciclo 100

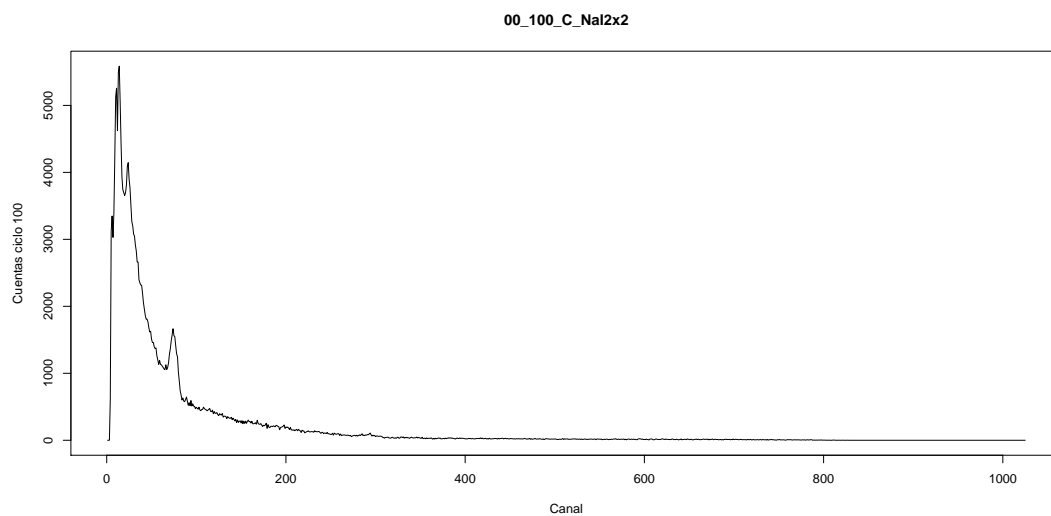


Figura 5.15: Fondo (Ley 00) - Detector NaI2x2, réplica C, ciclo 100

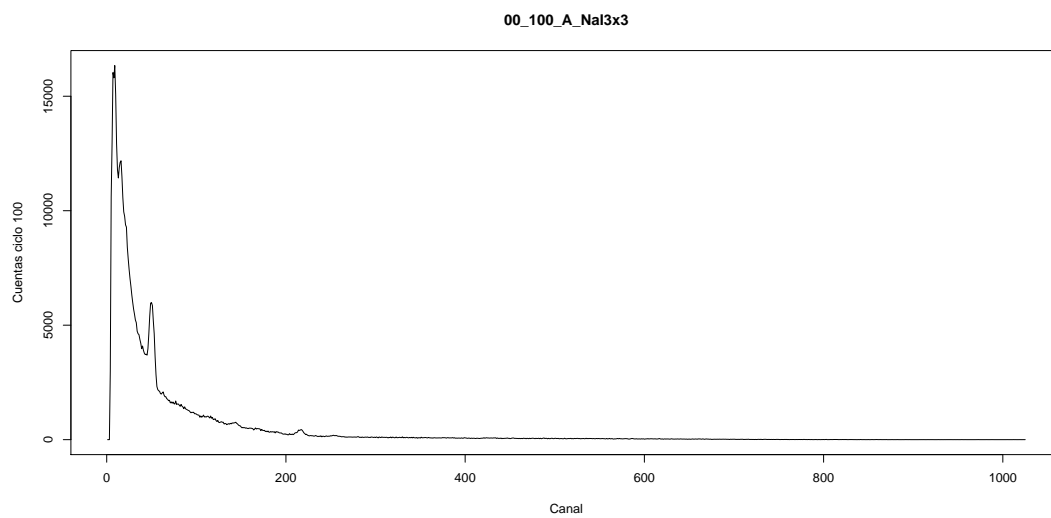


Figura 5.16: Fondo (Ley 00) - Detector NaI3x3, réplica A, ciclo 100

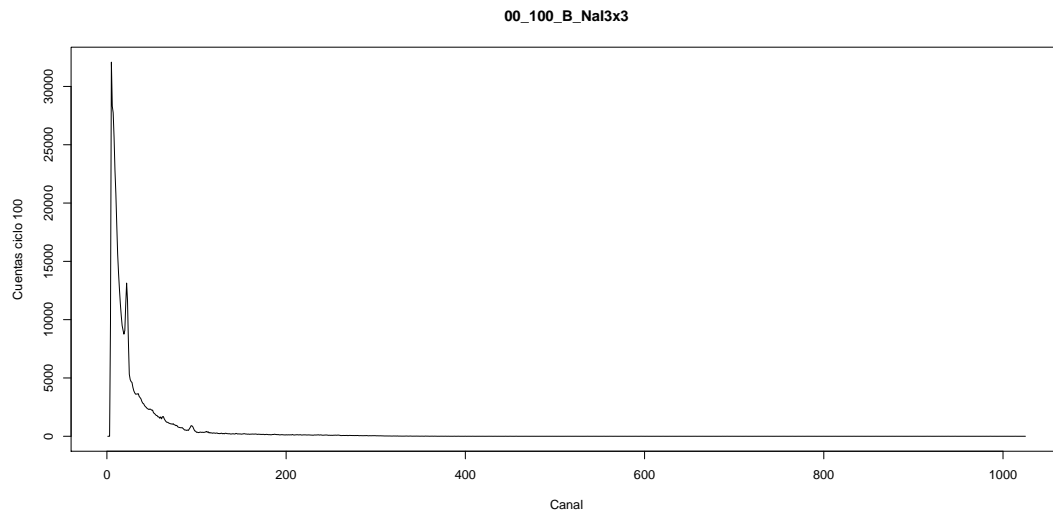


Figura 5.17: Fondo (Ley 00) - Detector NaI3x3, réplica B, ciclo 100

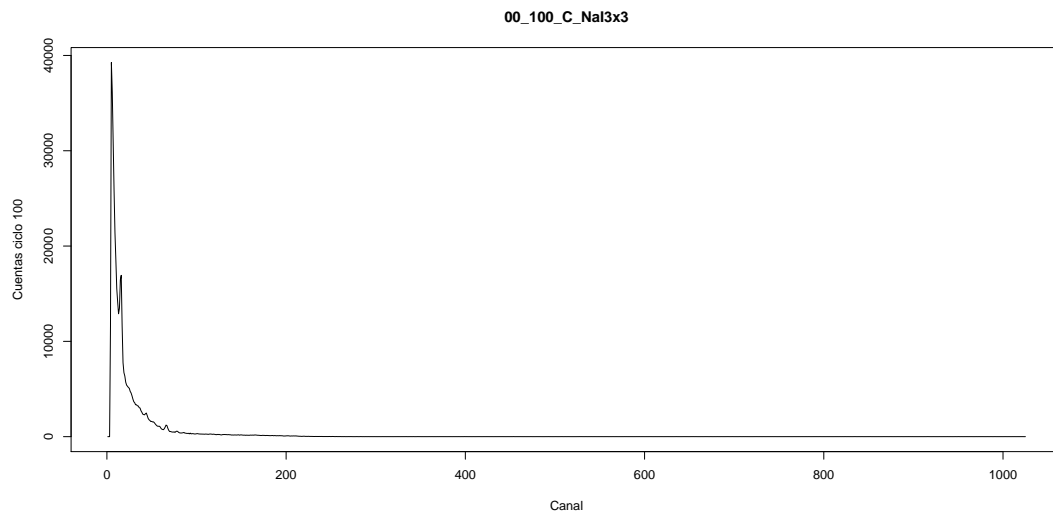


Figura 5.18: Fondo (Ley 00) - Detector NaI3x3, réplica C, ciclo 100

5.3. Parametrización de los espectros. Intervalo único

Una vez se tienen los espectros de los ensayos en un formato de base de datos como el de *exp.conj.acum.cf* se puede proceder a su tratamiento y análisis.

Se quiere correlacionar áreas del espectro que se correspondan con los picos de las energías del decaimiento de los productos de la activación neutrónica de flúor y sílice. Se ha visto que estos picos se pueden ver en las gráficas de los espectros, más fácilmente con unos detectores que con otros. Así, BGO y NaI3x3 permiten una mejor apreciación gráfica que NaI2x2 aunque la desalineación de las gráficas con NaI3x3 probablemente lleve a la indeterminación de un intervalo adecuado para su correlación, lo cual permitirá comprobar que el método que se va a desarrollar no se deja *engañar*. Se determinará qué intervalos y, por tanto, qué áreas bajo la gráfica en ese intervalo, permiten una mejor localización y determinación de los contenidos en flúor y sílice de las muestras. Las áreas vendrán dadas experimentalmente por la suma de las cuentas en los canales del intervalo en cuestión.

En este apartado se desarrolla un método para determinar la suma de las cuentas de los canales, o parámetro a correlacionar con los análisis químicos, de un intervalo definido por un comienzo y final. Se determinarán estos parámetros de los espectros con fondo y sin fondo o con corrección del fondo. La función de corrección de fondo permitirá en [Sección 5.4](#) obtener los espectros sin fondo y, así, representarlos gráficamente.

En principio, determinar las áreas o parámetros (suma de las cuentas de un intervalo) no tiene interés explícito ya que se calculará internamente en las funciones que hacen correlaciones de éstos con los análisis químicos. No obstante, puede ser interesante obtenerlos si se quiere analizar el número de cuentas registradas para analizar la precisión del método.

Este desarrollo ayudará a comprender mejor el hecho en [Sección 5.5](#), donde se expondrá otro método para determinar las sumas en un número determinado, n , de intervalos en que se dividirá el espectro. Al mismo tiempo, este método deberá hallar la suma en los intervalos que resultan de desplazar los n intervalos anteriores medio intervalo, lo que se denomina *offset*, para asegurar que una zona de interés no queda dividida entre dos intervalos. Se definirán funciones que permitirán correlacionar todos estos parámetros, de los intervalos n originales y con *offset* así como de un intervalo único definido por comienzo y final, con los análisis químicos en un apartado posterior. Los comentarios del programa extienden la breve explicación anterior. [Código 5.19](#).

Código 5.19: Parametrización y análisis.

```
# 4 - Parametrización y análisis.  
# Por parametrización entenderemos la suma de las
```

```

# cuentas comprendidas en un intervalo de canales.
# Su análisis consistirá en aplicar funciones a los
# parámetros obtenidos, en especial, estableciendo
# correlaciones con los análisis químicos de las
# muestras ensayadas.

# Desarrollaremos funciones para hacer la
# parametrización y análisis, bien sobre un
# intervalo único definido por su inicio y fin,
# bien sobre todos los intervalos resultantes de
# dividir el espectro total en un número dado.

# Partiremos de base de datos con los espectros
# en una única columna, pudiendo así generar
# una lista de dataframes con n parámetros
# agrupados por leyes (L), replica (R)
# y ciclo (C) --.(ciclo, replica, detector)--
#
# La base de datos 'experimentos' obtenida de los
# IEC originales contiene espectros acumulados en
# cada ciclo en una única columna.
# Posteriormente obtendremos bases de datos con
# la misma estructura pero con espectros dados por
# el decaimiento de cada ciclo sin acumular,
# 'exp.unit.unit' con y sin fondo, a las que se
# podrán aplicar las mismas funciones de
# parametrización y análisis.

```

Primeramente se cargan la librería *plyr* de R que se va a necesitar. La función que corregirá el fondo de cada grupo de ensayos por leyes para un detector, réplica y ciclo, *lista_lista.sf(lista)*, se utilizará en [Sección 5.4](#) y [Sección 5.5](#), pero ya no será necesario definirla al hacerlo aquí. [Código 5.20](#).

Código 5.20: lista_lista.sf(lista)

```

# Parámetros y librerías
library(plyr) # join, rbind.fill, ddply

# Corrección de fondo en listas de muestras (L)
# agrupadas por DRC.

lista_lista.sf <- function(lista) {
  lapply(seq(lista),

```

```

function(i) cbind(lista[[i]][1:6],
                  apply(lista[[i]][-(1:6)],
                        2,
                        function(col)
                          col - col[1]
                        )
                  )
)
}

```

A continuación se define *prm.intervalo(data, inicio, final)*, [Código 5.21](#), que encabeza las columnas de parámetros con y sin fondo con el intervalo a que pertenecen entre corchetes. Como en el caso de un intervalo único definido por el usuario de la función, éste es perfectamente conocido y, además, viene definido también por columnas de identificación del inicio y final, se define otra función más sencilla, *prm.intervalo.cf.sf(data, inicio, final)*, que encabeza las columnas de parámetros simplemente con *Prm-* con o sin fondo.

Código 5.21: Parámetros intervalo único.

```

# 4a- Parámetros de un intervalo definido por canales
#   de inicio y final.

#   Función que encabeza las columnas de parámetros
#   con el intervalo.

prm.intervalo <- function(data, inicio, final) {

#   Vector integer de parámetros (suma cuentas
#   intervalo):
  parametros <- sapply(data$espectro,
                      function(vector)
                        sum(vector[inicio:final]) )

# dataframe con parámetros con fondo.
# Columnas identificación y columna de parámetros.
  df.cf <- data.frame(data[, -ncol(data)],
                    parametros)

# Lista agrupada por CRD. Parámetros sin corregir
# fondo

```

```

lista <- split(df.cf, list(df.cf$ciclo,
                          df.cf$replica,
                          df.cf$detector))

# lista de parámetros con corrección de fondo
lista.sf <- lista_lista.sf(lista)

# Rehacemos la dataframe con columnas para los
# parámetros con y sin fondo
# library(plyr)

# df.sf <- rbind.fill(lista.sf) no agrupa en el
# mismo orden en que está df.cf. Por ello,
# renombramos primero df.cf y df.sf y luego las
# unimos con join() de plyr y no con data.frame.

# nombre de la columna del intervalo con fondo
intervalo <- paste("[" , inicio, " , " , final, "]",
                  sep = "")

# nombre de la columna del intervalo sin fondo
intervalo.sf <- paste("sf-", intervalo, sep = "")

names(df.cf) <- c(names(data)[-ncol(data)],
                  intervalo)
names(df.sf) <- c(names(data)[-ncol(data)],
                  intervalo.sf)

df <- join(df.cf, df.sf) # plyr

# Unimos data frame con fondo y la columna de
# parámetros sin fondo. NO LO HACEMO ASÍ.
# df <- data.frame(df.cf, df.sf[ncol(df.sf)])
#Nombramos las columnas de los parámetros.
# Esto era si se unían con data.frame
# names(df) <- c(names(data)[-ncol(data)],
#               intervalo, intervalo.sf)

return(df) }

# La función anterior se puede simplificar
# encabizando las columnas de parámetros sin el
# el intervalo.

```

```

prm.intervalo.cf.sf <- function(data, inicio, final) {

  parametros <- sapply(data$espectro,
                       function(vector)
                         sum(vector[inicio:final]) )
  df.cf <- data.frame(data[ , -ncol(data) ],
                     parametros)
  lista <- split(df.cf, list(df.cf$ciclo,
                             df.cf$replica,
                             df.cf$detector))
  lista.sf <- lista_lista.sf(lista)
  df.sf <- rbind.fill(lista.sf)

  names(df.cf) <- c(names(data) [-ncol(data) ],
                   "Prm.cf")
  names(df.sf) <- c(names(data) [-ncol(data) ],
                   "Prm.sf")
  df <- join(df.cf, df.sf) # plyr
  return(df)
}

```

Las Cuadro 5.4 y Cuadro 5.5 muestran el extracto de las bases de datos conseguidas para el detector *BGO*, réplica *A* y ciclo *100* aplicando esas funciones a la base de datos *exp.conj.acum.cf* en un intervalo arbitrario [559, 746], Código 5.22, que se correspondería con el utilizado en la Tesis del Dr. Miguel Rey Ronco [95]. Como, R no permite hacer referencia a una columna que empieza por “[”, en ocasiones puede ser necesario utilizar la segunda tabla.

Código 5.22: Parámetros intervalo 559 – 746

```

df1 <- prm.intervalo(exp.conj.acum.cf, 559, 746)
df1[df1$replica == "A" & df1$ciclo == "100" & df1$detector == "BGO", ]

df2 <- prm.intervalo.cf.sf(exp.conj.acum.cf, 559, 746)
df2[df2$replica == "A" & df2$ciclo == "100" & df2$detector == "BGO", ]

```

leyes	ciclo	replica	detector	CaF2	SiO2	[559, 746]	sf-[559, 746]
00	100	A	BGO	0.00	0.00	3163	0
02	100	A	BGO	2.28	75.42	3231	68
11	100	A	BGO	11.39	38.23	4663	1500
27	100	A	BGO	27.05	55.17	6404	3241
42	100	A	BGO	42.05	36.88	8232	5069
60	100	A	BGO	59.92	25.26	11353	8190
76	100	A	BGO	76.50	14.06	13626	10463
91	100	A	BGO	90.98	5.04	16624	13461
98	100	A	BGO	97.60	0.92	16857	13694

Cuadro 5.4: exp.conj.acum.cf [559,746]

leyes	ciclo	replica	detector	CaF2	SiO2	Prm.cf	Prm.sf
00	100	A	BGO	0.00	0.00	3163	0
02	100	A	BGO	2.28	75.42	3231	68
11	100	A	BGO	11.39	38.23	4663	1500
27	100	A	BGO	27.05	55.17	6404	3241
42	100	A	BGO	42.05	36.88	8232	5069
60	100	A	BGO	59.92	25.26	11353	8190
76	100	A	BGO	76.50	14.06	13626	10463
91	100	A	BGO	90.98	5.04	16624	13461
98	100	A	BGO	97.60	0.92	16857	13694

Cuadro 5.5: exp.conj.acum.cf - Prm [559,746]

5.4. Trazado espectros familia de leyes acumulado sin fondo

La función `lista_lista.sf(lista)`, definida en [Sección 5.3](#), permite obtener, a partir del `espectro.acum.cf` el `exp.acum.sf` restando a cada espectro el fondo correspondiente al ciclo, detector y réplica. Se usará esta función dentro de otra función `get.exp.sf.melt(data)` que, además, devolverá una base de datos fundida para trazar con `ggplot2`. Primeramente, [Código 5.23](#), se presenta esta función y, a continuación y como ya se hizo en casos anteriores, se presenta la manera de obtener el mismo resultado paso a paso, lo que puede valer para aprovechar fragmentos de código si se quiere el resultado de algún paso intermedio que, en la función directa, se desecha y, por otra parte, para ayudar a comprender mejor cómo funciona.

Código 5.23: `get.exp.sf.melt(data)`

```

# Función que nos da una directamente, desde una
# data.frame del tipo 'espectro.acum.cf', la
# correspondiente dataframe sin fondo
# 'espectro.acum.sf' sin crear bases de datos
# intermedias. Se puede usar también con
# 'espectro.unit.cf'

library(stringr) # str_split_fixed
library(reshape2) # melt
library(plyr) # rbind.fill, join, ddply

get.exp.sf.melt <- function(data) {

  LCRD <- data.frame(str_split_fixed(names(data),
                                    "_", 4))
  names(LCRD) <- c("leyes", "ciclo",
                 "replica", "detector")
  df <- data.frame(LCRD, t(espectro))
  lista_espectro <- split(df,
                         list(df$ciclo, df$replica, df$detector))
  espectro_lista_sin_fondo <-
    lista_lista.sf(lista_espectro)
  espectro_sin_fondo <-
    rbind.fill(espectro_lista_sin_fondo)
  espectro_sin_fondo <- melt(espectro_sin_fondo,
                            measured = c("leyes",
                                         "ciclo",
                                         "replica",
                                         "detector"),
                            variable.name = "canal")
}

```

También es posible partir de *espectro.acum.cf.melt* para lograr *exp.acum.sf.melt*, pero se prefiere hacer de esta manera porque puede no querer trabajarse con espectros con fondo que no aporta nada.

Con esta función obtenemos fácilmente la base de datos de espectros acumulados sin fondo. [Código 5.24](#).

Código 5.24: exp.acum.sf.melt

```
exp.acum.sf.melt <- get.exp.sf.melt(espectro.acum.cf)
```

Se puede ahora comparar para el detector BGO, ciclo 100, réplica A, un canal correspondiente a la zona de detección del SiO_2 , como el número 220. Comparando el Cuadro 5.6, obtenido con Código 5.25, con el Cuadro 5.7, obtenido con Código 5.26, comprobándose que, realmente, se ha restado el fondo.

Código 5.25: exp.acum.sf.melt(100_A_X220_BGO)

```
exp.acum.sf.melt[exp.acum.sf.melt$replica == "A" &
  exp.acum.sf.melt$ciclo == "100" &
  exp.acum.sf.melt$canal == "X220" &
  exp.acum.sf.melt$detector == "BGO", ]
```

leyes	ciclo	replica	detector	canal	value
00	100	A	BGO	X220	0
02	100	A	BGO	X220	463
11	100	A	BGO	X220	239
27	100	A	BGO	X220	303
42	100	A	BGO	X220	242
60	100	A	BGO	X220	178
76	100	A	BGO	X220	143
91	100	A	BGO	X220	103
98	100	A	BGO	X220	55

Cuadro 5.6: exp.acum.sf.melt - 100_A_BGO_ch220

Código 5.26: exp.acum.cf.melt(100_A_220_BGO)

```
exp.acum.cf.melt[exp.acum.cf.melt$replica == "A" &
  exp.acum.cf.melt$ciclo == "100" &
  exp.acum.cf.melt$canal == "220" &
  exp.acum.cf.melt$detector == "BGO", ]
```

leyes	ciclo	replica	detector	canal	value
220	00	100	A	BGO	163
220	02	100	A	BGO	626
220	11	100	A	BGO	402
220	27	100	A	BGO	466
220	42	100	A	BGO	405
220	60	100	A	BGO	341
220	76	100	A	BGO	306
220	91	100	A	BGO	266
220	98	100	A	BGO	218

Cuadro 5.7: exp.acum.cf.melt - 100_A_BGO_ch220

El desarrollo de `get.exp.sf.melt(data)`, paso a paso, se da en [Código 5.27](#).

Código 5.27: get.espectro.referenciado(data)

```
# La función get.exp.sf.melt() la veremos
# paso a paso:
# Vamos a obtener la base de datos 'espectro'
# con el fondo corregido.
# Por 'referenciado' entendemos que las columnas
# LCRD nos permiten acceder a cualquier espectro
# en vez de utilizar el nombre de la variable.

library(stringr) # str_split_fixed

get.espectro.referenciado <- function (data) {

  LCRD <- data.frame(str_split_fixed(names(data),
    "_", 4))
  names(LCRD) <- c("leyes", "ciclo",
    "replica", "detector")

  # Unimos a la plantilla anterior cada espectro,
  # para lo que hay que transponer la matriz
  # 'espectro'. Al no utilizar I(), se añaden a cada
  # fila 1025 columnas de cada canal del espectro.
```

```
df <- data.frame(LCRD, t(espectro))
}

espectro.referenciado <-
  get.espectro.referenciado(espectro.acum.cf)

library(plyr)      # join

# Hay que restar a cada espectro el correspondiente
# a L == '00' para las mismas CRD.

get.espectro.lista <- function(df) {
  lista.espectro <- split(df,
                          list(df$ciclo, df$replica,
                                df$detector))
}

espectro.lista <-
  get.espectro.lista(espectro.referenciado)

# espectro_lista[[3]][, 1:10]

# La función siguiente ya la utilizamos para
# parametrizar aplicada a las sumas de valores de un
# intervalo de canales. Ahora la aplicamos a los
# canales independientes.

espectro.lista.sin.fondo <-
  lista_lista.sf(espectro.lista)
# espectro_lista.sinlfondo[[3]][, 1:10]

# Pasamos a dataframe y fundimos para poder plotearla
# con ggplot2.

exp.sf <- rbind.fill(espectro.lista.sin.fondo)
# espectro.sin.fondo[1:18, 1:10]

library(reshape2)
```

```

exp.acum.sf.melt <-
  melt(exp.sf,
        measured = c("leyes", "ciclo",
                     "replica", "detector"),
        variable.name = "canal")

# exp.acum.sf.melt$canal de factor a integer para que
# las abscisas queden bien ploteadas
exp.acum.sf.melt$canal <- as.numeric(substr(exp.acum.sf.melt$canal, 2, 5))

```

De manera similar a lo hecho con *exp.acum.cf.melt*, se trazan ahora las familias de leyes sin fondo con la función *p.leyes()*, [Código 5.28](#). Las gráficas obtenidas del ciclo 100 para los 3 detectores y sus 3 réplicas se presentan en las [Figura 5.19](#) a [Figura 5.27](#).

Código 5.28: plot(100sf)

```

# Ploteado familia de leyes de espectros acumulados sf

p.leyes(exp.acum.sf.melt, "A", "100", "BGO")
p.leyes(exp.acum.sf.melt, "B", "100", "BGO")
p.leyes(exp.acum.sf.melt, "C", "100", "BGO")

p.leyes(exp.acum.sf.melt, "A", "100", "NaI2x2")
p.leyes(exp.acum.sf.melt, "B", "100", "NaI2x2")
p.leyes(exp.acum.sf.melt, "C", "100", "NaI2x2")

p.leyes(exp.acum.sf.melt, "A", "100", "NaI3x3")
p.leyes(exp.acum.sf.melt, "B", "100", "NaI3x3")
p.leyes(exp.acum.sf.melt, "C", "100", "NaI3x3")

```

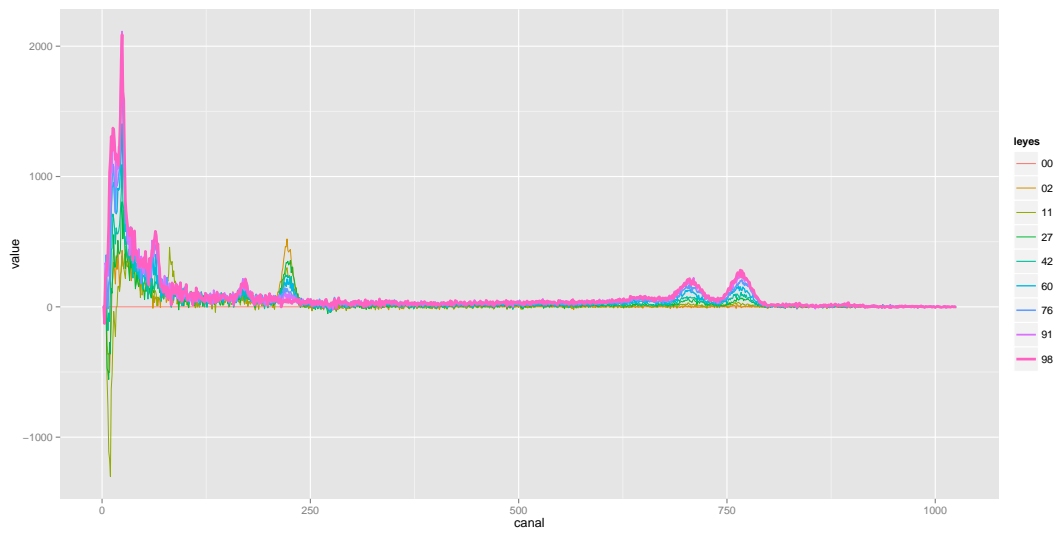


Figura 5.19: Espectros acumulados sin fondo A_100_BGO_sf

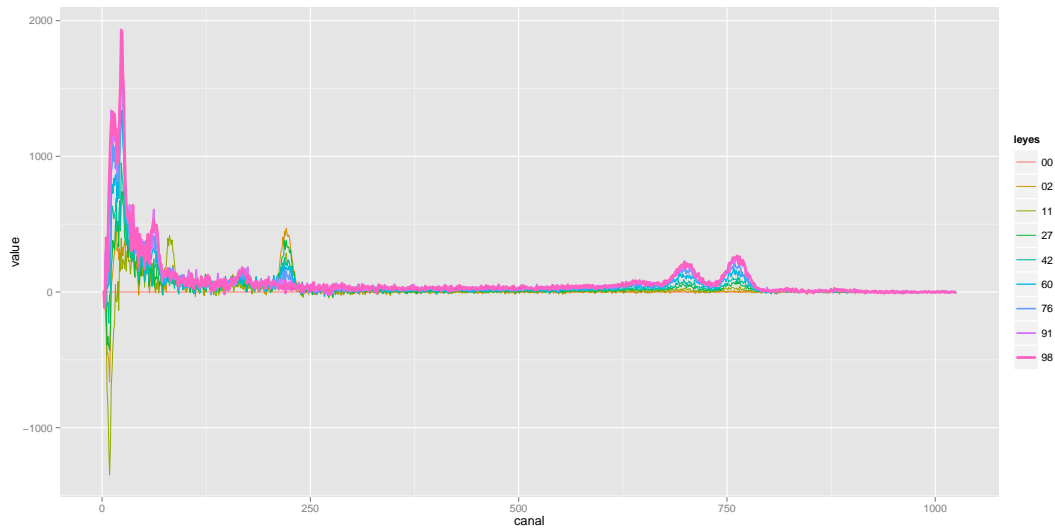


Figura 5.20: Espectros acumulados sin fondo B_100_BGO_sf

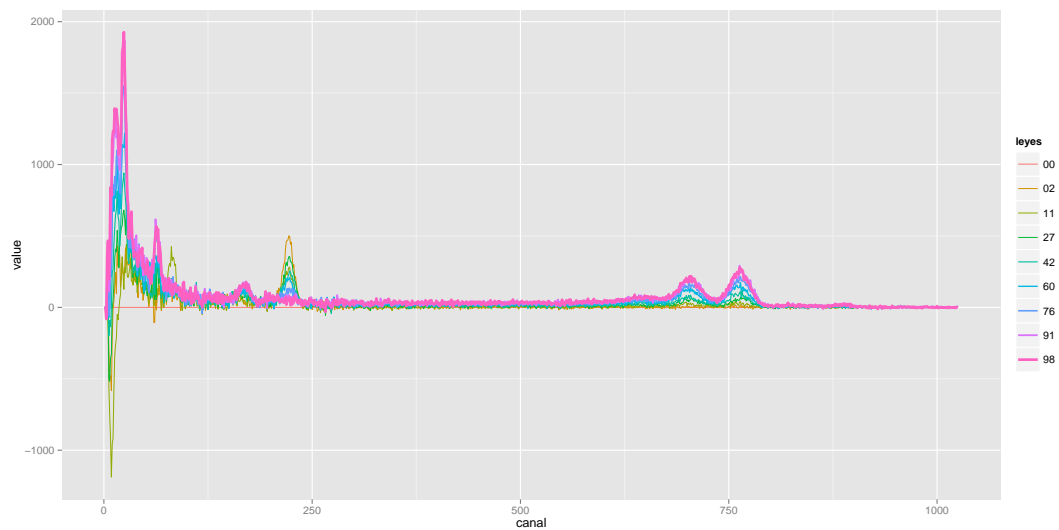


Figura 5.21: Espectros acumulados sin fondo C_100_BGO_sf

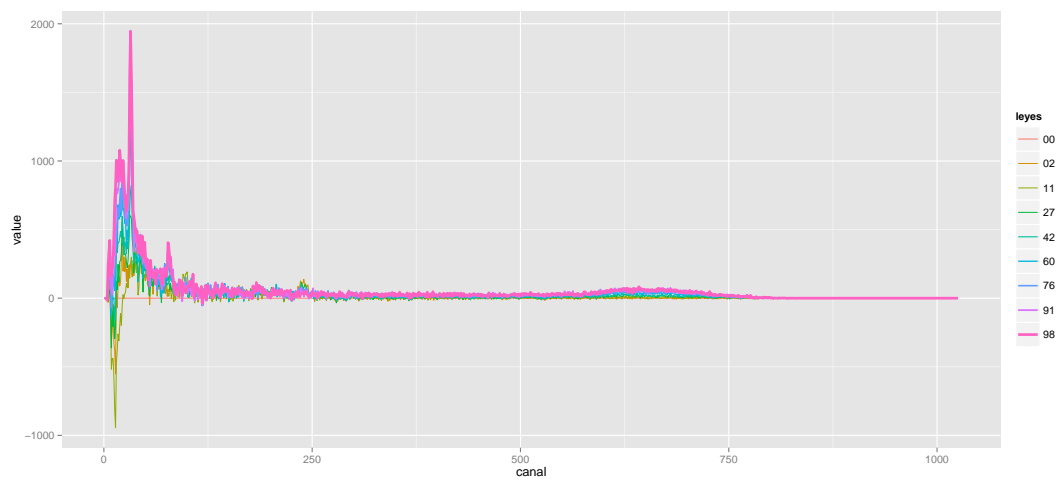


Figura 5.22: Espectros acumulados sin fondo A_100_NaI2x2_sf

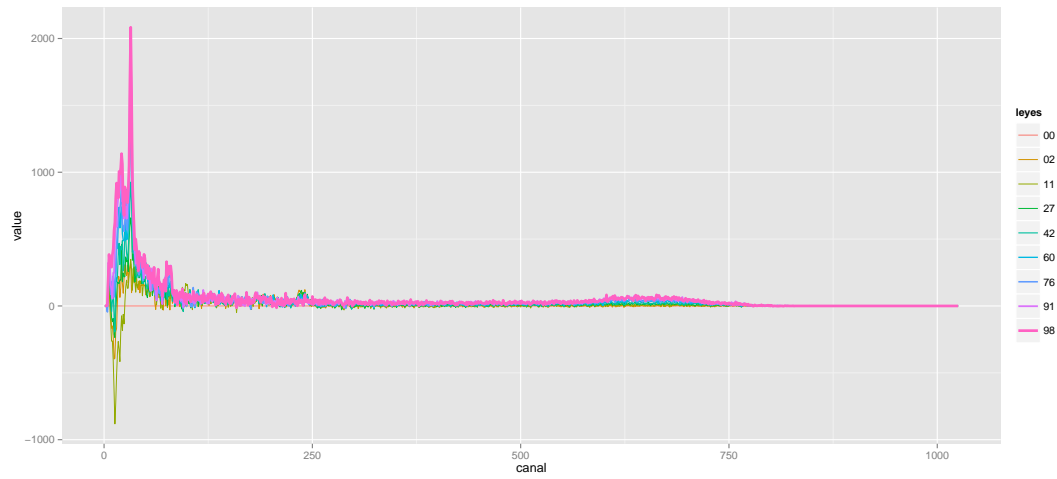


Figura 5.23: Espectros acumulados sin fondo B_100_NaI2x2_sf

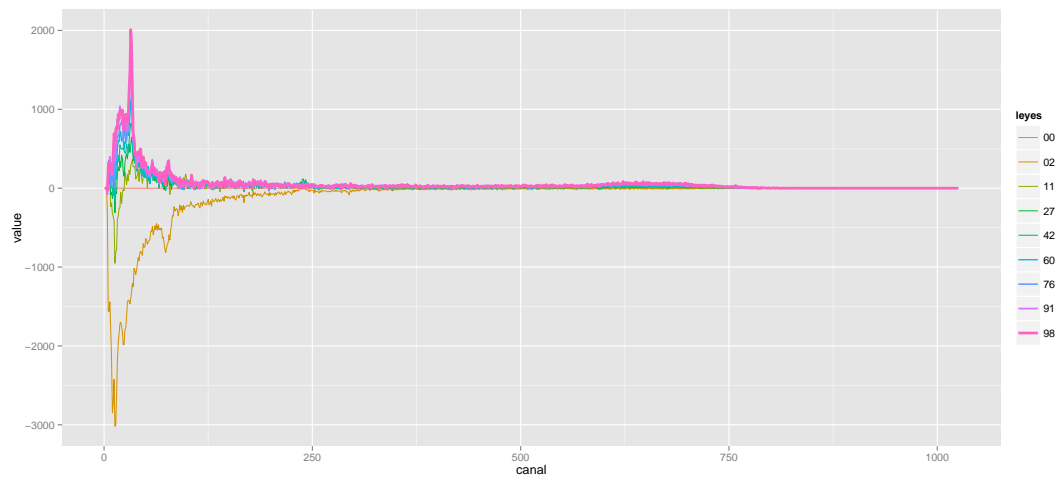


Figura 5.24: Espectros acumulados sin fondo C_100_NaI2x2_sf

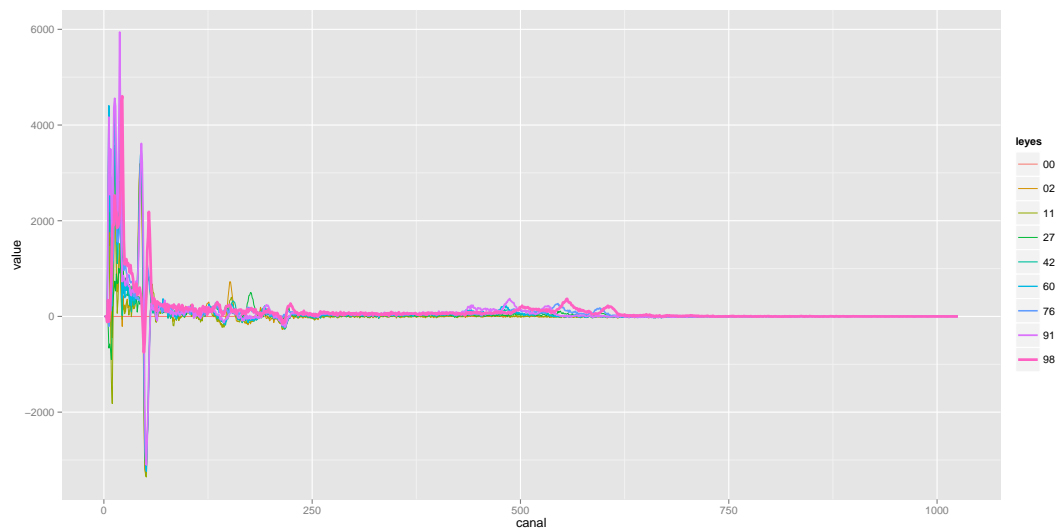


Figura 5.25: Espectros acumulados sin fondo A_100_NaI3x3_sf

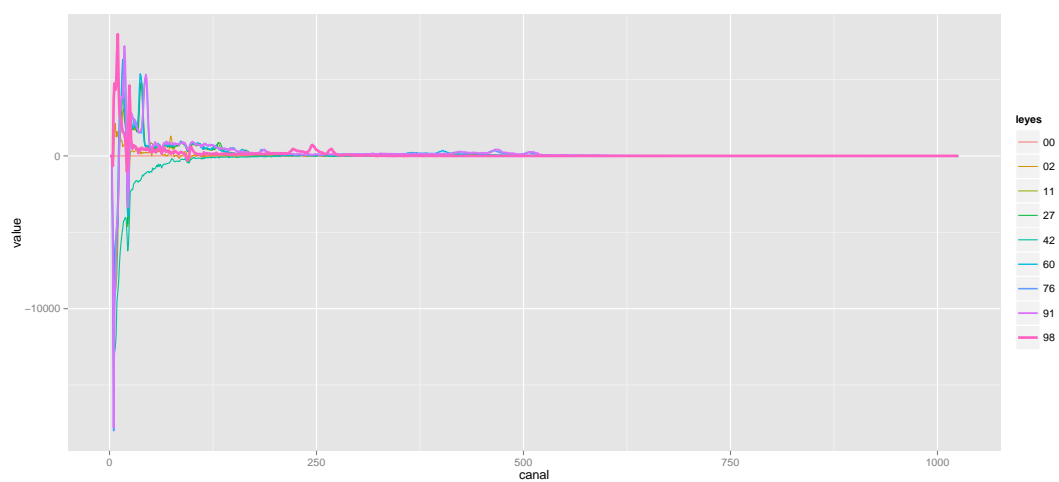


Figura 5.26: Espectros acumulados sin fondo B_100_NaI3x3_sf

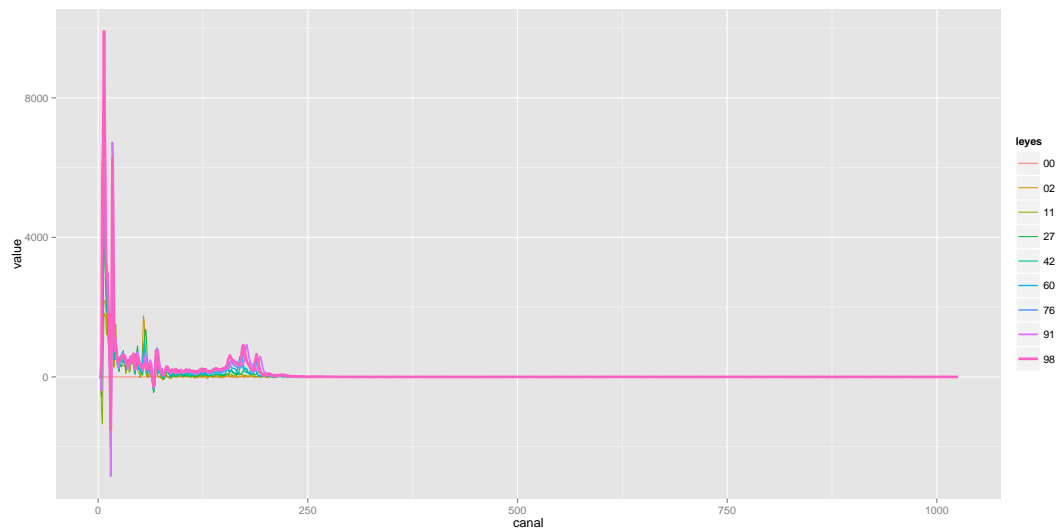


Figura 5.27: Espectros acumulados sin fondo C_100_NaI3x3_sf

De las gráficas de los espectros acumulados sin fondo para el ciclo 100 y de los fondos respectivos se sacan las siguientes conclusiones:

- El eje de ordenadas disminuye considerablemente su rango positivo pero ahora lo tiene ampliamente negativo.
- Al restar el fondo las gráficas no se simplifican. Se debe a que el canal de detección de las cuentas varía ligeramente entre ensayos lo que hace que no se resten los fondos correspondientes a cada canal.
- Por lo anterior, la confusión en la zona de ruido, 150 primeros canales, no sólo no se elimina si no que aparece más confusa ya que, debido a la gran rampa de las gráficas en esa zona, el que unas veces se detecten las cuentas en unos canales y otras en otros, una ligera diferencia en los canales hace que la curva sea negativa en esa zona.
- En la réplica C con NaI2x2 se ve que las discrepancias detectadas con ley 02 en en los espectros acumulados con fondo se aprecia mejora hora. Y ahora se aprecian claramente problemas en el registro de los espectros de las muestras 11, 27, 42, 60 y 76.
- En los ensayos con NaI3x3 se aprecian mejor los errores y se ve que en la réplica C hubo menor desalineación y se aprecian las colinas de los picos pero desalineadas las de unas muestras, hechas en distintos ensayos, con otras.

- En definitiva, el análisis de los espectros sin fondo no supone una mayor sencillez, pues las gráficas no se simplifican. Posteriormente se verá si la simplificación se produce con espectros unitarios medios, es decir, sin cuentas acumuladas, sólo con las cuentas de cada ciclo, ya que al promediar los espectros unitarios de cada grupo de 145 ciclos debería producirse una alineación de los fondos medios.

5.5. Parametrización de los espectros en intervalos. Funciones de correlación con análisis químicos

5.5.1. Correlación de un intervalo único

Las funciones de correlación a utilizar con los análisis químicos de CaF_2 y SiO_2 se dan en [Código 5.29](#).

Código 5.29: R2.CaF2 y R2.SiO2

```
# Funciones de análisis a introducir en lista.FUN().

R2.CaF2 <- function(data)
  as.numeric(cor(data[, 7 : ncol(data)],
                 data$CaF2) ^ 2)

R2.SiO2 <- function(data)
  as.numeric(cor(data[, 7 : ncol(data)],
                 data$SiO2) ^ 2)
```

Estas funciones, y cualquier otra que se pudiera definir posteriormente, se utilizarán dentro de la función *lista.FUN(lista, grupo, FUN)*, [Código 5.30](#), que las aplica a una lista de dataframes similares a las de las tablas [Cuadro 5.6](#) y [Cuadro 5.7](#), resultado de agrupar por detector, ciclo y réplica.

Código 5.30: lista.FUN(lista, grupo, FUN)

```
# Función para aplicar una de análisis a una lista con la estructura
# dada por 'lista_lista.sf' con los parámetros obtenidos.

lista.FUN <- function(lista, grupo, FUN) {
  FUN <- match.fun(FUN)
  lapply(lista, ddply, grupo, FUN)
}
```

Primero se verá la aplicación de la función de correlación a un intervalo único definido por un comienzo y final mediante *FUN.intervalo(data, inicio, final, FUN)*. [Código 5.31](#).

Código 5.31: FUN.intervalo(data, inicio, final, FUN)

```
# Función para aplicar análisis a los parámetros
# del intervalo definido.

FUN.intervalo <- function(data, inicio, final, FUN) {
  FUN <- match.fun(FUN)

  # Vector integer de parámetros (suma cuentas
  # intervalo):
  parametros <- sapply(data$espectro,
    function(vector)
      sum(vector[inicio:final]))

  # dataframe con parámetros con fondo.
  # Columnas identificación y columna de parámetros.
  df.cf <- data.frame(data[, -ncol(data)],
    parametros)

  # Lista agrupada por CRD. Parámetros sin corregir
  # fondo
  lista <- split(df.cf, list(df.cf$ciclo,
    df.cf$replica,
    df.cf$detector))

  # lista de parámetros con corrección de fondo
  lista.sf <- lista_lista.sf(lista)

  # Aplicamos la función:
  lista <- lista.FUN(lista,
    .(ciclo, replica,
      detector),
    FUN)
  lista.sf <- lista.FUN(lista.sf,
    .(ciclo, replica,
      detector),
    FUN)
```

```

# Rehacemos la dataframe con columnas para los
# resultados de aplicar la función con y sin fondo
# library(plyr)

df.cf <- rbind.fill(lista)
df.sf <- rbind.fill(lista.sf)

# nombre de la columna del intervalo con fondo
intervalo <- paste("[" , inicio, " , final, "]",
                  sep = "")

# nombre de la columna del intervalo con fondo
intervalo.sf <- paste("sf-", intervalo, sep = "")

names(df.cf) <- c(names(df.cf)[-ncol(df.cf)],
                 intervalo)
names(df.sf) <- c(names(df.sf)[-ncol(df.sf)],
                 intervalo.sf)

# Unimos en una única dataframe:
df <- join(df.cf, df.sf)

return(df)
}

df3 <- FUN.intervalo(exp.conj.acum.cf, 559, 746, R2.CaF2)

df3[df3$replica == "A" & df3$ciclo == "100" & df3$detector == "BGO", ]

```

A continuación se definirá una nueva función *total.intervalo(data, inicio, final, FUN)*, Código 5.32, que permitirá obtener en un solo paso los parámetros que da *prm.intervalo*, Código 5.21, y las correlaciones de *FUN.intervalo(data, inicio, final, FUN)* en una lista con las dos dataframe correspondientes. No se hace en una única dataframe porque, como se ve en el Cuadro 5.8, las correlaciones dan, para cada grupo de leyes correspondientes a un detector, ciclo y réplica, un único dato de correlación R^2 .

ciclo	replica	detector	[559, 746]	sf-[559, 746]
100	A	BGO	0.9948943	0.9948943

Cuadro 5.8: exp.conj.acum.cf - Correlación CaF_2 - [559,746]

Las funciones *prm.intervalo*, Código 5.21, y *FUN.intervalo*, Código 5.31, se pueden agrupar en una función única, *total.intervalo(data, inicio, final, FUN)*, Código 5.32.

Código 5.32: *total.intervalo(data, inicio, final, FUN)*

```
# 'prm.intervalo' y 'FUN.intervalo' se pueden
# agrupar en una función que nos dé parámetros y
# resultados de FUN en una única lista con dos
# dataframe: parámetros y resultado de función

total.intervalo <- function(data, inicio, final, FUN) {
  FUN <- match.fun(FUN)

  # Vector integer de parámetros (suma cuentas
  # intervalo):
  parametros <- sapply(data$espectro,
                      function(vector)
                        sum(vector[inicio:final]) )

  # dataframe con parámetros con fondo.
  # Columnas identificación y columna de parámetros.
  df.cf <- data.frame(data[, -ncol(data)],
                    parametros)

  # Lista agrupada por CRD. Parámetros sin corregir
  # fondo
  lista <- split(df.cf, list(df.cf$ciclo,
                          df.cf$replica,
                          df.cf$detector))

  # lista de parámetros con corrección de fondo
  lista.sf <- lista_lista.sf(lista)

  # Aplicamos la función:
  lista.fnc <- lista.FUN (lista,
                        .(ciclo, replica,
                          detector),
                        FUN)
  lista.fnc.sf <- lista.FUN (lista.sf,
                          .(ciclo, replica,
```

```
        detector),
        FUN)

# Rehacemos la dataframe con columnas para los
# resultados de aplicar la función con y sin fondo
# library(plyr)
# df.c no hace flata formarla a partir de lista
# pues lista se formó a partir de ella.

df.sf <- rbind.fill(lista.sf)
df.fnc.cf <- rbind.fill(lista.fnc)
df.fnc.sf <- rbind.fill(lista.fnc.sf)

# nombre de la columna del intervalo con fondo
intervalo <- paste("[" , inicio, " , " , final, "]",
                  sep = "")

# nombre de la columna del intervalo con fondo
intervalo.sf <- paste("sf-", intervalo, sep = "")

# Nombramos las columnas de los parámetros y
# resultado de FUN y unimos las df cf y sf.
names(df.cf) <- c(names(df.cf)[-ncol(df.cf)],
                 intervalo)
names(df.sf) <- c(names(df.sf)[-ncol(df.sf)],
                 intervalo.sf)
df <- join(df.cf, df.sf)

names(df.fnc.cf) <- c(names(df)[2:4],
                     intervalo)
names(df.fnc.sf) <- c(names(df)[2:4],
                     intervalo.sf)
df.fnc <- join(df.fnc.cf, df.fnc.sf)

# Formamos una lista para poder devolver las
# dos dataframe.

ls <- list(df, df.fnc)

return(ls)
}
```

Esta función permite obtener de la lista de dataframes tablas como [Cuadro 5.5](#) y [Cuadro 5.8](#), por lo que no es necesario exponer un ejemplo del resultado. [Código 5.33](#) permite obtener dichas tablas.

Código 5.33: `total.intervalo(exp.conj.acum.cf, 559,746, R2.CaF2)`

```
ls <- total.intervalo(exp.conj.acum.cf, 559,746, R2.CaF2)

ls[[1]][ls[[1]]$replica == "A" &
        ls[[1]]$ciclo == "100" &
        ls[[1]]$detector == "BGO", ]

ls[[2]][ls[[2]]$replica == "A" &
        ls[[2]]$ciclo == "100" &
        ls[[2]]$detector == "BGO", ]
```

5.5.2. Correlación de n intervalos

Los métodos desarrollados en [Sección 5.3](#) y [Sección 5.5](#) permiten, para todos los espectros de la base de datos *exp.conj.acum.cf* u otra de estructura similar, calcular los parámetros de un intervalo determinado por un inicio y final y su correlación con los análisis químicos de las muestras.

El problema para el análisis de espectros es que no hay un criterio objetivo para la determinación de sus límites, si no que se escoge de acuerdo con el criterio del investigador al analizar las gráficas de los espectros teniendo en cuenta la energía asociada a los canales tras su calibración y conociendo los picos de energía de las reacciones de decaimiento γ correspondientes al elemento que desea cuantificar. Por tanto, distintas personas pueden escoger distintos intervalos al no existir un método objetivo para su selección.

Se desarrollará un sistema de localización objetiva que lleve al intervalo óptimo en función del elemento que se pretenda analizar independientemente de la calibración de los canales. Para ellos se necesita dividir el espectro en un determinado número de intervalos y calcular sus parámetros y correlaciones, buscando el intervalo de mejor correlación y continuar el proceso iterativamente sobre cada intervalo seleccionado en el paso anterior.

Tesis anteriores, [Sección 2.5](#), han demostrado que es posible analizar por el método de activación neutrónica el contenido en flúor de muestras de fluorita. En esta tesis, [Sección 3.1](#), se ha demostrado que, teóricamente, es posible analizar con el mismo método el contenido en sílice de dichas muestras por existir un pico de energía, 1778.85 keV, que la caracteriza, en ausencia de fósforo, de manera única y que, en

[Sección 5.2](#), visualmente se asocia en la gráfica del espectro con la colina entre los canales 210–235.

Tal como parece, esta relación biunívoca entre picos de energía del decaimiento γ de los productos de activación neutrónica y los elementos químicos originarios debe permitir, de manera objetiva, localizarlos en el espectro sin que dependa de cada persona la elección de los límites del mejor intervalo para su determinación. De hecho, el intervalo anterior, 210–235, es aproximado y, de igual modo, se podía haber elegido 200–230. No debería haber un intervalo de otra zona con mejor correlación aunque, de ser así, nada impide utilizarlo para el análisis de un elemento si se demostrase que, efectivamente, esa zona del espectro determina el contenido con precisión y no por puro azar.

División del espectro en un número determinado n de intervalos iguales

Cargamos las librerías de R que se van a necesitar y se definen parámetros relacionados con el número de canales utilizado en el registro de los espectros. Cambiando en [Código 5.34](#) el parámetro *channels*, si se utiliza un número de canales diferente, no es necesario hacerlo en otras partes del programa.

Código 5.34: Parámetro número de canales.

```
# Parámetros y librerías
library(Hmisc) # cut2, latexTabular
library(plyr) # ddply
# plyr no se necesitaría pues ya se ha cargado antes.
library(reshape2) # melt

channels <- 1025
canales <- c(1, channels)
```

Dos funciones, *cortar*(n , *offset* = 0) y *cortar.off*(n , *offset* = 1), [Código 5.35](#), nos permitirán obtener el número de cortes n deseado, con y sin *offset*.

Código 5.35: *cortar*(n , *offset*), *cortar.off*(n , *offset*)

```
# Funciones para hacer cortes en un número de
# intervalos del espectro.
# Utilizaremos cortar(n) para dividir el
# espectro en un número dado de intervalos y
# cortar.off(n) para desplazar los intervalos
# anteriores medio intervalo y así asegurar que una
# zona que pudiera ser de interés no sea
```

```

#   despreciada por haber quedado dividida al estar
#   en los extremos de un intervalo originario.

cortar <- function(n, offset = 0) {
  s <- channels %/% n
  p.corte <- canales

  for ( i in 1: (n - 1)) {
    p <- i * s
    p.corte <- append(p.corte, p, i)
  }

  return(p.corte)
}

cortar.off<- function(n, offset = 1) {
  s <- channels %/% n
  p.corte <- canales

  for ( i in 1: (n - 1)) {
    p <- i * s
    p.corte <- append(p.corte, p, i)
  }

  if (offset != 0) {
    offset <- s %/% 2
    p.corte <- append (canales, p.corte[-length(p.corte)] + offset, 1)
  }

  return(p.corte)
}

```

Cálculo de parámetros de n intervalos

La función `df.total(data, n, fondo = 1, prm = 1, FUN = R2.SiO2)`, [Código 5.42](#), permitirá calcular los parámetros (suma de las cuentas en los canales de un intervalo), o las correlaciones de éstos con análisis químicos de las muestras, por defecto con los análisis de SiO_2 , para un número creciente de intervalos resultante de dividir el espectro en mayor número de franjas cada vez.

Se introducirán unas funciones, que se pueden utilizar por sí mismas, pero que

se utilizarán dentro de la función $df.FUN(data, n_chunk, fondo, prm, FUN)$ que será aplicada reiteradamente dentro de la función $df.total(data, n, fondo = 1, prm = 1, FUN = R2.SiO2)$.

En [Código 5.35](#) ya se han definido las funciones para dividir el espectro en un número dado de intervalos logrando una serie de *cortes*. A estos *cortes* aplicaremos la función $sum()$ de R, dentro de una función, $parametrizar(vetor)$, que permite aplicarla a todos los cortes de cada espectro. Y esta última función la utilizaremos dentro de otra, $df.esp_list.param(data, cortes)$, [Código 5.36](#), que la aplicará a todos los espectros de la base de datos del tipo *exp.conj.acum.cf*.

Código 5.36: $df.esp.list.param(data, cortes)$

```
# Función para obtener la suma de las cuentas en
# cada intervalo de corte y agrupar los resultados
# por listas para correspondientes a las muestras
# (leyes) de cada detector, replica y ciclo.

df.esp_list.param <- function(data, cortes) {
  parametrizar <- function(vector)
    rapply(split(vector, cortes), sum)

  parametros <- data.frame(t(sapply(data$espectro,
    parametrizar)))

  names(parametros) <- levels(cortes)
  data_param <- cbind(data[, -ncol(data)],
    parametros)
  split(data_param, list(data_param$ciclo,
    data_param$replica,
    data_param$detector))
}
```

A la base de datos con estructura de lista, resultante de aplicar la función anterior a *exp.conj.acum.cf*, $df.esp_list.param(data, cortes)$, podemos aplicarle la función $lista_lista.sf(lista)$ para corregir el fondo o bien crear una nueva función que lo haga en un solo paso, $df.esp_list.param.sf(data, cortes)$. [Código 5.37](#).

Código 5.37: $df.esp_list.param.sf(data, cortes)$

```
# 'df.esp_list.param' y 'lista_lista.sf' se pueden
# agrupar en una única función que nos lleve de la
# dataframe 'exp.conj.acum.cf' a una lista con los
# fondos corregidos.
```

```
df.esp_list.param.sf <- function(data, cortes) {
  LRC <- df.esp_list.param(data = data,
                           cortes = cortes)
  LRC.sf <- lista_lista.sf(lista = LRC)
}
```

Estas funciones serán utilizadas dentro de `df.FUN(data, n_chunk, fondo, prm, FUN)`, Código 5.41, capaz de calcular parámetros y correlaciones según los argumentos introducidos. Pero previamente, y dado que la función calculará éstos para un elevado número de intervalos, se crearán unas funciones auxiliares, `df.id.prm(lista, n, p.corte, cortes)`, Código 5.39, y `df.id.fnc(lista, n, p.corte, cortes)`, Código 5.40, que, según se hayan calculado parámetros o se haya aplicado una función de análisis de los mismos, identifiquen en nuevas columnas el inicio y final de cada intervalo y a qué número de cortes del espectro pertenece. Para ello se utilizará dentro de ellas la función `cambiar(vector, nuevo, viejo)`, Código 5.38, que permitirá crear unas nuevas columnas de identificación que colocarán en el lugar del intervalo bien el inicio bien el final del mismo.

Código 5.38: `cambiar(vector, nuevo, viejo)`

```
# Función para sustituir los elementos de un vector
# por otros.
# Se trata de sustituir los elementos de v, o una
# copia, por los de x, estableciendo una relación
# x - y.
# x[match(v, y)] o simplificando para ciertos
# casos z[v]
# v: vector con los valores correspondientes a
# elementos antiguos
# v <- c(3, 2, 5, 1, 2)
# y: vector de elementos antiguos.
# y <- c(1, 2, 3, 4, 5)
# x: vector de elementos nuevos.
# x <- c(10, 20, 30, 40, 50)

cambiar <- function(vector, nuevo, viejo) {
  nuevo[match(vector, viejo)]
}

# Simplificando w <- nuevo[vector]
```

La función de identificación de inicio, final de intervalo y número de intervalos en que se ha dividido el espectro para obtener los parámetros en ese intervalo, `df.id.prm(lista, n, p.corte, cortes)`, se define en [Código 5.39](#).

Código 5.39: `df.id.prm(lista, n, p.corte, cortes)`

```
# Si se trata de la dataframe de parámetros la función
# de identificación cambia pues están todas las columnas
# y, además, no se renombraron automáticamente las
# iniciales, por lo que no es necesario renombrarlas.

df.id.prm <- function(lista, n, p.corte, cortes) {
  intervalos <- levels(cortes)
  df <- rbind.fill(lista)

  # Nueva columna al final con el número de
# intervalos en que se divide el espectro:
  df$n.chunk <- n

  # Fundimos la dataframe para que tenga variables
# de identificación y una columna de valores.
  df <- melt(df, id = c("leyes", "ciclo", "replica",
                      "detector", "CaF2", "SiO2",
                      "n.chunk"), na.rm = TRUE)

  # Añadimos una columna con el inicio del intervalo.
  df$i.chunk <- cambiar(df$variable,
                       p.corte[-length(p.corte)],
                       intervalos)
  # Añadimos otra columna con el final del intervalo.
  df$f.chunk <- cambiar(df$variable, p.corte[-1],
                       intervalos)

  # Reordenamos para que las columnas 'variable' y
# 'value' sean las últimas.
  df <- df[c(1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 10, 11, 8, 9)]
  return(df)
}
```

La función de identificación de inicio, final de intervalo y número de intervalos, `df.id.fnc(lista, n, p.corte, cortes)`, en que se ha dividido el espectro para obtener las correlaciones de los parámetros en ese intervalo o la función de análisis que se les

haya aplicado, se define en [Código 5.40](#).

Código 5.40: `df.id.fnc(lista, n, p.corte, cortes)`

```
# Funciones de identificación del intervalo con y
# sin fondo. Habrá una función para identificar el
# intervalo según se trate de parámetros o de
# resultados de aplicar una función a éstos.

df.id.fnc <- function(lista, n, p.corte, cortes) {
  intervalos <- levels(cortes)
  df <- rbind.fill(lista)
  # Nueva columna al final con el número de
  # intervalos en que se divide el espectro:
  df$n.chunk <- n
  names(df) <- c(names(df)[1:3], intervalos,
                "n.chunk")

  # Fundimos la dataframe para que tenga variables
  # de identificación y una columna de valores.

  df<- melt(df, id = c("replica", "ciclo",
                     "detector", "n.chunk"),
           na.rm = TRUE)
  # Añadimos una columna con el inicio del intervalo.
  df$i.chunk <- cambiar(df$variable,
                      p.corte[-length(p.corte)],
                      intervalos)
  # Añadimos otra columna con el final del intervalo.
  df$f.chunk <- cambiar(df$variable, p.corte[-1],
                      intervalos)
  # Reordenamos para que las columnas 'variable' y
  # 'value' sean las últimas.
  df <- df[c(1, 2, 3, 4, 7, 8, 5, 6)]

  return(df)
}
```

Con estas funciones ya se puede definir una nueva función `df.FUN(data, n_chunk, fondo, prm, FUN)`, [Código 5.41](#), que calculará para los n intervalos en que se haya definido el espectro sus parámetros o aplicará una función FUN de análisis.

Código 5.41: df.FUN(data, n_chunk, fondo, prm, FUN)

```

# Función para obtener df de aplicar FUN a
# data = exp.conj.acum con un número de cortes dado.

# fondo = 1 (con fondo)
# fondo = 0 (sin fondo)
#
# prm = 1 (parámetros), 0 (función)
# FUN = R2.CaF2, R2.SiO2, etc.
# (función a aplicar: R2, cor, etc.)
# Si solo se buscan parámetros no llega a aplicarse
# pues no es necesario.

df.FUN <- function(data, n_chunk, fondo, prm, FUN) {
  FUN <- match.fun(FUN)

  p.corte1 <- cortar(n_chunk)
  # offset desplaza los intervalos anteriores
  # medi intervalo
  p.corte2 <- cortar.off(n_chunk)

  cortes1 <- cut2( 1 : channels, p.corte1)
  cortes2 <- cut2( 1 : channels, p.corte2)

  # Parámetros con fondo (por defecto):
  # Para cualquier elección, prm o FUN,
  # hay que obtenerlos:
  lista <- df.esp_list.param(data, cortes1)
  lista.off <- df.esp_list.param(data, cortes2)

  # Parámetros sin fondo:
  if (fondo == 0) {
    lista <- lista_lista.sf(lista)
    lista.off <- lista_lista.sf(lista.off)
  }

  # Aplicamos la función:
  if (prm != 1) {
    lista <- lista.FUN (lista,
                       .(ciclo, replica,
                         detector),
                       FUN)
    lista.off <- lista.FUN (lista.off,

```

```
        .(ciclo, replica,
          detector),
        FUN)
  }
  # Convertimos la lista a dataframe y renombramos
  # las columnas: después de añadir columnas para
  # la identificación del número de cortes
  # e intervalo de corte.

  # Aquí se usaba df.nombrada. df.id incluye
  # df.nombrada y la parte siguiente del programa
  # que añade identificación del intervalo.
  # Debe distinguirse según se aplique la
  # identificación a parámetros o después de
  # aplicar una función agrupando por grupos de leyes

  if (prm == 1) {
    df <- df.id.prm(lista, n_chunk,
                   p.cortel, cortes1)

    df.off <- df.id.prm(lista.off, n_chunk,
                       p.corte2, cortes2)
  }
  else {
    df <- df.id.fnc(lista, n_chunk,
                   p.cortel, cortes1)

    df.off <- df.id.fnc(lista.off, n_chunk,
                       p.corte2, cortes2)
  }

  # Para un ciclo no unimos los cortes con offset
  # pues no tiene sentido.
  if (n_chunk > 1) {
    DF <- rbind(df, df.off)
  }
  else
    DF <- df.fcn

  return(df)
}
```


Como se ha dicho, se pretende obtener los parámetros y/o sus correlaciones para un rango de división de intervalos cada vez mayor. Esto lo logramos con `df_total(data, n, FUN)`, [Código 5.42](#), que utilizará la función anterior, `df.FUN(data, n_chunk, fondo, prm, FUN)`, con un número creciente de divisiones de los espectros.

Código 5.42: `df.total(data, n, fondo = 1, prm = 1, FUN = R2.SiO2)`

```
# Función para hacer progresivamente la división
# del espectro en un número de intervalos cada vez
# mayor y aplicar df.FUN() para obtener los
# parámetros y análisis.
# Si se quiere, se puede modificar fácilmente para
# que no comience en 1 bien cambiando el 1 en el
# bucle for() o introduciendo en los argumentos de
# la función los límites del bucle mencionado,
# n_min y n_max.
# fondo = 1 (con fondo, por defecto)
# fondo = 0 (sin fondo)
#
# prm = 1 (parámetros), 0 (función)
# FUN = R2.CaF2, R2.SiO2, etc.
# (función a aplicar: R2, cor, etc.)
# Si solo se buscan parámetros no llega a aplicarse
# pues no es necesario.

df.total <-
  function (data, n, fondo = 1, prm = 1, FUN = R2.SiO2)
  {
    FUN <- match.fun(FUN)
    for ( i in 1 : n) {
      df_i <- df_FUN(data, i, fondo = fondo,
                    prm = prm,
                    FUN = FUN)
      if ( i == 1) DF <- df.i
      else DF <- rbind(DF, df.i)
    }
    return (DF)
  }
```

La función anterior `df_total(data, n, fondo = 1, prm = 0, FUN)` por defecto calcula los parámetros con fondo y no necesita aplicar la función por defecto `FUN =`

R2.SiO2. Si se quieren calcular los parámetros de todos los intervalos desde 1 a 10, sin fondo, aplicaríamos la función de como se indica en [Código 5.43](#).

Código 5.43: P10.sf

```
P10.sf <- df.total(experimentos, 10, fondo = 0)
```

Puede plantear problemas de memoria la obtención de los parámetros de todas las divisiones de 1 a 50 intervalos para un elevado número de espectros espectros, en nuestro caso 11745. No ocurre así cuando se calculan correlaciones, ya que las bases de datos intermedias son 9 veces más pequeñas, pues solamente se obtiene un dato por cada grupo de 9 leyes (o las que se hubiesen ensayado). Por ésto, para la obtención de los parámetros de 1 a 50 intervalos, se hace por tramos, modificando los intervalos a que se aplica *df_total(data, n, fondo = 1, prm = 0, FUN)*, uniéndolos posteriormente tal como se expone en el caso de parámetros con fondo, [Código 5.44](#).

Código 5.44: P50.cf

```
P10.cf <- df.total(exp.conj.acum.cf, 10)
```

```
df.total <- function (data, n, fondo = 1, prm = 1,
                     FUN = R2.SiO2) {
  FUN <- match.fun(FUN)
  for ( i in 11 : n) {
    df_i <- df_FUN(data, i, fondo = fondo,
                  prm = prm,
                  FUN = FUN)
    if ( i == 11) DF <- df.i
    else DF <- rbind(DF, df.i)
  }
  return (DF)
}
```

```
P11.20.cf <- df.total(exp.conj.acum.cf, 20)
```

```
df.total <- function (data, n, fondo = 1, prm = 1, FUN = R2.SiO2) {
  FUN <- match.fun(FUN)
  for ( i in 21 : n) {
    df_i <- df_FUN(data, i, fondo = fondo,
                  prm = prm,
                  FUN = FUN)
    if ( i == 21) DF <- df.i
```

```
      else DF <- rbind(DF, df.i)
    }
    return (DF)
  }

P21.30.cf <- df.total(exp.conj.acum.cf, 30)

df.total <- function (data, n, fondo = 1, prm = 1, FUN = R2.SiO2) {
  FUN <- match.fun(FUN)
  for ( i in 31 : n) {
    df_i <- df_FUN(data, i, fondo = fondo,
                   prm = prm,
                   FUN = FUN)
    if ( i == 31) DF <- df.i
    else DF <- rbind(DF, df.i)
  }
  return (DF)
}

P31.40.cf <- df.total(exp.conj.acum.cf, 40)

df.total <- function (data, n, fondo = 1, prm = 1, FUN = R2.SiO2) {
  FUN <- match.fun(FUN)
  for ( i in 41 : n) {
    df_i <- df_FUN(data, i, fondo = fondo,
                   prm = prm,
                   FUN = FUN)
    if ( i == 41) DF <- df.i
    else DF <- rbind(DF, df.i)
  }
  return (DF)
}

P41.45.cf <- df.total(exp.conj.acum.cfs, 45)

df.total <- function (data, n, fondo = 1, prm = 1, FUN = R2.SiO2) {
  FUN <- match.fun(FUN)
  for ( i in 46 : n) {
    df_i <- df_FUN(data, i, fondo = fondo,
                   prm = prm,
                   FUN = FUN)
    if ( i == 46) DF <- df.i
    else DF <- rbind(DF, df.i)
  }
}
```

```

    }
    return (DF)
  }
P46.50.cf <- df.total(exp.conj.acum.cf, 50)
P50.cf <- rbind(P10.cf, P11.20.cf, P21.30.cf,
               P31.40.cf, P41.45.cf, P46.50.cf)

```

El [Cuadro 5.9](#) y [Cuadro 5.10](#), obtenidos con el [Código 5.45](#), muestran, como ejemplo, las 9 últimas filas de las divisiones en 7 intervalos con y sin fondo. Se puede observar claramente la eliminación del fondo de una respecto a la otra.

Código 5.45: Muestra tablas P10.cf y P10.sf

```

tail(P10.cf[P10.cf$n.chunk==7, ], 9)
tail(P10.sf[P10.sf$n.chunk==7, ], 9)

```

leyes	ciclo	replica	detector	CaF2	SiO2	n.chunk	i.chunk	f.chunk	variable	value
00	145	C	NaI3x3	0.00	75.42	7	876	1025	[876,1025]	149
02	145	C	NaI3x3	2.28	38.23	7	876	1025	[876,1025]	150
11	145	C	NaI3x3	11.39	55.17	7	876	1025	[876,1025]	165
27	145	C	NaI3x3	27.05	36.88	7	876	1025	[876,1025]	147
42	145	C	NaI3x3	42.05	25.26	7	876	1025	[876,1025]	140
60	145	C	NaI3x3	59.92	14.06	7	876	1025	[876,1025]	155
76	145	C	NaI3x3	76.50	5.04	7	876	1025	[876,1025]	149
91	145	C	NaI3x3	90.98	0.92	7	876	1025	[876,1025]	135
98	145	C	NaI3x3	97.60	0.00	7	876	1025	[876,1025]	159

Cuadro 5.9: P10.cf - cola con n.chunk = 7

Análogamente, podrían obtenerse los parámetros sin fondo, de los intervalos de 1 a 10 como ejemplo, [Código 5.46](#), indicando en los argumentos de la función que corrija el fondo (fondo = 0). Realmente, no se llega a usar esta enorme base de datos de parámetros, pues sólo se necesitan los resultados de aplicar *FUN* para obtener conclusiones y, caso de ser necesario, obtendríamos los parámetros de los intervalos óptimos que pretendemos localizar.

Código 5.46: P10.sf - df.total(experimentos, 10, fondo = 0)

```

P10.sf <- df.total(experimentos, 10, fondo = 0)

```

leyes	ciclo	replica	detector	CaF2	SiO2	n.chunk	i.chunk	f.chunk	variable	value
00	145	C	NaI3x3	0.00	75.42	7	876	1025	[876,1025]	0
02	145	C	NaI3x3	2.28	38.23	7	876	1025	[876,1025]	1
11	145	C	NaI3x3	11.39	55.17	7	876	1025	[876,1025]	16
27	145	C	NaI3x3	27.05	36.88	7	876	1025	[876,1025]	-2
42	145	C	NaI3x3	42.05	25.26	7	876	1025	[876,1025]	-9
60	145	C	NaI3x3	59.92	14.06	7	876	1025	[876,1025]	6
76	145	C	NaI3x3	76.50	5.04	7	876	1025	[876,1025]	0
91	145	C	NaI3x3	90.98	0.92	7	876	1025	[876,1025]	-14
98	145	C	NaI3x3	97.60	0.00	7	876	1025	[876,1025]	10

Cuadro 5.10: P10.sf - cola con n.chunk = 7

Si sólo se quiere aplicar *FUN* para obtener los resultados de las correlaciones sin necesidad de la base de datos con los parámetros, las funciones *df_total(data, n, fondo = 1, prm = 0, FUN)* y *df.FUN(data, n_chunk, fondo, prm, FUN)*, pueden ser definidas con una función de identificación también simplificada, *df.nombrada(lista, n, cortes)*. La función simplificada *df_total(data, n, FUN)*, [Código 5.47](#), requiere menos argumentos.

Código 5.47: *df_total(data, n, FUN)*

```
# Función para poner los nombres de los intervalos
# a las columnas correspondientes de los parámetros
# a los que se aplicó la FUN.
df.nombrada <- function(lista, n, cortes) {
  intervalos <- levels(cortes)
  df <- rbind.fill(lista)
# Nueva columna al final con el número de intervalos
# en que se divide el espectro:
  df$n_chunk <- n
  names(df) <- c(names(df)[1:3],
                levels(cortes),
                "n_chunk")
  return(df)
}

# Función para obtener df de aplicar FUN a
# data = espectros con un número de cortes dado.
df_FUN <- function(data, n_chunk, FUN) {
  FUN <- match.fun(FUN)
  p.cortel <- cortar(n_chunk)
```

```

p.corte2      <- cortar.off(n_chunk)
cortes1      <- cut2( 1 : channels, p.corte1)
cortes2      <- cut2( 1 : channels, p.corte2)
lcf          <- df.esp_list.param(data, cortes1)
lcf.offset   <- df.esp_list.param(data, cortes2)
lcf_FUN      <- lista.FUN (lcf, .(ciclo, replica,
                             detector), FUN)

lcf.offset_FUN <- lista.FUN (lcf.offset,
                             .(ciclo, replica,
                                detector), FUN)

df_FUN       <- df.nombrada(lcf_FUN, n_chunk,
                             cortes1)

df.offset_FUN <- df.nombrada(lcf.offset_FUN,
                             n_chunk, cortes2)

df_molten    <- melt(df_FUN,
                    id = c("replica", "ciclo",
                           "detector",
                           "n_chunk"),
                    na.rm = TRUE)

# Añadimos una columna con el inicio del
# intervalo.
df_molten$i_chunk <-
  cambiar(df_molten$variable,
          p.corte1[-length(p.corte1)],
          levels(cortes1))

# Añadimos otra columna con el final del
# intervalo.
df_molten$f_chunk <-
  cambiar(df_molten$variable,
          p.corte1[-1],
          levels(cortes1))

# Reordenamos para que la columna 'value'
# sea la última.
df_molten <- df_molten[c(1, 2, 3, 4, 7, 8, 5, 6)]
df.offset_molten <- melt(df.offset_FUN,
                        id = c("replica",
                               "ciclo",
                               "detector",
                               "n_chunk"),
                        na.rm = TRUE)

# Añadimos una columna con el inicio del
# intervalo.
df.offset_molten$i_chunk <-

```

```

        cambiar(df.offset_molten$variable,
                p.corte2[-length(p.corte2)],
                levels(cortes2))
# Añadimos otra columna con el final del
# intervalo.
df.offset_molten$f_chunk <-
        cambiar(df.offset_molten$variable,
                p.corte2[-1],
                levels(cortes2))
# Reordenamos para que las columnas 'variable' y
# 'value' sea la última.
df.offset_molten <-
        df.offset_molten[c(1, 2, 3, 4, 7, 8, 5, 6)]
if (n_chunk > 1) {
        df_n <- rbind(df_molten, df.offset_molten)
}
else
        df_n <- df_molten
return(df_n)
}

df_total <- function (data, n, FUN) {
  FUN <- match.fun(FUN)
  for ( i in 1 : n) {
    df_i <- df_FUN(data, i, FUN = FUN)
    if ( i == 1) DF <- df_i
    else DF <- rbind(DF, df_i)
  }
  return (DF)
}

```

Con $df_total(data, n, FUN)$, función simplificada, se podrían obtener todas las correlaciones de todos los intervalos, con y sin offset, resultantes de dividir los espectros desde 1 a 50 intervalos. [Código 5.48](#).

Código 5.48: DF_50.CaF2.cf, DF_50.SiO2.cf

```

DF_50.CaF2.cf <- df_total(exp.conj.acum.cf, 50, R2.CaF2)
DF_50.SiO2.cf <- df_total(exp.conj.acum.cf, 50, R2.SiO2)

```

Estas 2 bases de datos, de las que se puede ver una muestra en [Cuadro 5.11](#) y [Cuadro 5.12](#), serán las que se utilizarán para localizar los intervalos óptimos para determinar los contenidos en sílice y flúor de muestras de fluorita.

No se utilizarán las correlaciones de los parámetros sin fondo porque, como se ve en el extracto presentado en el [Cuadro 5.8](#), los valores de R^2 son idénticos. Esto indica que se va por el buen camino en cuanto al método de localización de un intervalo óptimo pues no se ve afectado por el fondo, que puede considerarse como una constante que se desprecia a la hora de las correlaciones entre parámetros y análisis químicos.

Se podría haber seguido aumentando el número de intervalos o, lo que es lo mismo, disminuyendo su tamaño, pero se considera que intervalos de 20 canales (50 divisiones) son suficientes para el propósito buscado. Nada impide aplicar las funciones anteriores con $n_chunk > 50$, pero requerirá un tiempo de computación considerable, pues ya con $n_chunk = 1 - 50$ se requiera casi una hora de computación.

replica	ciclo	detector	n.chunk	i.chunk	f.chunk	variable	value
A	002	BGO	1	1	1025	[1,1025)	0.1690791
A	003	BGO	1	1	1025	[1,1025)	0.3697591
A	004	BGO	1	1	1025	[1,1025)	0.5424308
A	005	BGO	1	1	1025	[1,1025)	0.6592027
A	006	BGO	1	1	1025	[1,1025)	0.7395954
A	007	BGO	1	1	1025	[1,1025)	0.7902229
...

Cuadro 5.11: DF_50.CaF2.cf

replica	ciclo	detector	n.chunk	i.chunk	f.chunk	variable	value
A	002	BGO	1	1	1025	[1,1025)	0.2439810
A	003	BGO	1	1	1025	[1,1025)	0.3139816
A	004	BGO	1	1	1025	[1,1025)	0.3479170
A	005	BGO	1	1	1025	[1,1025)	0.3508535
A	006	BGO	1	1	1025	[1,1025)	0.3452080
A	007	BGO	1	1	1025	[1,1025)	0.3324080
...

Cuadro 5.12: DF_50.SiO2.cf

5.6. Determinación de intervalos óptimos

5.6.1. Procedimiento

Ahora se determinarán cuáles son los intervalos con mayor R^2 de cada división en un número de intervalos crecientes de 1 a 50, agrupando las bases de datos con los R^2 de las correlaciones entre parámetros con fondo y contenidos en sílice o flúor, *DF_50.SiO2.cf* y *DF_50.CaF2.cf*.

El concepto, sencillo y aparentemente fácil, es crear un algoritmo que seleccione ese intervalo óptimo de cada grupo de divisiones.

Inicialmente se intentó aplicar *ddply()* de *plyr*, pero surgió el problema de que la función se aplicaba sobre las columnas de inicio y final de intervalo, escogiendo siempre *f.chunk* como 1025, ya que es el máximo canal, con lo cual no servía para el propósito buscado.

Después se intentó hacer con funciones de *Rbase*, [Código 5.49](#), haciendo listas que agrupan las bases de datos por *c("detector", "replica", "ciclo", "n_chunk")* con la función *split()* y, posteriormente, escogiendo el intervalo de valor máximo de la lista. El problema fue que, a parte del largo tiempo de computación, pues se crea una lista enorme, de 8.5 GB, al ir a unir la lista en una dataframe con *rbind.fill()* del paquete *plyr* para *R*, el ordenador se cuelga. Una solución es utilizar *rbind()*, de *Rbase*, secuencialmente en la lista, pero los problemas para evitar que el ordenador *gripase* fueron enormes.

Código 5.49: df.max

```
lista <- split (DF_50, listDF_50$detector,DF_50$replica,
              DF_50$ciclo,DF_50$n_chunk) # 8.8 GB
l.lmax <- lapply(seq(lista),
               function(i)
                 lista[[i]][which.max(lista[[i]]$value), ])
# 8.5 GB
# HORRIBLE con Rbase (y también con plyr).

# library(plyr)
# df.max <- rbind.fill(l.lmax) # Se cuelga luego lo
# hacemos por pasos:

groupmax <- function(df) df[which.max(df$value), ]
# Los 9 primeros elementos no tienen nada
for (i in 11:65250) df.max <- rbind(df.max, l.lmax[[i]])
df.max <- ldply(lista, groupmax)
```

Finalmente, se encontró un paquete o librería para tratamiento de grandes bases de datos, *data.table*, que hace la localización del intervalo máximo prácticamente de manera instantánea. La diferencia es que *data.table* realiza búsquedas binarias y *Rbase* o *plyr* utilizan vectorizaciones y múltiples copias de los datos que hacen crecer la base de datos de manera desproporcionada. Para facilitar el funcionamiento de *data.table* es necesario definir las columnas clave para hacer las búsquedas. Por otro lado, inicialmente se convierten los valores de *n_chunk* de número entero a *factor*, una especie de adjetivo tipo carácter, para que no haya problemas con las búsquedas.

[Código 5.50](#) permite la determinación del intervalo máximo de cada *i* divisiones del espectro.

Código 5.50: maxInt.R2.SiO2

```
# Hacemos la columna n_chunk factor para que no haya
# problemas por ser números.

DF_50.R2.SiO2.cf$n_chunk <-
  as.factor(DF_50.R2.SiO2.cf$n_chunk)

library(data.table)
DT_50.R2.SiO2 <- data.table(DF_50.R2.SiO2.cf,
  key= c("detector",
         "replica",
         "ciclo",
         "n_chunk"))

# Seleccionamos aquellas filas en que value es máximo.
# maxInt.R2.SiO2 <-
#   DT_50.R2.SiO2[ ,
#                 list(MaxVal = max(value)),
#                 by = key(DT_50.R2.SiO2)]
# Pero se pierden las columnas i_chunk, f_chunk y
# variable, por lo que lo hacemos de otra manera:

# Otra manera de hacer lo mismo pero viendo que
# realmente value es el máximo es:
# Añadimos una columna con los valores máximos de
# 'value' agrupados por 'key' y seleccionamos sólo
# las filas en que value == maxVal.
maxInt.R2.SiO2 <-
  DT_50.R2.SiO2[, MaxVal := max(value),
  by = key(DT_50.R2.SiO2)] [MaxVal == value]

# Eliminamos la columna 'value' que ya no necesitamos
```

```
maxInt.R2.SiO2 <- maxInt.R2.SiO2[, value:= NULL]
```

De estos intervalos con R_{max}^2 se halla la media por ciclo, [Código 5.51](#), agrupando por *detector*, *replica* y *n_chunk*, con el fin de ver si hay convergencia de los intervalos hacia un tamaño de intervalo determinado, que sería el óptimo.

Código 5.51: IntmaxDR.SiO2

```
IntmaxDR.SiO2 <-
  maxInt.R2.SiO2[ ,
    list(i = round(mean(i_chunk),
                    digits = 0),
         f = round(mean(f_chunk),
                    digits = 0),
         R2 = mean(MaxVal) ),
    by = .(detector, replica, n_chunk)]
```

Una vez obtenida la base de datos con las medias de R_{max}^2 de los intervalos, se puede analizar la convergencia de intervalos y el correspondiente $R_{max.medio}^2$, tanto para el caso de análisis de CaF_2 como SiO_2 .

Tras estas explicaciones, se dará el código completo para los dos casos y, posteriormente, las bases de datos resultantes para cada detector y réplica así como las gráficas de las mismas en que se representará como abscisas el número de divisiones del espectro de 1 a 50 y en ordenadas el inicio (punto rojo) y el final (segmento negro) de los intervalos así como el $R_{max.medio}^2$ (línea azul) de cada uno (multiplicado por un factor de corrección de 1000 para que entre en la misma escala).

Primero se verá el caso para el análisis del CaF_2 , [Subsección 5.6.2](#), pues se pueden contrastar sus resultados con los de tesis anteriores en que se analizaba el flúor, [Sección 2.5](#). Posteriormente se desarrollará el código y análisis para SiO_2 , [Subsección 5.6.3](#), que no se consideró en ellas, y es el estudio principal de esta tesis.

5.6.2. Determinación intervalo óptimo CaF_2

[Código 5.52](#) nos permite analizar los intervalos óptimos en el caso del CaF_2 .

Código 5.52: IntmaxDR.CaF2 - plot.interv(i, f, pos =right")

```
# Hacemos la columna n_chunk factor para que no haya
# problemas por ser números, aunque aquí no importa

library(data.table)
```

```

DF_50.R2.CaF2.cf$n_chunk <-
  as.factor(DF_50.R2.CaF2.cf$n_chunk)

DT_50.R2.CaF2 <- data.table(DF_50.R2.CaF2.cf,
  key= c("detector",
        "replica",
        "ciclo",
        "n_chunk"))

maxInt.R2.CaF2 <-
  DT_50.R2.CaF2[, MaxVal := max(value),
  by = key(DT_50.R2.CaF2) [MaxVal == value]

IntmaxDR.CaF2 <-
  maxInt.R2.CaF2[, list(i = round(mean(i_chunk),
    digits = 0),
    f = round(mean(f_chunk),
    digits = 0),
    R2 = mean(MaxVal)),
  by = .(detector, replica, n_chunk)]

# Fijamos las claves para agrupar por detector y
# réplica y poder seleccionar por ellos

setkeyv(IntmaxDR.CaF2, c("detector", "replica"))

#####

# Bases de datos IntmaxDR.CaF2 por detector y réplica.
# Ploteado.

#####

# Función auxiliar de ploteado de intervalos.
# i, f serán el inicio y final a que convergen los
# intervalos.

plot.interv <- function(i, f, pos = "right") {
  plot(obj$n_chunk, obj$f, type = "p", pch = 20)
  points(obj$i, pch = 19, col = "red")
  lines(obj$n_chunk, obj$R2 * 1000, col = "blue")
}

```

```

abline(h = i, col = "brown", lty = 2)
abline(h = f, col = "brown", lty = 2)

legend(pos,
  c("inicio intervalo", "fin intervalo",
    expression(R[max-medio]^2),
    "convergencia a intervalo óptimo"),
  col = c('red', 'black', 'blue', 'brown'),
  pch=c(19, NA, NA, NA), lty = c(NA, 1, 1, 2),
  lwd = c(NA, 3, 1, 1), bty = "n")
}

#####
#####
obj <- IntmaxDR.CaF2[.("BGO", "A")]

plot.interv(607, 645)

# El intervalo medio de R2 max para CaF2 es
# [607, 645] con R2=0.995 BGO replica A
#####
obj <- IntmaxDR.CaF2[.("BGO", "B")]

plot.interv(675, 729)

# El intervalo medio de R2 max para CaF2 es
# [675, 730] con R2=0.997 para la replica B con BGO
#####
obj <- IntmaxDR.CaF2[.("BGO", "C")]

plot.interv(600, 684)

# El intervalo medio de R2 max para CaF2 es
# [600, 684] con R2=0.996 para la replica C con BGO
#####
obj <- IntmaxDR.CaF2[.("NaI2x2", "A")]

plot.interv(598, 650)

# El intervalo medio de R2 max para CaF2 es
# [598, 650] con R2=0.995 para NaI2x2 replica A
#####
obj <- IntmaxDR.CaF2[.("NaI2x2", "B")]

```

```
plot.interv(611, 659)

# El intervalo medio de R2 max para CaF2 es
# [611, 659] con R2=0.72 para NaI2x2 replica B
#####
obj <- IntmaxDR.CaF2[.("NaI2x2", "C")]

plot.interv(641, 687)

# El intervalo medio de R2 max para CaF2 es
# [641, 687] con R2=0.99 para NaI2x2 replica C.
#####
obj <- IntmaxDR.CaF2[.("NaI3x3", "A")]

plot.interv(310, 350)

# El intervalo medio de R2 max para CaF2 es [310, 350]
# con R2=0.987 para NaI3x3 replica A. Ensayo mal.
# No detecta [480, 506] más que esporádicamente
# en 40 y 41 divisiones
#####
obj <- IntmaxDR.CaF2[.("NaI3x3", "B")]

plot.interv(200, 326)

# El intervalo medio de R2 max para CaF2 es [200, 326]
# con R2=0.77 para NaI3x3 replica A. Ensayo mal.
# No detecta.
#####
obj <- IntmaxDR.CaF2[.("NaI3x3", "C")]

plot.interv(117, 184)

# El intervalo medio de R2 max para CaF2 es [117, 184]
# con R2=0.995 para NaI3x3 replica C.:w!

# Detecta el CaF2 aunque la escala está comprimida.
```

detector	replica	n_chunk	i	f	R^2
BGO	A	1	1	1025	0.9422644
BGO	A	2	416	918	0.9937660
BGO	A	3	616	958	0.9940779
BGO	A	4	500	756	0.9939958
BGO	A	5	558	763	0.9945753
BGO	A	6	623	793	0.9944133
BGO	A	7	601	747	0.9945030
BGO	A	8	588	716	0.9952172
BGO	A	9	478	591	0.9951116
BGO	A	10	608	710	0.9950326
BGO	A	11	545	638	0.9951213
BGO	A	12	559	644	0.9953166
BGO	A	13	597	675	0.9953971
BGO	A	14	637	710	0.9949669
BGO	A	15	608	676	0.9955217
BGO	A	16	562	626	0.9952735
BGO	A	17	584	644	0.9956165
BGO	A	18	644	700	0.9954795
BGO	A	19	547	600	0.9957009
BGO	A	20	539	590	0.9954765
BGO	A	21	600	648	0.9953470
BGO	A	22	659	705	0.9953436
BGO	A	23	588	632	0.9953787
BGO	A	24	558	600	0.9955027
BGO	A	25	616	657	0.9957314
BGO	A	26	593	632	0.9955504
BGO	A	27	627	664	0.9956510
BGO	A	28	608	644	0.9960989
BGO	A	29	615	650	0.9952006
BGO	A	30	610	644	0.9955806
BGO	A	31	599	632	0.9955364
BGO	A	32	633	665	0.9954335
BGO	A	33	597	628	0.9957899
BGO	A	34	618	648	0.9955578
BGO	A	35	587	616	0.9954311
BGO	A	36	602	630	0.9955633
BGO	A	37	609	636	0.9958522
BGO	A	38	612	638	0.9954520
BGO	A	39	612	638	0.9954520
BGO	A	40	601	626	0.9954244
BGO	A	41	601	626	0.9954244
BGO	A	42	607	631	0.9957746
BGO	A	43	607	630	0.9957843
BGO	A	44	607	630	0.9957843
BGO	A	45	620	642	0.9956278
BGO	A	46	620	642	0.9956278
BGO	A	47	657	678	0.9955579
BGO	A	48	657	678	0.9955579
BGO	A	49	625	645	0.9949529
BGO	A	50	625	645	0.9949529

Cuadro 5.13: Intervalo óptimo CaF_2 : Detector BGO - Réplica A

detector	replica	n_chunk	i	f	R^2
BGO	B	1	1	1025	0.9690324
BGO	B	2	358	870	0.9960503
BGO	B	3	513	854	0.9960630
BGO	B	4	566	822	0.9960345
BGO	B	5	610	815	0.9963165
BGO	B	6	578	748	0.9961701
BGO	B	7	656	802	0.9966995
BGO	B	8	630	758	0.9962060
BGO	B	9	664	777	0.9966577
BGO	B	10	628	730	0.9961315
BGO	B	11	676	769	0.9963598
BGO	B	12	642	727	0.9965744
BGO	B	13	641	719	0.9964069
BGO	B	14	657	730	0.9965563
BGO	B	15	613	681	0.9966352
BGO	B	16	667	731	0.9964623
BGO	B	17	672	732	0.9969103
BGO	B	18	656	712	0.9966769
BGO	B	19	655	708	0.9966663
BGO	B	20	688	739	0.9967728
BGO	B	21	650	698	0.9967647
BGO	B	22	685	731	0.9966244
BGO	B	23	604	648	0.9970132
BGO	B	24	686	728	0.9966857
BGO	B	25	698	739	0.9966192
BGO	B	26	670	709	0.9968190
BGO	B	27	667	704	0.9970533
BGO	B	28	686	722	0.9969751
BGO	B	29	669	704	0.9966124
BGO	B	30	681	715	0.9963152
BGO	B	31	665	698	0.9964916
BGO	B	32	639	671	0.9969843
BGO	B	33	703	734	0.9968440
BGO	B	34	625	655	0.9969271
BGO	B	35	624	653	0.9969230
BGO	B	36	695	723	0.9972635
BGO	B	37	699	726	0.9971195
BGO	B	38	645	671	0.9967295
BGO	B	39	645	671	0.9967295
BGO	B	40	698	723	0.9969948
BGO	B	41	698	723	0.9969948
BGO	B	42	683	707	0.9971398
BGO	B	43	697	720	0.9971188
BGO	B	44	697	720	0.9971188
BGO	B	45	707	729	0.9975185
BGO	B	46	707	729	0.9975185
BGO	B	47	675	696	0.9970886
BGO	B	48	675	696	0.9970886
BGO	B	49	704	724	0.9971529
BGO	B	50	704	724	0.9971529

Cuadro 5.14: Intervalo óptimo CaF_2 : Detector BGO - Réplica B

detector	replica	n_chunk	i	f	R^2
BGO	C	1	1	1025	0.9735970
BGO	C	2	261	772	0.9965169
BGO	C	3	388	730	0.9966798
BGO	C	4	398	654	0.9966199
BGO	C	5	372	577	0.9970309
BGO	C	6	450	620	0.9969576
BGO	C	7	382	528	0.9968073
BGO	C	8	437	565	0.9973871
BGO	C	9	445	558	0.9965561
BGO	C	10	445	547	0.9971327
BGO	C	11	559	652	0.9972526
BGO	C	12	503	588	0.9973423
BGO	C	13	484	562	0.9974575
BGO	C	14	576	649	0.9977331
BGO	C	15	532	600	0.9968638
BGO	C	16	575	639	0.9969107
BGO	C	17	591	651	0.9975174
BGO	C	18	578	634	0.9964826
BGO	C	19	592	645	0.9973500
BGO	C	20	594	645	0.9972364
BGO	C	21	635	683	0.9963028
BGO	C	22	611	657	0.9969020
BGO	C	23	643	687	0.9968930
BGO	C	24	617	659	0.9967821
BGO	C	25	642	683	0.9968038
BGO	C	26	666	705	0.9969566
BGO	C	27	654	691	0.9966460
BGO	C	28	662	698	0.9964144
BGO	C	29	584	618	0.9965121
BGO	C	30	649	683	0.9960718
BGO	C	31	718	751	0.9966399
BGO	C	32	624	656	0.9958794
BGO	C	33	676	707	0.9967127
BGO	C	34	611	641	0.9959012
BGO	C	35	611	640	0.9960767
BGO	C	36	636	664	0.9966182
BGO	C	37	651	678	0.9956716
BGO	C	38	579	605	0.9957967
BGO	C	39	579	605	0.9957967
BGO	C	40	637	662	0.9970424
BGO	C	41	637	662	0.9970424
BGO	C	42	619	643	0.9970743
BGO	C	43	587	610	0.9959422
BGO	C	44	587	610	0.9959422
BGO	C	45	647	669	0.9964663
BGO	C	46	647	669	0.9964663
BGO	C	47	600	621	0.9960785
BGO	C	48	600	621	0.9960785
BGO	C	49	664	684	0.9960940
BGO	C	50	664	684	0.9960940

Cuadro 5.15: Intervalo óptimo CaF_2 : Detector BGO - Réplica C

detector	replica	n_chunk	i	f	R^2
NaI2x2	A	1	1	1025	0.9684448
NaI2x2	A	2	264	775	0.9961948
NaI2x2	A	3	353	694	0.9961067
NaI2x2	A	4	359	615	0.9967408
NaI2x2	A	5	397	602	0.9958469
NaI2x2	A	6	354	524	0.9960521
NaI2x2	A	7	430	576	0.9959621
NaI2x2	A	8	410	538	0.9961363
NaI2x2	A	9	416	529	0.9958195
NaI2x2	A	10	443	545	0.9959970
NaI2x2	A	11	439	532	0.9963940
NaI2x2	A	12	476	561	0.9960727
NaI2x2	A	13	468	546	0.9958139
NaI2x2	A	14	582	655	0.9959887
NaI2x2	A	15	500	568	0.9959442
NaI2x2	A	16	564	628	0.9958187
NaI2x2	A	17	538	598	0.9958784
NaI2x2	A	18	540	596	0.9960819
NaI2x2	A	19	539	592	0.9958673
NaI2x2	A	20	560	611	0.9963678
NaI2x2	A	21	568	616	0.9954301
NaI2x2	A	22	530	576	0.9957699
NaI2x2	A	23	579	623	0.9956583
NaI2x2	A	24	570	612	0.9953170
NaI2x2	A	25	591	632	0.9956129
NaI2x2	A	26	570	609	0.9955545
NaI2x2	A	27	564	601	0.9951908
NaI2x2	A	28	587	623	0.9957288
NaI2x2	A	29	604	639	0.9956163
NaI2x2	A	30	565	599	0.9958530
NaI2x2	A	31	620	653	0.9951647
NaI2x2	A	32	582	614	0.9950834
NaI2x2	A	33	594	625	0.9947879
NaI2x2	A	34	607	637	0.9953869
NaI2x2	A	35	599	628	0.9955430
NaI2x2	A	36	600	628	0.9954990
NaI2x2	A	37	605	632	0.9952982
NaI2x2	A	38	605	631	0.9952078
NaI2x2	A	39	605	631	0.9952078
NaI2x2	A	40	617	642	0.9945976
NaI2x2	A	41	617	642	0.9945976
NaI2x2	A	42	620	644	0.9947086
NaI2x2	A	43	619	642	0.9961704
NaI2x2	A	44	619	642	0.9961704
NaI2x2	A	45	628	650	0.9952272
NaI2x2	A	46	628	650	0.9952272
NaI2x2	A	47	619	640	0.9949871
NaI2x2	A	48	619	640	0.9949871
NaI2x2	A	49	598	618	0.9952858
NaI2x2	A	50	598	618	0.9952858

Cuadro 5.16: Intervalo óptimo CaF_2 : Detector NaI2x2 - Réplica A

detector	replica	n_chunk	i	f	R^2
NaI2x2	B	1	1	1025	0.9238853
NaI2x2	B	2	512	1025	0.9884057
NaI2x2	B	3	648	990	0.9895743
NaI2x2	B	4	608	864	0.9890589
NaI2x2	B	5	654	859	0.9898045
NaI2x2	B	6	665	835	0.9898284
NaI2x2	B	7	650	796	0.9896134
NaI2x2	B	8	657	785	0.9895462
NaI2x2	B	9	654	767	0.9904711
NaI2x2	B	10	676	778	0.9893022
NaI2x2	B	11	674	767	0.9913370
NaI2x2	B	12	669	754	0.9899152
NaI2x2	B	13	672	750	0.9900002
NaI2x2	B	14	667	740	0.9896036
NaI2x2	B	15	680	748	0.9896642
NaI2x2	B	16	661	725	0.9898148
NaI2x2	B	17	689	749	0.9899098
NaI2x2	B	18	664	720	0.9903076
NaI2x2	B	19	673	726	0.9889269
NaI2x2	B	20	680	731	0.9907884
NaI2x2	B	21	686	734	0.9907023
NaI2x2	B	22	679	725	0.9889410
NaI2x2	B	23	652	696	0.9896488
NaI2x2	B	24	676	718	0.9890361
NaI2x2	B	25	687	728	0.9900598
NaI2x2	B	26	636	675	0.9895216
NaI2x2	B	27	664	701	0.9888365
NaI2x2	B	28	669	705	0.9901159
NaI2x2	B	29	627	662	0.9900444
NaI2x2	B	30	649	683	0.9897867
NaI2x2	B	31	625	658	0.9899841
NaI2x2	B	32	608	640	0.9901586
NaI2x2	B	33	653	684	0.9904979
NaI2x2	B	34	578	608	0.9895666
NaI2x2	B	35	638	667	0.9898928
NaI2x2	B	36	645	673	0.9902689
NaI2x2	B	37	598	625	0.9899350
NaI2x2	B	38	639	665	0.9898182
NaI2x2	B	39	639	665	0.9898182
NaI2x2	B	40	614	639	0.9906872
NaI2x2	B	41	614	639	0.9906872
NaI2x2	B	42	608	632	0.9900181
NaI2x2	B	43	636	659	0.9901858
NaI2x2	B	44	636	659	0.9901858
NaI2x2	B	45	617	639	0.9891673
NaI2x2	B	46	617	639	0.9891673
NaI2x2	B	47	611	632	0.9895405
NaI2x2	B	48	611	632	0.9895405
NaI2x2	B	49	634	654	0.9905623
NaI2x2	B	50	634	654	0.9905623

Cuadro 5.17: Intervalo óptimo CaF_2 : Detector NaI2x2 - Réplica B

detector	replica	n_chunk	i	f	R^2
NaI2x2	C	1	1	1025	0.5427733
NaI2x2	C	2	512	1025	0.9821745
NaI2x2	C	3	563	905	0.9823781
NaI2x2	C	4	628	884	0.9853124
NaI2x2	C	5	606	811	0.9866901
NaI2x2	C	6	595	765	0.9870846
NaI2x2	C	7	587	733	0.9875163
NaI2x2	C	8	620	748	0.9880183
NaI2x2	C	9	618	731	0.9884573
NaI2x2	C	10	610	712	0.9887674
NaI2x2	C	11	620	713	0.9885222
NaI2x2	C	12	634	719	0.9887448
NaI2x2	C	13	622	700	0.9892061
NaI2x2	C	14	625	698	0.9888777
NaI2x2	C	15	641	709	0.9886409
NaI2x2	C	16	637	701	0.9887056
NaI2x2	C	17	629	689	0.9896932
NaI2x2	C	18	633	689	0.9884780
NaI2x2	C	19	634	687	0.9895152
NaI2x2	C	20	631	682	0.9891988
NaI2x2	C	21	620	668	0.9884519
NaI2x2	C	22	635	681	0.9889087
NaI2x2	C	23	626	670	0.9887698
NaI2x2	C	24	643	685	0.9891929
NaI2x2	C	25	625	666	0.9887129
NaI2x2	C	26	633	672	0.9890176
NaI2x2	C	27	625	662	0.9891831
NaI2x2	C	28	622	658	0.9899339
NaI2x2	C	29	621	656	0.9896543
NaI2x2	C	30	616	650	0.9895365
NaI2x2	C	31	630	663	0.9899941
NaI2x2	C	32	640	672	0.9891473
NaI2x2	C	33	636	667	0.9886585
NaI2x2	C	34	632	662	0.9897918
NaI2x2	C	35	633	662	0.9888549
NaI2x2	C	36	626	654	0.9892689
NaI2x2	C	37	642	669	0.9891162
NaI2x2	C	38	649	675	0.9899840
NaI2x2	C	39	649	675	0.9899840
NaI2x2	C	40	645	670	0.9901439
NaI2x2	C	41	645	670	0.9901439
NaI2x2	C	42	626	650	0.9901295
NaI2x2	C	43	658	681	0.9892337
NaI2x2	C	44	658	681	0.9892337
NaI2x2	C	45	665	687	0.9908099
NaI2x2	C	46	665	687	0.9908099
NaI2x2	C	47	657	678	0.9898859
NaI2x2	C	48	657	678	0.9898859
NaI2x2	C	49	641	661	0.9904339
NaI2x2	C	50	641	661	0.9904339

Cuadro 5.18: Intervalo óptimo CaF_2 : Detector NaI2x2 - Réplica C

detector	replica	n_chunk	i	f	R^2
NaI3x3	A	1	1	1025	0.9665799
NaI3x3	A	2	202	713	0.9585629
NaI3x3	A	3	340	681	0.9648049
NaI3x3	A	4	384	640	0.9709909
NaI3x3	A	5	410	615	0.9736054
NaI3x3	A	6	333	503	0.9892720
NaI3x3	A	7	438	584	0.9871556
NaI3x3	A	8	272	400	0.9902682
NaI3x3	A	9	354	467	0.9903445
NaI3x3	A	10	442	544	0.9887926
NaI3x3	A	11	315	408	0.9909498
NaI3x3	A	12	314	399	0.9890416
NaI3x3	A	13	280	358	0.9911933
NaI3x3	A	14	304	377	0.9861424
NaI3x3	A	15	278	346	0.9910391
NaI3x3	A	16	293	357	0.9884840
NaI3x3	A	17	275	335	0.9874313
NaI3x3	A	18	289	345	0.9885359
NaI3x3	A	19	294	346	0.9890258
NaI3x3	A	20	291	342	0.9858351
NaI3x3	A	21	292	340	0.9874705
NaI3x3	A	22	296	342	0.9884307
NaI3x3	A	23	307	351	0.9859764
NaI3x3	A	24	291	333	0.9883836
NaI3x3	A	25	379	420	0.9905793
NaI3x3	A	26	374	413	0.9891307
NaI3x3	A	27	306	343	0.9877229
NaI3x3	A	28	311	347	0.9858977
NaI3x3	A	29	315	350	0.9907882
NaI3x3	A	30	315	349	0.9879738
NaI3x3	A	31	325	358	0.9893128
NaI3x3	A	32	324	356	0.9878760
NaI3x3	A	33	339	370	0.9893356
NaI3x3	A	34	374	404	0.9909903
NaI3x3	A	35	332	361	0.9894647
NaI3x3	A	36	318	346	0.9852919
NaI3x3	A	37	428	455	0.9905667
NaI3x3	A	38	316	342	0.9878703
NaI3x3	A	39	316	342	0.9878703
NaI3x3	A	40	481	506	0.9919979
NaI3x3	A	41	481	506	0.9919979
NaI3x3	A	42	388	412	0.9876549
NaI3x3	A	43	318	341	0.9887073
NaI3x3	A	44	318	341	0.9887073
NaI3x3	A	45	317	339	0.9875485
NaI3x3	A	46	317	339	0.9875485
NaI3x3	A	47	330	351	0.9895924
NaI3x3	A	48	330	351	0.9895924
NaI3x3	A	49	309	329	0.9869166
NaI3x3	A	50	309	329	0.9869166

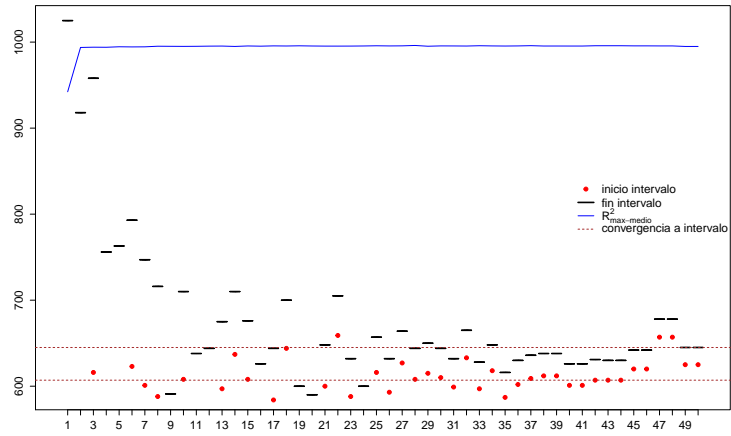
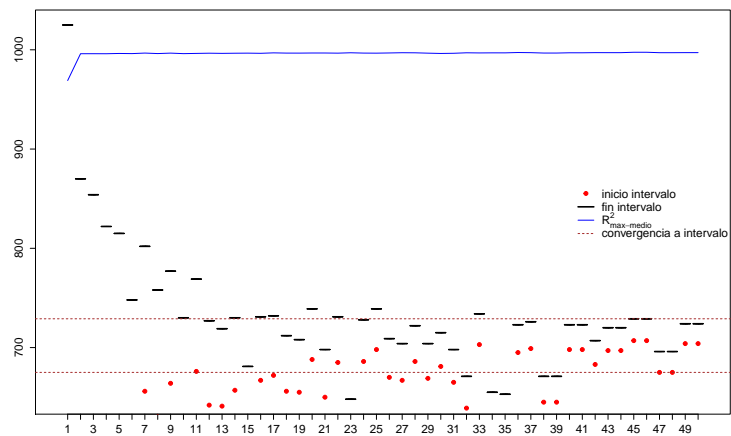
Cuadro 5.19: Intervalo óptimo CaF_2 : Detector NaI3x3 - Réplica A

detector	replica	n_chunk	i	f	R^2
NaI3x3	B	1	1	1025	0.1986547
NaI3x3	B	2	257	768	0.3382577
NaI3x3	B	3	171	511	0.5712081
NaI3x3	B	4	133	388	0.5168941
NaI3x3	B	5	205	410	0.6158755
NaI3x3	B	6	170	340	0.7377144
NaI3x3	B	7	219	365	0.7070076
NaI3x3	B	8	192	320	0.7196129
NaI3x3	B	9	171	284	0.7297740
NaI3x3	B	10	165	267	0.7057754
NaI3x3	B	11	231	324	0.7186454
NaI3x3	B	12	171	256	0.7385645
NaI3x3	B	13	237	315	0.7010215
NaI3x3	B	14	183	256	0.7273376
NaI3x3	B	15	175	243	0.7614447
NaI3x3	B	16	193	257	0.6369490
NaI3x3	B	17	183	243	0.7817366
NaI3x3	B	18	176	232	0.7030678
NaI3x3	B	19	185	238	0.7750904
NaI3x3	B	20	181	232	0.7596237
NaI3x3	B	21	192	240	0.7167729
NaI3x3	B	22	184	230	0.7652730
NaI3x3	B	23	182	226	0.7125880
NaI3x3	B	24	189	231	0.7310687
NaI3x3	B	25	185	226	0.7634171
NaI3x3	B	26	199	238	0.7019995
NaI3x3	B	27	186	222	0.7483802
NaI3x3	B	28	214	250	0.7002304
NaI3x3	B	29	192	227	0.7234663
NaI3x3	B	30	188	222	0.7457390
NaI3x3	B	31	198	231	0.7008359
NaI3x3	B	32	193	225	0.7332212
NaI3x3	B	33	188	219	0.7192106
NaI3x3	B	34	213	243	0.7306248
NaI3x3	B	35	191	220	0.7182152
NaI3x3	B	36	196	224	0.7344818
NaI3x3	B	37	194	221	0.7108711
NaI3x3	B	38	200	226	0.7440516
NaI3x3	B	39	296	322	0.7503048
NaI3x3	B	40	301	326	0.7454932
NaI3x3	B	41	301	326	0.7454932
NaI3x3	B	42	194	218	0.7123535
NaI3x3	B	43	201	224	0.7306737
NaI3x3	B	44	239	262	0.7339595
NaI3x3	B	45	199	221	0.7596011
NaI3x3	B	46	199	221	0.7596011
NaI3x3	B	47	199	220	0.7664868
NaI3x3	B	48	269	290	0.7719310
NaI3x3	B	49	200	220	0.7731502
NaI3x3	B	50	200	220	0.7731502

Cuadro 5.20: Intervalo óptimo CaF_2 : Detector NaI3x3 - Réplica B

detector	replica	n_chunk	i	f	R^2
NaI3x3	C	1	1	1025	0.9345531
NaI3x3	C	2	1	259	0.9347678
NaI3x3	C	3	169	509	0.9540241
NaI3x3	C	4	129	384	0.9903031
NaI3x3	C	5	103	307	0.9922668
NaI3x3	C	6	86	255	0.9919226
NaI3x3	C	7	75	220	0.9930785
NaI3x3	C	8	65	192	0.9958268
NaI3x3	C	9	113	226	0.9927896
NaI3x3	C	10	102	204	0.9941769
NaI3x3	C	11	93	186	0.9943804
NaI3x3	C	12	90	175	0.9931027
NaI3x3	C	13	113	191	0.9950900
NaI3x3	C	14	104	176	0.9954066
NaI3x3	C	15	128	196	0.9929928
NaI3x3	C	16	127	191	0.9956758
NaI3x3	C	17	102	162	0.9953799
NaI3x3	C	18	94	150	0.9947926
NaI3x3	C	19	94	147	0.9952144
NaI3x3	C	20	93	144	0.9949757
NaI3x3	C	21	118	166	0.9954934
NaI3x3	C	22	106	152	0.9944871
NaI3x3	C	23	97	141	0.9948721
NaI3x3	C	24	111	153	0.9958163
NaI3x3	C	25	106	147	0.9957281
NaI3x3	C	26	101	140	0.9946623
NaI3x3	C	27	114	151	0.9951133
NaI3x3	C	28	118	154	0.9953448
NaI3x3	C	29	114	149	0.9951148
NaI3x3	C	30	133	167	0.9943964
NaI3x3	C	31	116	149	0.9955880
NaI3x3	C	32	115	147	0.9949866
NaI3x3	C	33	109	140	0.9941294
NaI3x3	C	34	128	158	0.9949981
NaI3x3	C	35	115	144	0.9943022
NaI3x3	C	36	127	155	0.9951949
NaI3x3	C	37	122	149	0.9940088
NaI3x3	C	38	119	145	0.9945731
NaI3x3	C	39	119	145	0.9945731
NaI3x3	C	40	118	143	0.9936550
NaI3x3	C	41	118	143	0.9936550
NaI3x3	C	42	154	178	0.9955482
NaI3x3	C	43	117	140	0.9939819
NaI3x3	C	44	117	140	0.9939819
NaI3x3	C	45	118	140	0.9942129
NaI3x3	C	46	118	140	0.9942129
NaI3x3	C	47	163	184	0.9953362
NaI3x3	C	48	163	184	0.9953362
NaI3x3	C	49	149	169	0.9949783
NaI3x3	C	50	149	169	0.9949783

Cuadro 5.21: Intervalo óptimo CaF_2 : Detector NaI3x3 - Réplica C

Figura 5.28: Intervalo óptimo CaF_2 : Detector BGO - Réplica AFigura 5.29: Intervalo óptimo CaF_2 : Detector BGO - Réplica B

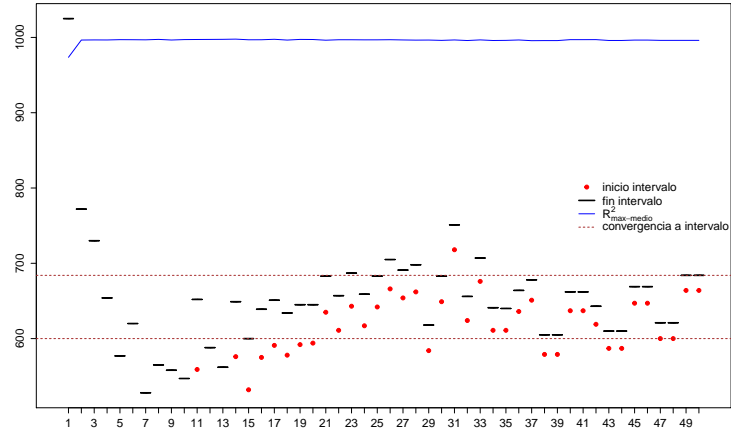


Figura 5.30: Intervalo óptimo CaF_2 : Detector BGO - Réplica C

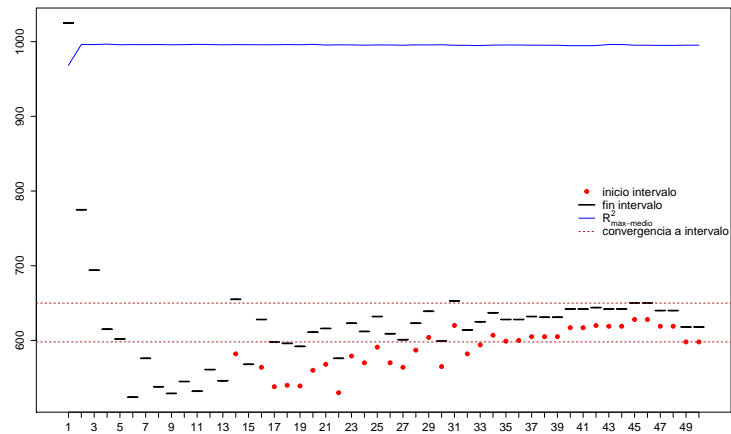
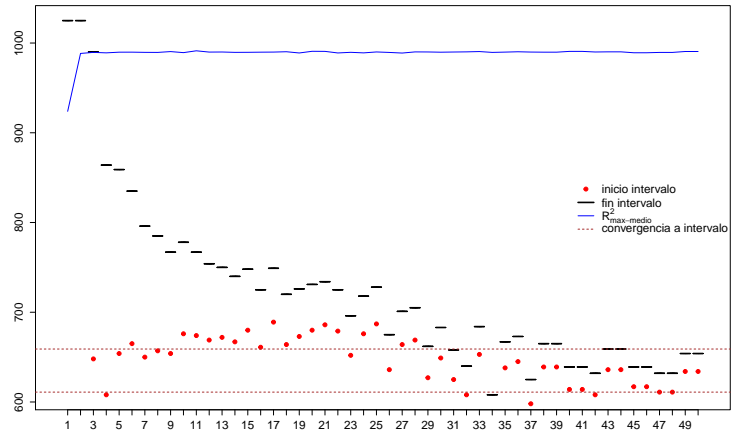
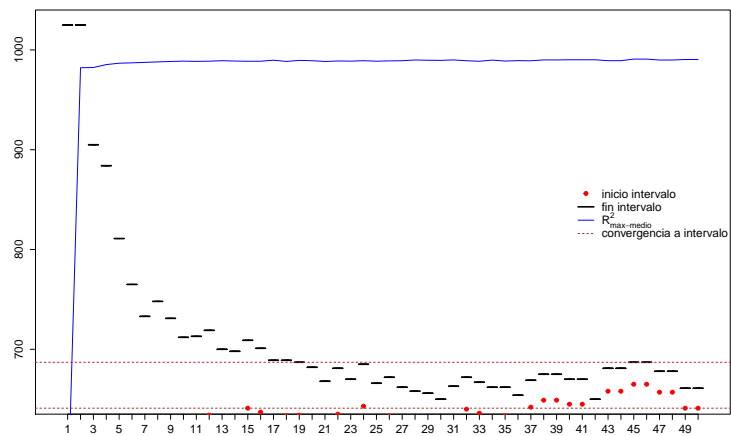


Figura 5.31: Intervalo óptimo CaF_2 : Detector NaI2x2 - Réplica A

Figura 5.32: Intervalo óptimo CaF_2 : Detector NaI2x2 - Réplica BFigura 5.33: Intervalo óptimo CaF_2 : Detector NaI2x2 - Réplica C

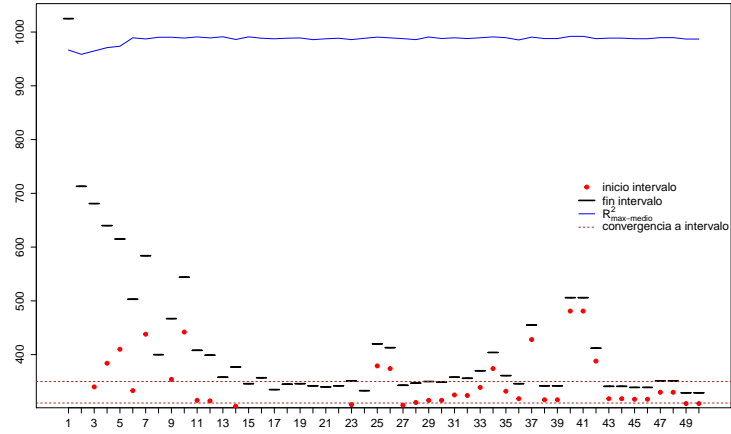


Figura 5.34: Intervalo óptimo CaF_2 : Detector NaI3x3 - Réplica A

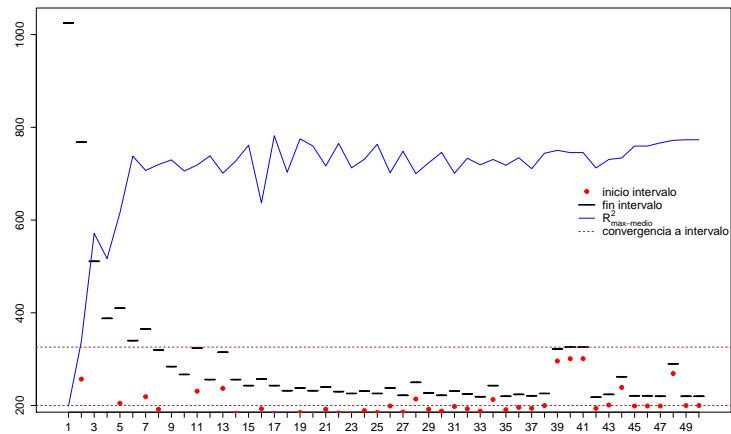


Figura 5.35: Intervalo óptimo CaF_2 : Detector NaI3x3 - Réplica B

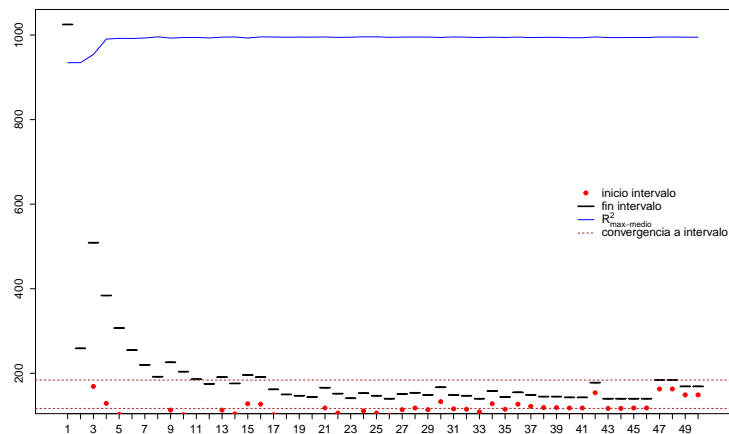


Figura 5.36: Intervalo óptimo CaF_2 : Detector NaI3x3 - Réplica C

Cuadro 5.13 a Cuadro 5.21 y Figura 5.28 a Figura 5.36 aparecen sintetizados en Cuadro 5.22, que nos da el intervalo de convergencia para el caso del CaF_2 .

		Intervalo CaF_2		
Detector	Réplica	Inicio	Final	R^2
BGO	A	607	678	0.995
	B	675	729	0.996
	C	600	684	0.996
NaI2x2	A	598	650	0.994
	B	611	659	0.989
	C	641	687	0.989
NaI3x3	A	310	350	-
	B	200	326	-
	C	117	184	0.993

Cuadro 5.22: CaF_2 —Convergencia intervalos R_{max}^2

Las conclusiones que se obtienen del análisis de Cuadro 5.13 a Cuadro 5.21 y figuras Figura 5.28 a Figura 5.36, así como de las gráficas de los espectros con fondo Figura 5.1 a Figura 5.9 y sin fondo Figura 5.19 a Figura 5.26 son:

Detección CaF_2 con detector BGO (espectros Figura 5.1, Figura 5.2 y Figura 5.3):

- Réplica A. La máxima correlación se produce una loma baja y extendida y la colina por debajo del canal 750, correspondientes con el pico de escape del producto de activación neutrónica de la CaF_2 , ${}^{16}_7N$, 512 keV por debajo del pico 6127.02142 keV, tal como se vio en Sección 5.2.
- Réplica B. La máxima correlación se produce en el pico por debajo del canal 750.
- Réplica C. La máxima correlación se produce en la loma baja y extendida el pico por debajo del canal 750.
- Conclusión: El conjunto de las 3 réplicas es el intervalo 600 / 730.

Detección CaF_2 con detector NaI2x2 (espectros Figura 5.4, Figura 5.5 y Figura 5.6):

- Réplica A. Detecta desde el inicio a la zona central de la única loma achaparrada que hay aproximadamente entre los canales 600 y 725.
- Réplica B. Detecta la zona central de la única loma achaparrada que hay entre aproximadamente los canales 600 y 725.
- Réplica C. Detecta la zona central de la única loma achaparrada que hay entre aproximadamente los canales 600 y 725.
- Conclusión: El conjunto de las 3 réplicas es el intervalo 600 / 690.

Detección CaF_2 con detector NaI3x3 (espectros Figura 5.7, Figura 5.8 y Figura 5.9):

- Réplica A. No detecta por la desalineación de los picos en los ensayos diferentes de las muestras.
- Réplica B. No detecta por la desalineación de los picos en los ensayos diferentes de las muestras.
- Réplica C. Detecta porque la desalineación de los picos en los ensayos diferentes de las muestras es mucho menos que en las réplicas A y B y su zona es relativamente amplia. La detección se produce independientemente de la escala de canales que registraron las cuentas, mucho más comprimida que en las otras dos réplicas, lo haya desplazado al intervalo 117 / 184.

- Conclusión: El intervalo 117 / 184 corresponde a una sola réplica en la que también hubo desalineación.

Como se vio en [Sección 5.2](#), los intervalos utilizados, seleccionados visualmente, para la determinación de CaF_2 fueron en la tesis del Dr. Miguel Rey Ronco con detector NaI2x2 [95] el intervalo [559, 746] y en la tesis de la Dra. Castro García, con detector BGO [23], el intervalo [649, 748].

El algoritmo de búsqueda es capaz de localizar el intervalo de manera objetiva y con una correlación dada por R^2 de 0.99.

De [Cuadro 5.13](#) a [Cuadro 5.21](#) y gráficas anteriores [Figura 5.28](#) a [Figura 5.36](#), surge una observación inesperada:

Acotar el intervalo lo más posible a las colinas de los picos de detección del CaF_2 no tiene mayor importancia, pues la precisión es prácticamente la misma aunque el intervalo tenga el tamaño de la mitad del espectro y teniendo en su interior dichos picos debido a que a partir de la mitad del espectro prácticamente no hay fondo y lo único que resalta en la gráfica son dichas colinas. Así pues, el intervalo [512, 1024] valdría perfectamente sin necesidad de complicarse.

5.6.3. Determinación intervalo óptimo SiO_2

[Código 5.53](#) nos permite analizar los intervalos óptimos para SiO_2 .

Código 5.53: IntmaxDR.SiO2 - plot

```
# Hacemos la columna n_chunk factor para que no haya
# problemas por ser números, aunque aquí no importa

library(data.table)

DF_50.R2.SiO2.cf$n_chunk <-
  as.factor(DF_50.R2.SiO2.cf$n_chunk)

DT_50.R2.SiO2 <- data.table(DF_50.R2.SiO2.cf,
  key= c("detector",
         "replica",
         "ciclo",
         "n_chunk"))

maxInt.R2.SiO2 <-
  DT_50.R2.SiO2[, MaxVal := max(value),
```

```

    by = key(DT_50.R2.SiO2) [MaxVal == value]

IntmaxDR.SiO2 <-
  maxInt.R2.SiO2[, list(i = round(mean(i_chunk),
                                digits = 0),
                       f = round(mean(f_chunk),
                                digits = 0),
                       R2 = mean(MaxVal)),
                 by = .(detector, replica, n_chunk)]

# Fijamos las claves para agrupar por detector y
# réplica y poder seleccionar por ellos

setkeyv(IntmaxDR.SiO2, c("detector", "replica"))
#####
# Bases de datos IntmaxDR.SiO2 por detector y réplica.
# Ploteado.
#####
obj <- IntmaxDR.SiO2[.("BGO", "A")]

plot.interv(220, 245)

# El intervalo medio de R2 max para la silice
# es [220, 245] con R2=0.95
#####
obj <- IntmaxDR.SiO2[.("BGO", "B")]

plot.interv(208, 235)

# El intervalo medio de R2 max para la silice
# es [208, 235] con R2=0.97 para la replica B con BGO
#####
obj <- IntmaxDR.SiO2[.("BGO", "C")]

plot.interv(206, 232)

# El intervalo medio de R2 max para la silice
# es [206, 232] con R2=0.95 para la replica C con BGO
#####
obj <- IntmaxDR.SiO2[.("NaI2x2", "A")]

plot.interv(213, 243, "topright")

```

```

# El intervalo medio de R2 max para la silice es
# [213, 243] con R2=0.73 para NaI2x2 replica A
#####
obj <- IntmaxDR.SiO2[.("NaI2x2", "B")]

plot.interv(236, 268, "topright")

# El intervalo medio de R2 max para la silice es
# [236, 268] con R2=0.72 para NaI2x2 replica B
#####
obj <- IntmaxDR.SiO2[.("NaI2x2", "C")]

plot.interv(541, 773, "topright")

# El intervalo medio de R2 max para la silice es
# [541, 773] con R2=0.65 para NaI2x2 replica C.
# No lo detecta. Ensayo mal.
#####
obj <- IntmaxDR.SiO2[.("NaI3x3", "A")]

plot.interv(0, 0, "topright")

# Falla estrepitosamente. Ensayos mal.
#####
obj <- IntmaxDR.SiO2[.("NaI3x3", "B")]

plot.interv(0, 0)

# Peor que el A
#####
obj <- IntmaxDR.SiO2[.("NaI3x3", "C")]

plot.interv(0, 0, "topright")

# Haciendo las medias de i y f falla.
# Sin embargo para ensayos de ciclos iba bien

```


detector	replica	n_chunk	i	f	R^2
BGO	A	1	1	1025	0.1935320
BGO	A	2	259	770	0.3652576
BGO	A	3	359	697	0.3636285
BGO	A	4	258	514	0.3953633
BGO	A	5	340	545	0.3780468
BGO	A	6	260	429	0.4194306
BGO	A	7	295	441	0.4026525
BGO	A	8	218	346	0.5078297
BGO	A	9	234	347	0.4492443
BGO	A	10	226	328	0.6375803
BGO	A	11	215	308	0.6506277
BGO	A	12	233	318	0.7257666
BGO	A	13	217	296	0.7198537
BGO	A	14	211	284	0.7248230
BGO	A	15	224	292	0.7842290
BGO	A	16	219	283	0.7757357
BGO	A	17	220	280	0.8298469
BGO	A	18	218	274	0.8116220
BGO	A	19	231	284	0.8535544
BGO	A	20	221	272	0.8504672
BGO	A	21	231	279	0.8558105
BGO	A	22	221	267	0.8807219
BGO	A	23	221	265	0.8721385
BGO	A	24	224	266	0.8998759
BGO	A	25	217	258	0.8976325
BGO	A	26	233	272	0.9089322
BGO	A	27	219	256	0.9093184
BGO	A	28	222	258	0.9053176
BGO	A	29	226	261	0.9273685
BGO	A	30	218	252	0.9177637
BGO	A	31	227	260	0.9288444
BGO	A	32	221	253	0.9339512
BGO	A	33	227	258	0.9186680
BGO	A	34	221	251	0.9409778
BGO	A	35	222	251	0.9305131
BGO	A	36	222	250	0.9431459
BGO	A	37	225	252	0.9411941
BGO	A	38	224	250	0.9434224
BGO	A	39	224	250	0.9434224
BGO	A	40	222	247	0.9525407
BGO	A	41	222	247	0.9525407
BGO	A	42	220	244	0.9478655
BGO	A	43	215	238	0.9466479
BGO	A	44	215	238	0.9466479
BGO	A	45	224	246	0.9519038
BGO	A	46	224	246	0.9519038
BGO	A	47	222	243	0.9563642
BGO	A	48	222	243	0.9563642
BGO	A	49	222	242	0.9582312
BGO	A	50	222	242	0.9582312

Cuadro 5.23: Intervalo óptimo SiO_2 : Detector BGO - Réplica A

detector	replica	n_chunk	i	f	R^2
BGO	B	1	1	1025	0.1905175
BGO	B	2	690	986	0.3681268
BGO	B	3	800	988	0.4169660
BGO	B	4	697	898	0.4068514
BGO	B	5	795	943	0.4777924
BGO	B	6	813	971	0.4548953
BGO	B	7	870	990	0.4821420
BGO	B	8	264	390	0.4944855
BGO	B	9	352	467	0.4803289
BGO	B	10	272	374	0.6619944
BGO	B	11	259	352	0.6585909
BGO	B	12	266	351	0.7519996
BGO	B	13	258	337	0.7503885
BGO	B	14	251	324	0.7369195
BGO	B	15	231	299	0.8230738
BGO	B	16	207	271	0.7873845
BGO	B	17	209	269	0.8756326
BGO	B	18	229	285	0.8399550
BGO	B	19	232	285	0.8908671
BGO	B	20	214	265	0.8813200
BGO	B	21	230	278	0.8882804
BGO	B	22	211	257	0.9103289
BGO	B	23	213	257	0.8816874
BGO	B	24	214	256	0.9326375
BGO	B	25	209	250	0.9185058
BGO	B	26	214	253	0.9409021
BGO	B	27	216	253	0.9208573
BGO	B	28	221	257	0.9367679
BGO	B	29	213	248	0.9485065
BGO	B	30	214	248	0.9282864
BGO	B	31	223	256	0.9553242
BGO	B	32	227	259	0.9503761
BGO	B	33	219	250	0.9474178
BGO	B	34	213	243	0.9592969
BGO	B	35	214	243	0.9531903
BGO	B	36	219	247	0.9602871
BGO	B	37	213	240	0.9598887
BGO	B	38	208	234	0.9579693
BGO	B	39	208	234	0.9579693
BGO	B	40	211	236	0.9650881
BGO	B	41	211	236	0.9650881
BGO	B	42	219	243	0.9651210
BGO	B	43	215	238	0.9614922
BGO	B	44	215	238	0.9614922
BGO	B	45	210	232	0.9673418
BGO	B	46	210	232	0.9673418
BGO	B	47	208	229	0.9710413
BGO	B	48	214	235	0.9712537
BGO	B	49	208	228	0.9721024
BGO	B	50	208	228	0.9721024

Cuadro 5.24: Intervalo óptimo SiO_2 : Detector BGO - Réplica B

detector	replica	n_chunk	i	f	R ²
BGO	C	1	1	1025	0.1946090
BGO	C	2	736	1020	0.3575344
BGO	C	3	763	988	0.3775745
BGO	C	4	850	998	0.4558257
BGO	C	5	764	952	0.3778187
BGO	C	6	828	990	0.3894276
BGO	C	7	822	969	0.4131652
BGO	C	8	526	647	0.5001979
BGO	C	9	407	514	0.4645227
BGO	C	10	268	369	0.6190537
BGO	C	11	226	319	0.6491718
BGO	C	12	242	327	0.6973065
BGO	C	13	215	293	0.7232150
BGO	C	14	222	294	0.7307320
BGO	C	15	217	285	0.7951585
BGO	C	16	238	302	0.7658471
BGO	C	17	243	303	0.8375002
BGO	C	18	227	282	0.8058828
BGO	C	19	213	265	0.8594020
BGO	C	20	223	274	0.8533854
BGO	C	21	222	269	0.8569705
BGO	C	22	210	255	0.8722566
BGO	C	23	198	242	0.8568779
BGO	C	24	211	253	0.8856604
BGO	C	25	203	243	0.8844359
BGO	C	26	227	266	0.8955668
BGO	C	27	204	241	0.8942884
BGO	C	28	213	249	0.8972145
BGO	C	29	217	252	0.9128248
BGO	C	30	217	251	0.9091265
BGO	C	31	214	247	0.9178651
BGO	C	32	202	233	0.9156119
BGO	C	33	209	240	0.9166898
BGO	C	34	206	235	0.9241163
BGO	C	35	209	238	0.9219658
BGO	C	36	207	235	0.9309521
BGO	C	37	216	243	0.9307394
BGO	C	38	210	235	0.9363848
BGO	C	39	210	235	0.9363848
BGO	C	40	222	247	0.9408618
BGO	C	41	222	247	0.9408618
BGO	C	42	218	242	0.9403118
BGO	C	43	211	234	0.9417781
BGO	C	44	211	234	0.9417781
BGO	C	45	210	232	0.9460498
BGO	C	46	210	232	0.9460498
BGO	C	47	206	226	0.9507944
BGO	C	48	206	226	0.9507944
BGO	C	49	212	232	0.9534674
BGO	C	50	212	232	0.9534674

Cuadro 5.25: Intervalo óptimo SiO₂ : Detector BGO - Réplica C

detector	replica	n_chunk	i	f	R^2
NaI2x2	A	1	1	1025	0.1875444
NaI2x2	A	2	514	1000	0.3466671
NaI2x2	A	3	506	848	0.3513590
NaI2x2	A	4	524	780	0.3495441
NaI2x2	A	5	412	617	0.3589161
NaI2x2	A	6	424	594	0.3787305
NaI2x2	A	7	447	593	0.3862169
NaI2x2	A	8	447	575	0.3878273
NaI2x2	A	9	469	581	0.3857474
NaI2x2	A	10	465	567	0.3897817
NaI2x2	A	11	508	601	0.3992939
NaI2x2	A	12	470	555	0.4055990
NaI2x2	A	13	494	571	0.4129302
NaI2x2	A	14	467	539	0.4040196
NaI2x2	A	15	498	566	0.4054498
NaI2x2	A	16	423	487	0.4020008
NaI2x2	A	17	506	566	0.4124831
NaI2x2	A	18	369	424	0.4492204
NaI2x2	A	19	466	519	0.4087228
NaI2x2	A	20	341	392	0.4288513
NaI2x2	A	21	382	427	0.4166675
NaI2x2	A	22	311	355	0.4466655
NaI2x2	A	23	213	249	0.4382270
NaI2x2	A	24	127	158	0.4744756
NaI2x2	A	25	91	118	0.4926343
NaI2x2	A	26	72	98	0.5130400
NaI2x2	A	27	95	121	0.5471982
NaI2x2	A	28	86	111	0.5393720
NaI2x2	A	29	91	113	0.5556984
NaI2x2	A	30	96	120	0.5673666
NaI2x2	A	31	21	38	0.5844412
NaI2x2	A	32	105	128	0.5987229
NaI2x2	A	33	52	71	0.6106101
NaI2x2	A	34	122	145	0.6367766
NaI2x2	A	35	18	32	0.6524619
NaI2x2	A	36	121	143	0.6721491
NaI2x2	A	37	123	143	0.6400739
NaI2x2	A	38	136	156	0.6658486
NaI2x2	A	39	136	156	0.6658486
NaI2x2	A	40	185	208	0.7166872
NaI2x2	A	41	185	208	0.7166872
NaI2x2	A	42	195	217	0.6931606
NaI2x2	A	43	204	225	0.6921110
NaI2x2	A	44	204	225	0.6921110
NaI2x2	A	45	212	233	0.7157717
NaI2x2	A	46	212	233	0.7157717
NaI2x2	A	47	223	243	0.7151284
NaI2x2	A	48	223	243	0.7151284
NaI2x2	A	49	213	232	0.7329626
NaI2x2	A	50	213	232	0.7329626

Cuadro 5.26: Intervalo óptimo SiO_2 : Detector NaI2x2 - Réplica A

detector	replica	n_chunk	i	f	R^2
NaI2x2	B	1	1	1025	0.1797765
NaI2x2	B	2	335	811	0.3606310
NaI2x2	B	3	340	680	0.3535754
NaI2x2	B	4	287	543	0.3750350
NaI2x2	B	5	309	514	0.3734751
NaI2x2	B	6	483	653	0.3884819
NaI2x2	B	7	330	476	0.3913517
NaI2x2	B	8	288	416	0.3928898
NaI2x2	B	9	369	482	0.4140064
NaI2x2	B	10	337	439	0.4117117
NaI2x2	B	11	374	467	0.4148484
NaI2x2	B	12	326	411	0.4319671
NaI2x2	B	13	499	577	0.4558260
NaI2x2	B	14	296	369	0.4345073
NaI2x2	B	15	372	440	0.4409748
NaI2x2	B	16	279	343	0.4650957
NaI2x2	B	17	515	575	0.4704767
NaI2x2	B	18	234	290	0.4802326
NaI2x2	B	19	383	436	0.4595169
NaI2x2	B	20	278	329	0.4593444
NaI2x2	B	21	262	310	0.4768645
NaI2x2	B	22	284	330	0.4788369
NaI2x2	B	23	224	268	0.5329709
NaI2x2	B	24	324	366	0.4899259
NaI2x2	B	25	255	296	0.5322736
NaI2x2	B	26	264	303	0.5024185
NaI2x2	B	27	233	269	0.5118947
NaI2x2	B	28	251	287	0.5159863
NaI2x2	B	29	229	262	0.5350327
NaI2x2	B	30	234	267	0.5454720
NaI2x2	B	31	208	239	0.5723829
NaI2x2	B	32	234	265	0.5701689
NaI2x2	B	33	206	236	0.5892736
NaI2x2	B	34	241	271	0.6177949
NaI2x2	B	35	214	242	0.6005828
NaI2x2	B	36	240	268	0.6379221
NaI2x2	B	37	237	264	0.6599140
NaI2x2	B	38	236	262	0.6787844
NaI2x2	B	39	236	262	0.6787844
NaI2x2	B	40	240	265	0.7037767
NaI2x2	B	41	240	265	0.7037767
NaI2x2	B	42	242	266	0.7179840
NaI2x2	B	43	246	269	0.7152072
NaI2x2	B	44	246	269	0.7152072
NaI2x2	B	45	244	266	0.7050413
NaI2x2	B	46	244	266	0.7050413
NaI2x2	B	47	242	263	0.7260822
NaI2x2	B	48	242	263	0.7260822
NaI2x2	B	49	236	256	0.7757539
NaI2x2	B	50	236	256	0.7757539

Cuadro 5.27: Intervalo óptimo SiO_2 : Detector NaI2x2 - Réplica B

detector	replica	n_chunk	i	f	R^2
NaI2x2	C	1	1	1025	0.5372179
NaI2x2	C	2	395	776	0.5436638
NaI2x2	C	3	6	182	0.5396458
NaI2x2	C	4	265	490	0.5563590
NaI2x2	C	5	442	603	0.6061898
NaI2x2	C	6	273	438	0.5677325
NaI2x2	C	7	396	518	0.5683643
NaI2x2	C	8	299	427	0.5790240
NaI2x2	C	9	262	364	0.5585612
NaI2x2	C	10	536	638	0.6218375
NaI2x2	C	11	255	338	0.5686820
NaI2x2	C	12	600	685	0.6263258
NaI2x2	C	13	613	690	0.6153388
NaI2x2	C	14	362	434	0.5964627
NaI2x2	C	15	661	726	0.6494903
NaI2x2	C	16	272	334	0.5996145
NaI2x2	C	17	770	830	0.7507708
NaI2x2	C	18	621	676	0.6423745
NaI2x2	C	19	442	486	0.6176991
NaI2x2	C	20	446	494	0.6338892
NaI2x2	C	21	435	479	0.6334705
NaI2x2	C	22	639	682	0.6543040
NaI2x2	C	23	477	519	0.6356899
NaI2x2	C	24	281	317	0.6131723
NaI2x2	C	25	522	559	0.6464014
NaI2x2	C	26	330	359	0.6212080
NaI2x2	C	27	468	500	0.6405941
NaI2x2	C	28	721	756	0.7533198
NaI2x2	C	29	360	386	0.6388223
NaI2x2	C	30	532	561	0.6500809
NaI2x2	C	31	614	644	0.6666557
NaI2x2	C	32	525	554	0.6526705
NaI2x2	C	33	649	679	0.6807942
NaI2x2	C	34	736	765	0.7536305
NaI2x2	C	35	506	531	0.6489025
NaI2x2	C	36	561	588	0.6527568
NaI2x2	C	37	737	763	0.7585844
NaI2x2	C	38	585	610	0.6829135
NaI2x2	C	39	585	610	0.6829135
NaI2x2	C	40	650	675	0.6591947
NaI2x2	C	41	650	675	0.6591947
NaI2x2	C	42	541	565	0.6412884
NaI2x2	C	43	587	610	0.6656592
NaI2x2	C	44	587	610	0.6656592
NaI2x2	C	45	635	656	0.6730620
NaI2x2	C	46	635	656	0.6730620
NaI2x2	C	47	625	646	0.6805257
NaI2x2	C	48	625	646	0.6805257
NaI2x2	C	49	753	773	0.7584737
NaI2x2	C	50	753	773	0.7584737

Cuadro 5.28: Intervalo óptimo SiO_2 : Detector NaI2x2 - Réplica C

detector	replica	n_chunk	i	f	R^2
NaI3x3	A	1	1	1025	0.2026198
NaI3x3	A	2	257	768	0.3928095
NaI3x3	A	3	265	606	0.3948195
NaI3x3	A	4	384	639	0.3847039
NaI3x3	A	5	205	410	0.4752288
NaI3x3	A	6	339	508	0.3802956
NaI3x3	A	7	470	595	0.4404819
NaI3x3	A	8	523	624	0.5451634
NaI3x3	A	9	650	738	0.5083165
NaI3x3	A	10	522	606	0.5182117
NaI3x3	A	11	250	340	0.4952047
NaI3x3	A	12	315	396	0.4550397
NaI3x3	A	13	257	333	0.5083612
NaI3x3	A	14	337	411	0.4966189
NaI3x3	A	15	406	475	0.4807625
NaI3x3	A	16	471	535	0.5750073
NaI3x3	A	17	620	683	0.5264326
NaI3x3	A	18	363	418	0.5233477
NaI3x3	A	19	408	464	0.5201069
NaI3x3	A	20	592	644	0.5668083
NaI3x3	A	21	495	549	0.5650782
NaI3x3	A	22	576	625	0.5503429
NaI3x3	A	23	571	617	0.5353883
NaI3x3	A	24	504	550	0.5599948
NaI3x3	A	25	881	922	0.7156616
NaI3x3	A	26	415	454	0.5288803
NaI3x3	A	27	604	651	0.6226086
NaI3x3	A	28	390	426	0.5214517
NaI3x3	A	29	650	685	0.6095797
NaI3x3	A	30	631	665	0.6637205
NaI3x3	A	31	541	574	0.5883836
NaI3x3	A	32	594	626	0.6047156
NaI3x3	A	33	352	383	0.6786960
NaI3x3	A	34	657	687	0.5783821
NaI3x3	A	35	331	360	0.6772107
NaI3x3	A	36	513	544	0.5622994
NaI3x3	A	37	346	374	0.6658155
NaI3x3	A	38	601	642	0.6272541
NaI3x3	A	39	462	488	0.6053596
NaI3x3	A	40	518	543	0.6071543
NaI3x3	A	41	729	754	0.6830572
NaI3x3	A	42	340	365	0.6772749
NaI3x3	A	43	352	379	0.6630255
NaI3x3	A	44	336	359	0.6569000
NaI3x3	A	45	605	632	0.5825647
NaI3x3	A	46	615	638	0.5797630
NaI3x3	A	47	529	560	0.5813207
NaI3x3	A	48	448	469	0.5674969
NaI3x3	A	49	508	541	0.5875163
NaI3x3	A	50	595	616	0.6188337

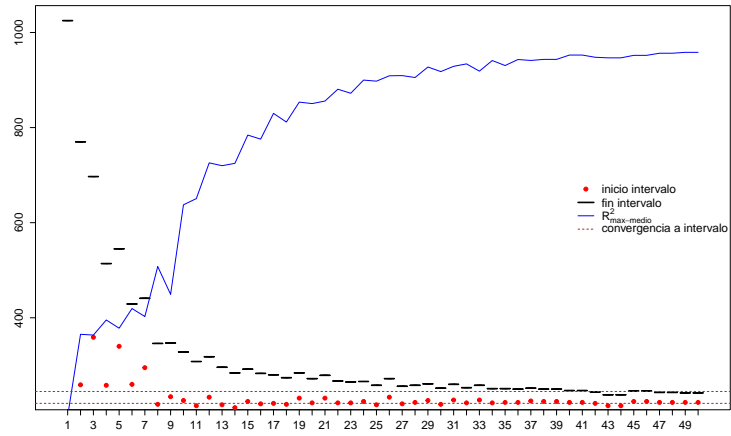
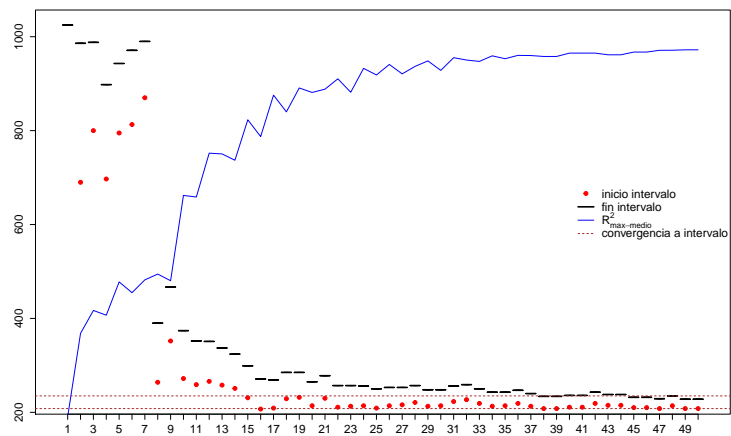
Cuadro 5.29: Intervalo óptimo SiO_2 : Detector NaI3x3 - Réplica A

detector	replica	n_chunk	i	f	R^2
NaI3x3	B	1	1	1025	0.08241838
NaI3x3	B	2	551	1025	0.11820743
NaI3x3	B	3	469	811	0.20059477
NaI3x3	B	4	251	493	0.16953053
NaI3x3	B	5	508	707	0.21807808
NaI3x3	B	6	250	411	0.29605461
NaI3x3	B	7	251	389	0.28462818
NaI3x3	B	8	235	359	0.28147597
NaI3x3	B	9	207	318	0.29502384
NaI3x3	B	10	218	320	0.27839256
NaI3x3	B	11	268	361	0.30103863
NaI3x3	B	12	250	335	0.31697214
NaI3x3	B	13	319	398	0.30299341
NaI3x3	B	14	380	452	0.32387706
NaI3x3	B	15	691	742	0.35364887
NaI3x3	B	16	916	953	0.43832591
NaI3x3	B	17	548	599	0.33622018
NaI3x3	B	18	395	452	0.28555676
NaI3x3	B	19	292	347	0.32077207
NaI3x3	B	20	754	793	0.39275524
NaI3x3	B	21	447	495	0.30163990
NaI3x3	B	22	621	664	0.35127515
NaI3x3	B	23	690	730	0.33073801
NaI3x3	B	24	718	758	0.35219469
NaI3x3	B	25	549	585	0.36685097
NaI3x3	B	26	851	885	0.38170213
NaI3x3	B	27	448	485	0.32674468
NaI3x3	B	28	777	813	0.38652153
NaI3x3	B	29	846	879	0.40254394
NaI3x3	B	30	917	949	0.47961914
NaI3x3	B	31	849	882	0.39697298
NaI3x3	B	32	942	975	0.47276546
NaI3x3	B	33	927	959	0.47902644
NaI3x3	B	34	873	903	0.43765874
NaI3x3	B	35	943	973	0.54062789
NaI3x3	B	36	955	984	0.47885251
NaI3x3	B	37	888	916	0.46972282
NaI3x3	B	38	773	799	0.45236775
NaI3x3	B	39	898	924	0.52198946
NaI3x3	B	40	938	965	0.45226081
NaI3x3	B	41	955	980	0.50031533
NaI3x3	B	42	878	903	0.53055463
NaI3x3	B	43	810	833	0.48592084
NaI3x3	B	44	861	886	0.52609298
NaI3x3	B	45	818	841	0.44377796
NaI3x3	B	46	885	908	0.49956659
NaI3x3	B	47	786	808	0.43181476
NaI3x3	B	48	899	923	0.48512074
NaI3x3	B	49	789	810	0.38531528
NaI3x3	B	50	924	944	0.50685830

Cuadro 5.30: Intervalo óptimo SiO_2 : Detector NaI3x3 - Réplica B

detector	replica	n_chunk	i	f	R^2
NaI3x3	C	1	1	1025	0.1162948
NaI3x3	C	2	289	545	0.1367209
NaI3x3	C	3	190	525	0.3124355
NaI3x3	C	4	152	407	0.3291895
NaI3x3	C	5	179	382	0.3411053
NaI3x3	C	6	275	445	0.3637556
NaI3x3	C	7	275	420	0.3687246
NaI3x3	C	8	404	532	0.4500695
NaI3x3	C	9	439	552	0.4566940
NaI3x3	C	10	346	448	0.3848050
NaI3x3	C	11	522	615	0.4684168
NaI3x3	C	12	351	436	0.4188114
NaI3x3	C	13	428	506	0.4487950
NaI3x3	C	14	463	536	0.4564678
NaI3x3	C	15	525	593	0.4916281
NaI3x3	C	16	515	579	0.4826315
NaI3x3	C	17	419	479	0.4580080
NaI3x3	C	18	574	630	0.5903202
NaI3x3	C	19	315	368	0.3808822
NaI3x3	C	20	339	390	0.3852908
NaI3x3	C	21	585	633	0.6710825
NaI3x3	C	22	504	550	0.4681812
NaI3x3	C	23	475	519	0.5114935
NaI3x3	C	24	643	685	0.6567049
NaI3x3	C	25	518	559	0.5599844
NaI3x3	C	26	536	575	0.6040936
NaI3x3	C	27	575	612	0.5948272
NaI3x3	C	28	586	622	0.6042260
NaI3x3	C	29	575	610	0.5934431
NaI3x3	C	30	640	674	0.6546428
NaI3x3	C	31	562	595	0.6107815
NaI3x3	C	32	541	573	0.6194574
NaI3x3	C	33	606	637	0.6090710
NaI3x3	C	34	563	593	0.6063805
NaI3x3	C	35	530	559	0.5512314
NaI3x3	C	36	634	662	0.6317945
NaI3x3	C	37	490	517	0.6514990
NaI3x3	C	38	504	530	0.6539597
NaI3x3	C	39	504	530	0.6539597
NaI3x3	C	40	517	542	0.5564310
NaI3x3	C	41	524	549	0.5565718
NaI3x3	C	42	546	570	0.7599484
NaI3x3	C	43	537	560	0.6408934
NaI3x3	C	44	537	560	0.6408934
NaI3x3	C	45	529	551	0.6906923
NaI3x3	C	46	529	551	0.6904583
NaI3x3	C	47	528	549	0.6509746
NaI3x3	C	48	528	549	0.6509746
NaI3x3	C	49	510	530	0.7414848
NaI3x3	C	50	510	530	0.7417187

Cuadro 5.31: Intervalo óptimo SiO_2 : Detector NaI3x3 - Réplica C

Figura 5.37: Intervalo óptimo SiO_2 : Detector BGO - Réplica AFigura 5.38: Intervalo óptimo SiO_2 : Detector BGO - Réplica B

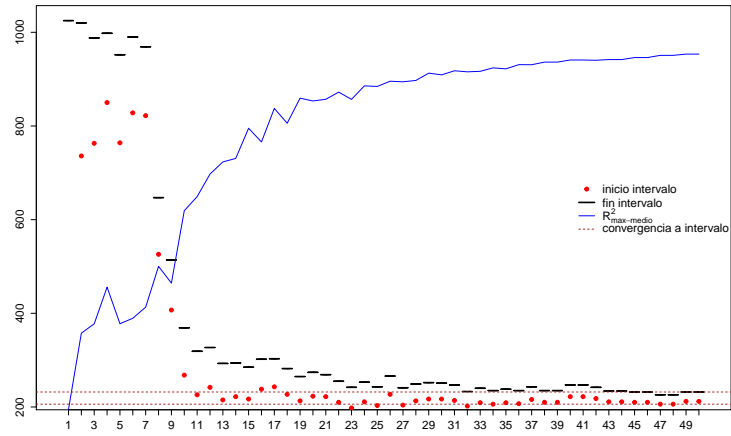


Figura 5.39: Intervalo óptimo SiO_2 : Detector BGO - Réplica C

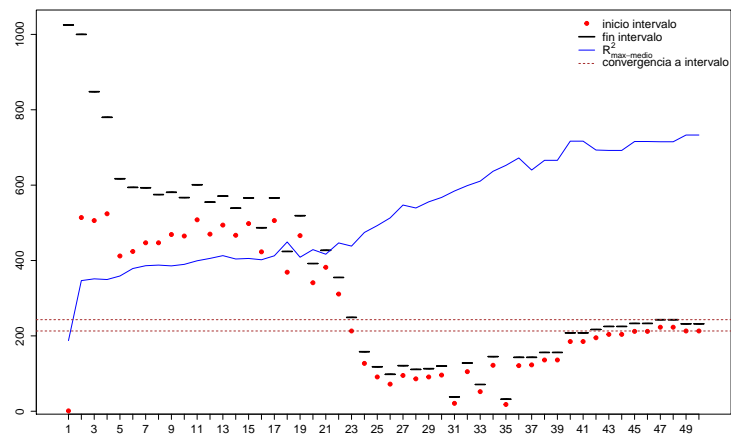
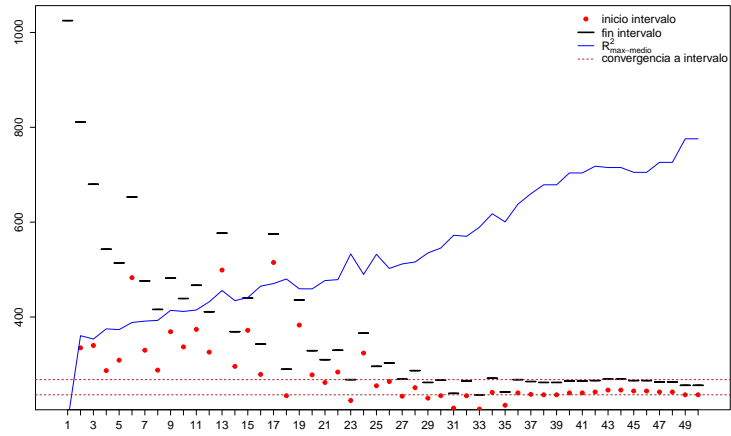
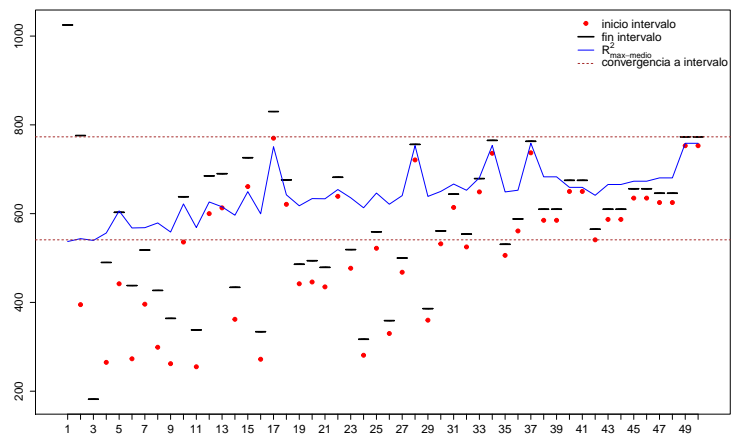


Figura 5.40: Intervalo óptimo SiO_2 : Detector NaI2x2 - Réplica A

Figura 5.41: Intervalo óptimo SiO_2 : Detector NaI2x2 - Réplica BFigura 5.42: Intervalo óptimo SiO_2 : Detector NaI2x2 - Réplica C

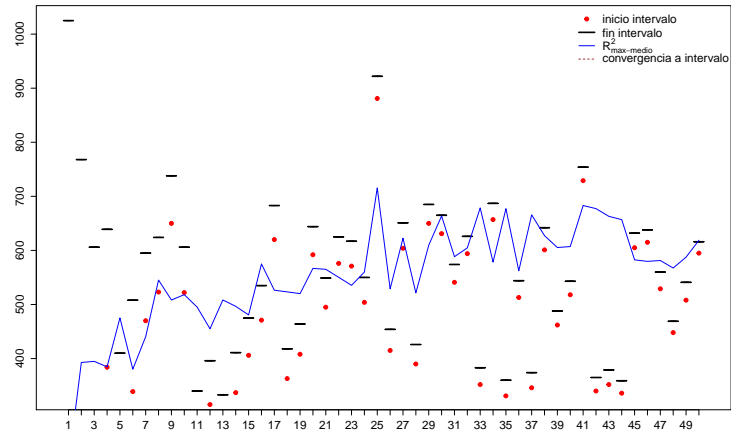


Figura 5.43: Intervalo óptimo SiO_2 : Detector NaI3x3 - Réplica A

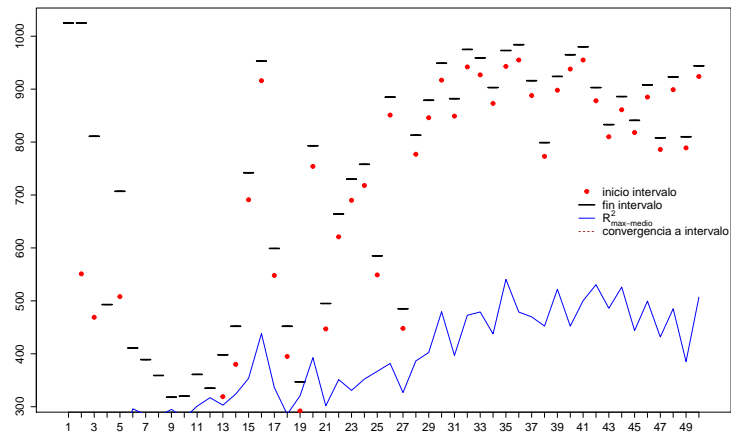


Figura 5.44: Intervalo óptimo SiO_2 : Detector NaI3x3 - Réplica B

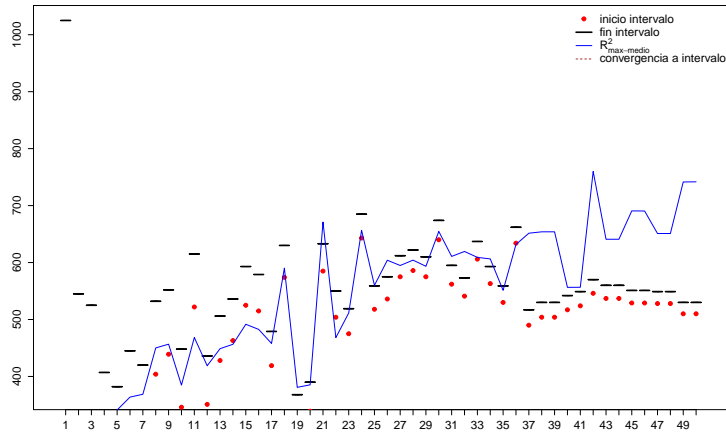


Figura 5.45: Intervalo óptimo SiO_2 : Detector NaI3x3 - Réplica C

Cuadro 5.23 a Cuadro 5.31 y Figura 5.37 a Figura 5.45 aparecen sintetizados en Cuadro 5.22, que nos da el intervalo de convergencia para el caso del SiO_2 .

Detector	Réplica	Intervalo SiO_2		
		Inicio	Final	R^2
BGO	A	220	245	0.958
	B	208	245	0.957
	C	206	232	0.950
NaI2x2	A	213	243	0.715
	B	236	268	0.703
	C	541	773	-
NaI3x3	A	-	-	-
	B	-	-	-
	C	-	-	-

Cuadro 5.32: SiO_2 —Convergencia intervalos R_{max}^2

Las conclusiones que se obtienen del análisis de Cuadro 5.23 a Cuadro 5.31 y figuras Figura 5.37 a Figura 5.45, así como de las gráficas de los espectros con fondo Figura 5.1 a Figura 5.9 y sin fondo Figura 5.19 a Figura 5.26 son:

Detección SiO_2 con detector BGO (espectros Figura 5.1, Figura 5.2 y Figura 5.3):

- Réplicas A, B y C. Detecta perfectamente la colina correspondiente al pico de energía del decaimiento del producto de activación neutrónica de la SiO_2 , $^{28}_{13}Al$, 1778.85 keV, canal 234.
- Conclusión: El conjunto de las 3 réplicas, estrechando el intervalo de interés, es el intervalo 210 / 235.

Detección SiO_2 con detector NaI2x2 (espectros Figura 5.4, Figura 5.5 y Figura 5.6):

- Réplica A. En los gráficos de los espectros la colina está mucho más baja y peor definida que con el detector BGO pero, aún así, es localizada.
- Réplica B. Detecta la colina.
- Réplica C. No detecta la colina debido a los problemas ya mencionados con los espectros de algunas muestras, que se aprecian más claramente en los espectros sin fondo, Figura 5.24
- Conclusión: El conjunto de las 3 réplicas es el intervalo 213 / 268.

Detección SiO_2 con detector NaI3x3 (espectros Figura 5.7, Figura 5.8 y Figura 5.9):

- Réplica A, B y C. No detecta la colina en ninguna réplica debido a la desalineación de los espectros de las distintas leyes. El CaF_2 es detectado porque la menor desalineación de los espectros con respecto a las réplicas A y B no era suficiente para evitar localizar la amplia zona que lo define pero en el caso del SiO_2 la colina es estrecha por lo que la desalineación causa que no se detecte.
- Conclusión: No se detecta por fallo en la toma de los espectros.

El caso de detección de la sílice en muestras de fluorita no fue estudiado en tesis anteriores [95] y [23], por lo que, como en el caso del CaF_2 , no se pueden contrastar. De todos modos, el algoritmo de búsqueda es capaz de localizar el intervalo de manera objetiva y con una correlación dada por R^2 de 0.99.

De Cuadro 5.23 a Cuadro 5.31 y Figura 5.37 a Figura 5.45 anteriores surge una observación importante:

Tiene importancia acotar el intervalo lo más posible a la colina del los pico de detección del SiO_2 y, en los casos en que fue detectada por estar bien los ensayos, se aprecia una notable diferencia en el valor de R^2 a partir de haber dividido el espectro entre 30 y 50 intervalos de manera tal, que se ciñan lo más posible al pico buscado pues está en una zona de ruido en la que cualquier desviación con respecto a éste afecta considerablemente a los resultados. Así pues, su detección es más difícil que el CaF_2 .

5.7. Áreas de decaimiento

Se analizará matemáticamente el proceso de activación cíclica simétrica considerando el tiempo de desplazamiento t_d y no despreciándolo. Primeramente se hará el desarrollo matemático del cálculo de las áreas de decaimiento durante el tiempo de lectura. Después se verá la representación gráfica de las curvas de activación y decaimiento considerando los tiempos de desplazamiento para comprender la simbología utilizada en el cálculo matemático de las áreas de decaimiento. Posteriormente, se compararán estas áreas de decaimiento con la suma de las cuentas en los ensayos en el intervalo de canales, determinado mediante la convergencia de R_{max}^2 , como óptimo para el cálculo de los contenidos de SiO_2 y CaF_2 .

5.7.1. Cálculo teórico áreas decaimiento

La concentración del isótopo de que se trate al final del primer tiempo de activación t_a vendrá dado, Ecuación 2.1, por

$$B_1 = k(1 - e^{-\lambda t_a}) \quad (5.1)$$

Se considera como origen de los tiempos $t = 0$, el momento en que tenemos B_1 , por lo que la activación causante habrá comenzado en $t = -t_a$.

El área de la curva de decaimiento iniciada en el punto anterior de este primer ciclo, durante el tiempo de lectura t_l , comprendido entre los tiempos t_d y $t_d + t_l$ será:

$$\begin{aligned}
a_1 &= B_1 \int_{t_d}^{t_d+t_l} e^{-\lambda t} dt \\
&= \frac{B_1}{\lambda} \left[-e^{-\lambda t} \right]_{t_d}^{t_d+t_l} \\
&= \frac{B_1}{\lambda} \left(e^{-\lambda t_d} - e^{-\lambda(t_d+t_l)} \right)
\end{aligned} \tag{5.2}$$

Caso de considerar despreciable t_d quedaría:

$$a_1 = \frac{B_1}{\lambda} \left(1 - e^{-\lambda t_l} \right)$$

El tiempo total de un ciclo de activación, desplazamiento y lectura será $T = t_d + t_l + t_d$.

Denominando a_n al área de decaimiento sin fondo de la curva iniciada en B_1 anterior, durante el tiempo de lectura de un ciclo n posterior, comprendido entre los tiempos $(n-1)T + t_d$ y $(n-1)T + t_d + t_l$ será:

$$\begin{aligned}
a_n &= B_1 \int_{(n-1)T+t_d}^{(n-1)T+t_d+t_l} e^{-\lambda t} dt \\
&= \frac{B_1}{\lambda} \left[-e^{-\lambda t} \right]_{(n-1)T+t_d}^{(n-1)T+t_d+t_l} \\
&= \frac{B_1}{\lambda} \left(e^{-\lambda((n-1)T+t_d)} - e^{-\lambda((n-1)T+t_d+t_l)} \right)
\end{aligned} \tag{5.3}$$

Esta función, para $n = 1$ da el resultado a_1 de la fórmula general anterior con t_d .

En cada ciclo n habrá que considerar el decaimiento del propio ciclo de activación y la suma de los decaimientos de todas los ciclos de activación anterior. Para cada nuevo ciclo, al tratarse de ciclos simétricos, se puede considerar que se produce un decalaje respecto a los anteriores. Por tanto la lectura unitaria sin fondo durante un ciclo deberá ser:

$$\begin{aligned}
A_1^{unit} &= a_1 \\
A_2^{unit} &= a_1 + a_2 = A_1^{unit} + a_2 \\
A_3^{unit} &= a_1 + a_2 + a_3 = A_2^{unit} + a_3 \\
&\vdots \\
A_n^{unit} &= a_1 + a_2 + \dots + a_n = A_{n-1}^{unit} + a_n = \sum_{i=1}^{i=n} a_i
\end{aligned} \tag{5.4}$$

Si se acumulase la suma en el lector, como realmente se ha medido, la lectura acumulada sin fondo en un ciclo n será la suma de todas las lecturas unitarias desde el primer ciclo hasta el ciclo considerado:

$$\begin{aligned}
 A_1^{acum} &= a_1 + a_2 = A_2^{unit} + A_1^{acum} = A_2^{unit} + A_1^{unit} \\
 A_3^{acum} &= a_1 + 2a_2 + a_3 = A_3^{unit} + A_2^{acum} = A_3^{unit} + A_2^{unit} + A_1^{unit} \\
 &\vdots \\
 A_n^{acum} &= a_1 + (n-1)a_2 + \dots + 2a_{n-1} + a_n = A_n^{unit} + A_{n-1}^{acum} = \sum_{i=1}^{i=n} A_i^{unit} \quad (5.5)
 \end{aligned}$$

5.7.2. Representación gráfica activación cíclica

Para el trazado gráfico de las curvas teóricas se considerarán un valor de λ y unos tiempos de activación, desplazamiento y lectura arbitrarios, adecuados para poder distinguir gráficamente todas las fases. Modificando los parámetros, se puede dibujar la representación exacta de cualquier ensayo con sus tiempos reales por lo que nos sirve para hacer simulaciones para diseñar nuevos experimentos.

Se trazarán 3 ciclos, suficientes para ver el comportamiento del decaimiento de un ciclo y su relación con los anteriores.

[Código 5.54](#) permite calcular la activación y decaimiento correspondiente a sus fórmulas, vistas en [2.4.6](#) y [Sección 2.4.11](#), cuya correspondencia es:

$$\begin{aligned}
 \text{activ} &< -\text{function}(x) \\
 &1 - \exp(-\text{lambda} * x) \quad R = k(1 - e^{-\lambda t}) \\
 B1 &< -\text{activ}(ta) \quad B_1 = k(1 - e^{-\lambda t_a}) \\
 \text{decaim} &< -\text{function}(x) \\
 &1 * \exp(-\text{lambda} * x) \quad N = N_0 e^{-\lambda t}
 \end{aligned}$$

$$\text{decaim} < -\text{function}(x) B1 * \exp(-\text{lambda} * x) N = N_0 e^{-\lambda t}$$

Como la activación es simétrica, es decir, los tiempos de activación, desplazamiento y lectura son iguales para todos los ciclos, el programa trasladará un ciclo cada curva o área igual a la de ciclos anteriores y añadirá el área de decaimiento en el nuevo ciclo del primer ciclo. El cálculo de las curvas y áreas a plotear se hace con [Código 5.54](#).

Código 5.54: Áreas de activación/lectura y desplazamiento teóricas.

```

# Parámetros arbitrarios
ta <- 5          # t1 == ta
td <- 1          # t desplazamiento
tc <- 2 * (ta + td) # t ciclo
n <- 5           # espacio de ciclos a plotear
lambda <- 0.1

activ <- function(x) 1-exp(-lambda*x)
B1 <- activ(ta)
decaim <- function(x) B1 * exp(-lambda*x)

# Áreas de decaimiento y desplazamiento.

# Las ordenadas no cambian para los distintos ciclos.
# Vamos decaíéndolas sobre el eje x, por lo que
# usaremos distintos vectores de abscisas.

activ0.x <- seq(0, ta, 0.01)
activ.y <- activ(activ0.x)

# Ploteamos la activación de tal modo que x = 0
# sea el origen del decaimiento.

activ1.x <- seq(-ta, 0, 0.01)
decaim1.x <- seq(0, n * tc, 0.01)
decaim.y <- decaim(decaim1.x)

# Decaimiento durante el desplazamiento a la zona
# de lectura
despl.x.l <- seq(0, td, 0.01)
despl.y.l <- decaim(despl.x.l)
# Decaimiento durante el desplazamiento a la zona
# de activación
despl.x.a <- seq(td + ta, 2 * td + ta, 0.01)
despl.y.a <- decaim(despl.x.a)

# Vamos a marcar las zonas de lectura redibujando
# las curvas de decaimiento en esas zonas con barras.

decaim1.lect.x <- seq(td, td + ta, 0.01)
decaim1.lect.y <- decaim(decaim1.lect.x)

```

```

# Decaimiento del ciclo 1 durante la lectura 2
decaim2.lect.x <- seq(td + tc, td + tc + ta, 0.01)
decaim2.lect.y <- decaim(decaim2.lect.x)

# Decaimiento del ciclo 1 durante la lectura 3
decaim3.lect.x <- seq(td + 2 * tc,
                     td + 2 * tc + ta, 0.01)
decaim3.lect.y <- decaim(decaim3.lect.x)

```

Ahora se puede proceder al trazado de las curvas y áreas con los desplazamientos adecuados según el ciclo considerado, [Código 5.55](#).

Código 5.55: Plot áreas de activación/lectura y desplazamiento teóricas

```

# Ploteado de áreas teóricas de decaimiento y
# desplazamiento.

# Curva ciclo 1
matplot(activ1.x, activ1.y, type="l",
        col = rgb(1, 0, 0), xlim=c(-ta, n * tc))
matplot(decaim1.x, decaim1.y,
        add=TRUE, type="l", col = rgb(1, 0, 0))

# Decaimiento durante el desplazamiento a la zona
# de lectura
matplot(despl.x.l,despl.y.l,
        add=TRUE, type="h", col="lightgray")

# Área de decaimiento ciclo del ciclo originario
# durante su tiempo de lectura: A1 unitaria == a1
# Ciclo 1
matplot(decaim1.lect.x, decaim1.lect.y,
        add=TRUE, type="h", col=rgb(1,0,0,alpha= 0.5),
        xlim=c(-ta, n * tc))

text(0, 0.05, "a1", pos = 2)
text(0, 0.06, "A1=", pos = 2)

# Decaimiento durante el desplazamiento a la zona
# de activación
matplot(despl.x.a, despl.y.a,
        add=TRUE, type="h", col="lightgray")

```

```

# Curva ciclo 2
matplot(activ1.x + tc, activ.y,
         type="l", add=TRUE, col = rgb(0,1,0))
matplot(decaim1.x + tc, decaim.y,
         type="l", add=TRUE, col = rgb(0,1,0))

# Decaimiento activación 2 durante el desplazamiento
# a la zona de lectura
matplot(despl.x.l + tc, despl.y.l,
         add=TRUE, type="h", col="lightgray")

# Decaimiento del ciclo 1 durante la lectura 2: a2
matplot(decaim2.lect.x , decaim2.lect.y,
         type="h", col=rgb(1,0,0,alpha= 0.5),
         add = TRUE)
text(tc, 0.04, "a2", pos = 2)

# Área de decaimiento ciclo del ciclo originario
# durante su tiempo de lectura: A1 unitaria == a1
# Ciclo 2
matplot(decaim1.lect.x + tc, decaim1.lect.y,
         type="h", col=rgb(0,1,0,alpha= 0.3),
         add = TRUE)
text(tc, 0.05, "a1+", pos = 2)
text(tc, 0.06, "A2=", pos = 2)
# A2 unitaria = a1 + a2

# Decaimiento durante el desplazamiento a la zona
# de activación
matplot(despl.x.a + tc, despl.y.a,
         add=TRUE, type="h", col="lightgray")

# Curva ciclo 3
matplot(activ1.x + 2 * tc, activ.y,
         type="l", add=TRUE, col = rgb(0, 0, 1))
matplot(decaim1.x + 2 * tc, decaim.y,
         type="l", add=TRUE, col = rgb(0, 0, 1))

# Decaimiento activación 2 durante el desplazamiento
# a la zona de lectura
matplot(despl.x.l + 2 * tc, despl.y.l,
         add=TRUE, type="h", col="lightgray")

```

```

# Decaimiento del ciclo 1 durante la lectura 3: a3
matplot(decaim3.lect.x, decaim3.lect.y,
        type="h", col = rgb(1,0,0,0.5), add = TRUE)
text(2 * tc, 0.03, "a3", pos = 2)

# Decaimiento del ciclo 2 durante la lectura 3: a2
# Desplazamos tc el ciclo 1 durante la lectura 2
matplot(decaim2.lect.x + tc, decaim2.lect.y,
        type="h", col = rgb(0,1,0,0.3), add = TRUE)
text(2 * tc, 0.04, "a2+", pos = 2)

# Área de decaimiento ciclo del ciclo originario
# durante su tiempo de lectura: A1 unitaria == a1
# Ciclo 3
matplot(decaim1.lect.x + 2 * tc, decaim1.lect.y,
        type="h", col=rgb(0,0,1,alpha= 0.05), add = TRUE)
text(2 * tc, 0.05, "a1+", pos = 2)
# A3 unitaria = a1 + a2 + a3

# Decaimiento durante el desplazamiento a la zona
# de activación
matplot(despl.x.a + 2 * tc, despl.y.a,
        add=TRUE, type="h", col="lightgray")
text(2 * tc, 0.06, "A3=", pos = 2)

# Decaimiento durante el desplazamiento a la zona
# de activación
matplot(despl.x.a + 2* tc, despl.y.a,
        add=TRUE, type="h", col="lightgray")

# Activación ciclo 4
matplot(activ1.x + 3 * tc, activ.y,
        type="l", add=TRUE, col = rgb(0, 1, 1))

```

El desarrollo paso a paso del código expuesto en *RStudio* permite ver cómo se van formando las curvas y áreas en el tiempo. Para la representación gráfica final ver la [Figura 5.46](#).

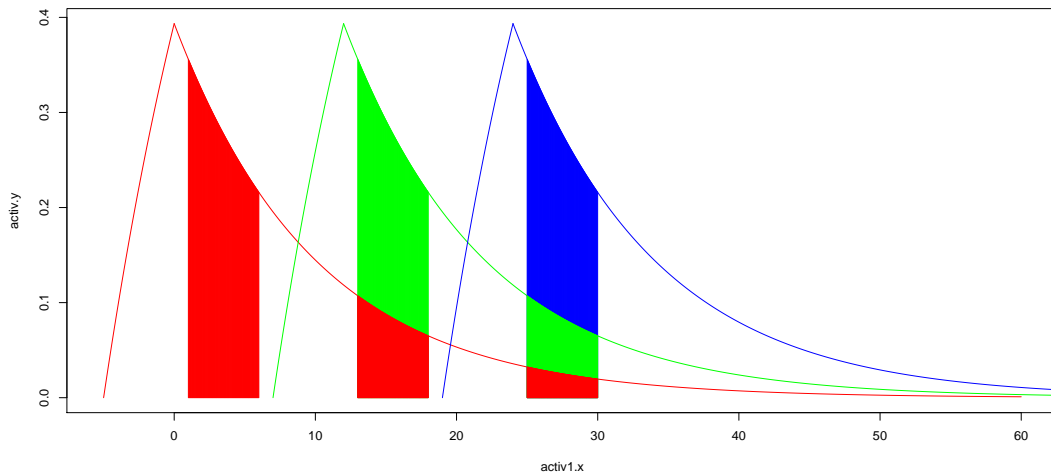


Figura 5.46: Activación cíclica. Curvas y áreas.

5.7.3. Áreas decaimiento teóricas

Los ensayos hechos, con un tiempo de activación y lectura de 12s y de desplazamiento de 0.325s son los mismos para el análisis de 2 elementos muy diferentes, CaF_2 y SiO_2 . La vida media de los productos obtenidos en la activación respectiva, ${}^{19}_9F(n, a){}^{16}_7N$ y ${}^{28}_{14}Si(N, P){}^{28}_{13}Al$, son muy diferentes, 7.14s y 134.4s respectivamente, lo que hace que la activación realizada de las muestras pueda considerarse independiente para cada ciclo en la CaO_2 por dar tiempo al decaimiento prácticamente total del producto obtenido en unos pocos ciclos (de hecho a_i se reduce aproximadamente a una décima parte en cada ciclo) y cíclica para la SiO_2 por lo contrario (necesita unos 20 ciclos para reducirse a_i a la décima parte).

Se puede calcular a_i , A_i^{unit} y A_i^{accum} para los 145 ciclos de los decaimientos de ambos productos.

a_i en un ciclo posterior i vendrá dada por la Ecuación 5.3. En el código será la expresión dada por la función `area.i(i, vida.media)`. A_i^{unit} será, según Ecuación 5.4 la suma de todos los $a_0 - a_i$ y A_i^{accum} , según Ecuación 5.5 la de todos los $A_0^{unit} - A_i^{unit}$. El código R es Código 5.56.

Código 5.56: Cálculo teórica áreas decaimiento CaF_2 y SiO_2

```
# Áreas de decaimiento teóricas
```

```
# Parámetros
```

```

# vida.media <- 7.14 seg - 7.140 s (CaF2)
#           2.24 min- 134.4 s    (SiO2)
# lambda <- log(2)/vida.media
ta <- 12           # tiempo de activación 12000 ms
tl <- 12           # tiempo de lectura 12000 ms
td <- 0.325       # tiempo de desplazamiento 325 ms
T <- ta + tl + 2*td # tiempo total ciclo

# área decaimiento en el tiempo de lectura de un ciclo
# i posterior.
area.i <- function(i, vida.media)
  exp(-log(2)*((i - 1)* T + td)/vida.media) -
  exp(-log(2)*((i - 1)* T + td + tl)/vida.media)

df <- data.frame(i=1:145)

# Areas de decaimiento en el tiempo de lectura de
# un ciclo posterior.
CaF2.decay <- transform(df, ai = area.i(i, 7.14))
SiO2.decay <- transform(df, ai = area.i(i, 134.4))

# Areas unitarias de decaimiento en un ciclo.
CaF2.decay <- transform(CaF2.decay,
  Ai.unit = cumsum(ai))
SiO2.decay <- transform(SiO2.decay,
  Ai.unit = cumsum(ai))

# Areas acumuladas de decaimiento en un ciclo.
CaF2.decay <- transform(CaF2.decay,
  Ai.acum = cumsum(Ai.unit))
SiO2.decay <- transform(SiO2.decay,
  Ai.acum = cumsum(Ai.unit))

```

Código 5.57 permite representar gráficamente la variación de a_i , A_i^{unit} y A_i^{acum} con el número de ciclo en los dos casos de análisis, CaF_2 y SiO_2 para ver la incidencia en ambos del número de activaciones.

Código 5.57: Plot CaF2.decay - SiO2.decay

```

# Ploteado ciclo - areas decaimiento teóricas

par(mfrow=c(3, 1), mar = c(2.5, 2.5, 2.5, 2.5))

# CaF2:

plot(CaF2.decay$i, CaF2.decay$ai,
      main = "Area decaimiento en ciclo posterior",
      xlab = "Ciclo", ylab = "Area",
      ylim = c(0,0.7), type = "l")
plot(CaF2.decay$i, CaF2.decay$Ai.unit,
      main = "Area decaimiento unitaria en ciclo",
      xlab = "Ciclo", ylab = "Area", col = "purple",
      ylim = c(0.65, 0.75), type = "l")
plot(CaF2.decay$i, CaF2.decay$Ai.acum,
      main = "Area decaimiento acumulada en ciclo",
      xlab = "Ciclo", ylab = "Area", col = "red",
      ylim = c(0, 110), type = "l")

# SiO2:

plot(SiO2.decay$i, SiO2.decay$ai,
      main = "Area decaimiento en ciclo posterior",
      xlab = "Ciclo", ylab = "Area",
      ylim = c(0, 0.06), type = "l")
plot(SiO2.decay$i, SiO2.decay$Ai.unit,
      main = "Area decaimiento unitaria en ciclo",
      xlab = "Ciclo", ylab = "Area", col = "purple",
      ylim = c(0.05, 0.51), type = "l")
plot(SiO2.decay$i, SiO2.decay$Ai.acum,
      main = "Area decaimiento acumulada en ciclo",
      xlab = "Ciclo", ylab = "Area", col = "red",
      ylim = c(0, 70), type = "l")

```

El resultado del cálculo podemos verlo, con 3 dígitos de precisión, en Cuadro 5.33, Cuadro 5.34 y gráficamente, para los 145 ciclos, en Figura 5.47 y Figura 5.48. En Cuadro 5.33, para $CaF_2 - {}^{16}_7N$, aparecen solamente los 10 primeros ciclos. Se ve que, a partir del quinto, con 3 dígitos de precisión, no hay incremento de las áreas. Para que ocurra lo mismo en el caso de $SiO_2 - {}^{28}_{13}Al$ es necesario llegar a los 40 ciclos, Cuadro 5.34.

Del análisis de estas tablas y figuras se sacan las siguientes conclusiones:

Análisis del CaF_2 (decaimiento del ${}^{16}_7N$)

- a_i puede considerarse despreciable a partir del tercer ciclo.
- Por tanto, A_i^{unit} puede considerarse que no crece, es decir, es constante, a partir del tercer ciclo.
- A^{accum} se puede considerar una recta ya que su crecimiento es constante.
- Esto concuerda con la vida media corta del ${}^{16}_7N$, de 7.14s, por lo que se puede considerar que la activación no es cíclica en el caso del análisis del CaF_2 por ser el tiempo de ciclo del orden de 24s, suficiente para que, como se ve, no haya influencia de unos ciclos de activación y decaimiento en otros posteriores.

Análisis del SiO_2 (decaimiento del ${}^{28}_{13}Al$)

- a_i puede considerarse despreciable a partir de los 20 ciclos.
- Por tanto, A_i^{unit} puede considerarse que no crece, es decir, es constante, a partir de 20 ciclos.
- A^{accum} se puede considerar una parábola hasta los 20 ciclos y una recta a partir de ahí.
- Esto concuerda con la vida media del ${}^{28}_{13}Al$, de 2.44 min, por lo que se puede considerar que la activación es cíclica en el caso del análisis del SiO_2 por ser el tiempo de ciclo del orden de 24s, insuficiente para que, como se ve, no haya influencia de unos ciclos de activación y decaimiento en otros posteriores. Se justifica así la idoneidad de la activación cíclica para el caso del análisis de SiO_2 ya que se logra un aumento de las cuentas que se pueden recoger en los canales de energía correspondientes. Otra cosa distinta, que se analizará posteriormente, es si el número de cuentas logrado es suficiente para justificar el método y lograr una precisión de análisis adecuada para un entorno industrial.

En [Subsección 5.7.4](#) y [Subsección 5.7.5](#) se va a ver si la evolución con los ciclos de A^{unit} medidos, es decir, la suma de las cuentas sin fondo, unitarias y no acumuladas, de los intervalos correspondientes, se corresponde con las curvas anteriores. El desarrollo teórico hecho en [Subsección 5.7.1](#) considera el decaimiento real de cada ciclo, para el que no hay interferencia del fondo. En principio, al poder considerarse el fondo como una constante, no influiría en la forma de las curvas, pero sí en el número de cuentas, por lo que enmascararía las cuentas reales producidas por el decaimiento y parecería que hay más de las que realmente hay por cada punto de ley, lo que resultaría engañoso

para determinar la precisión real. Esto no tenía importancia al determinar el intervalo óptimo de canales para el decaimiento de cada elemento, por lo que se podía hacer con intervalos con fondo y acumulados, que fueron los capturados originalmente en los experimentos.

i	a_i	A_i^{unit}	A_i^{acum}
1	0.667	0.667	0.667
2	0.061	0.728	1.394
3	0.006	0.733	2.127
4	0.001	0.734	2.861
5	0	0.734	3.595
6	0	0.734	4.329
7	0	0.734	5.062
8	0	0.734	5.796
9	0	0.734	6.53
10	0	0.734	7.263

Cuadro 5.33: Análisis de CaF_2 . Áreas de decaimiento ${}^{16}_7N$ en ciclo, unitaria y acumulada

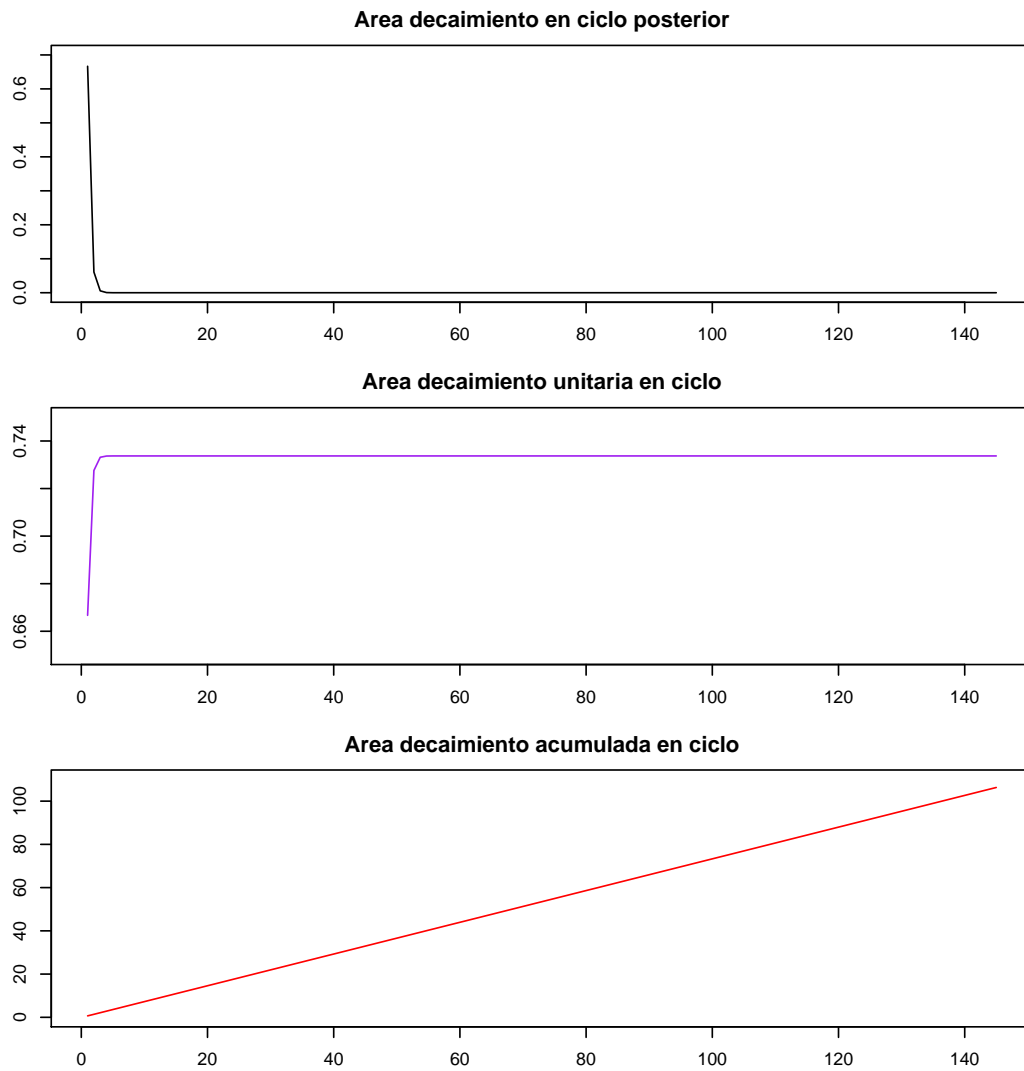


Figura 5.47: Análisis de CaF_2 . Áreas de decaimiento $^{16}_7N$ en ciclo, unitaria y acumulada

i	a_i	A_i^{unit}	A_i^{acum}
1	0.06	0.06	0.06
2	0.053	0.113	0.173
3	0.046	0.159	0.332
4	0.041	0.2	0.532
5	0.036	0.236	0.768
6	0.032	0.268	1.036
7	0.028	0.296	1.331
8	0.025	0.32	1.652
9	0.022	0.342	1.994
10	0.019	0.361	2.355
11	0.017	0.378	2.733
12	0.015	0.393	3.125
13	0.013	0.406	3.531
14	0.011	0.417	3.948
15	0.01	0.427	4.376
16	0.009	0.436	4.812
17	0.008	0.444	5.256
18	0.007	0.451	5.707
19	0.006	0.457	6.164
20	0.005	0.462	6.626
21	0.005	0.467	7.093
22	0.004	0.471	7.565
23	0.004	0.475	8.04
24	0.003	0.478	8.518
25	0.003	0.481	8.999
26	0.002	0.483	9.482
27	0.002	0.486	9.968
28	0.002	0.488	10.455
29	0.002	0.489	10.945
30	0.002	0.491	11.435
31	0.001	0.492	11.927
32	0.001	0.493	12.421
33	0.001	0.494	12.915
34	0.001	0.495	13.41
35	0.001	0.496	13.906
36	0.001	0.497	14.403
37	0.001	0.497	14.9
38	0.001	0.498	15.398
39	0	0.498	15.896
40	0	0.499	16.395

Cuadro 5.34: Análisis de SiO_2 . Áreas de decaimiento $^{28}_{13}Al$ en ciclo, unitaria y acumulada

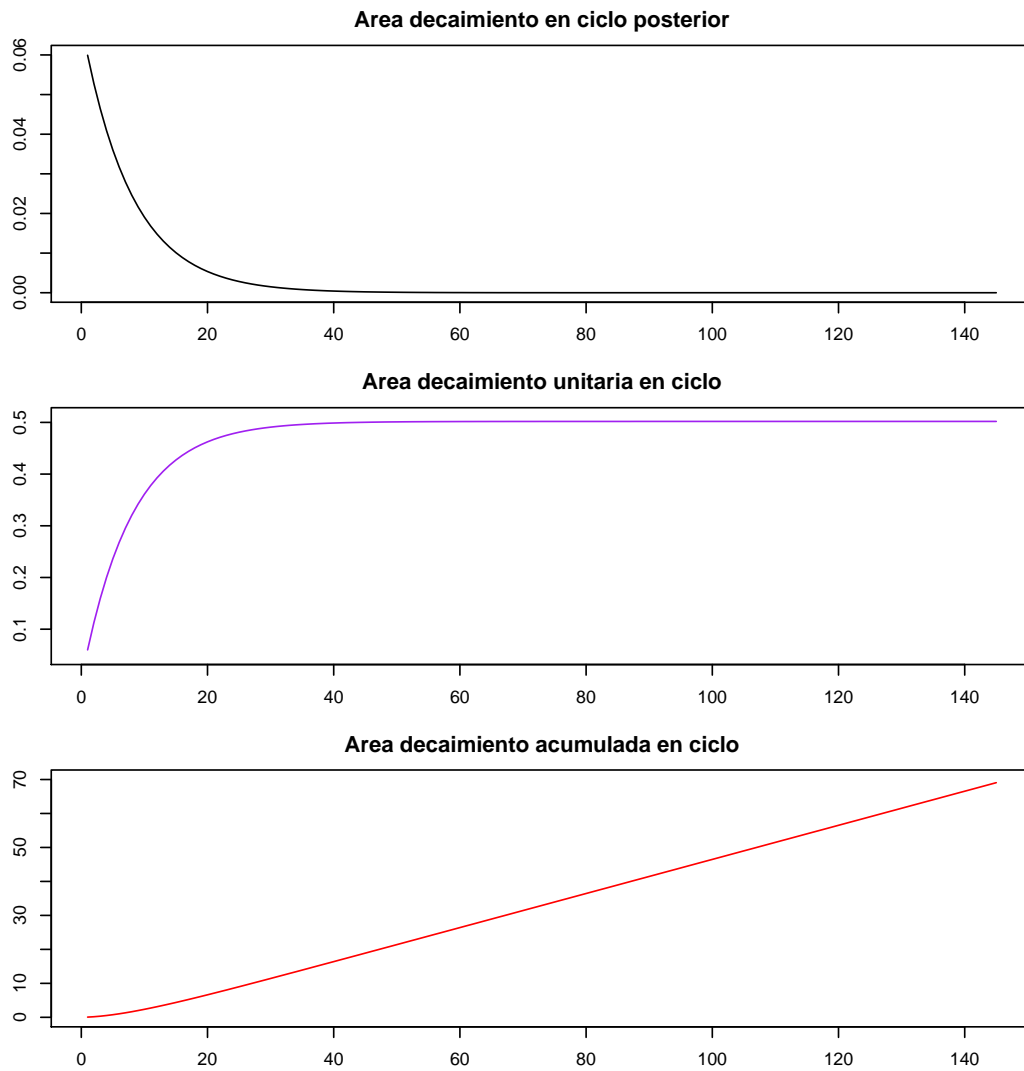


Figura 5.48: Análisis de SiO_2 . Áreas de decaimiento $^{28}_{13}Al$ en ciclo, unitaria y acumulada

5.7.4. Áreas decaimiento experimentales

Los ensayos hechos obtuvieron unos registros acumulados de los espectros en cada ciclo. Se necesita obtener los espectros correspondientes a cada ciclo unitario, sin fondo y sin acumular, que son los A_n^{unit} dados por la fórmula [Ecuación 5.4](#).

Se van a obtener estas A_n^{unit} para los detectores BGO y NaI2x2 para los intervalos determinados en [Subsección 5.6.2](#) y [Subsección 5.6.3](#) para CaF_2 y SiO_2 . No se considerarán en este apartado los ensayos con el detector NaI3x3 por no estar bien hechos aunque han servido perfectamente para determinar que el algoritmo de búsqueda de los intervalos de determinación no se deja engañar por tomas mal hechas e incluso por cambios de escala en los canales de registro.

Los intervalos óptimos de canales determinados por convergencia de R_{max}^2 son:

- CaF_2 ([Cuadro 5.6.2](#)): [600, 730] en el caso del detector de BGO.
- SiO_2 ([Cuadro 5.6.3](#)): [210, 235] en el caso del detector de BGO.

Primeramente se deben desarrollar algoritmos para poder obtener los espectros unitarios con fondo a partir de los registros originales de los espectros acumulados con fondo. Posteriormente se dará a esta base de datos la misma estructura que tienen la base de datos *exp.conj.acum.cf*, [Cuadro 5.2](#), para poder aplicar el algoritmo ya desarrollado *prm.intervalo.cf.sf(data, inicio, final)*, [Código 5.21](#), que permitirá obtener directamente los valores experimentales de A_{sf}^{unit} y A_{cf}^{unit} .

Obtención de espectros unitarios con fondo

Para tener la diferencia entre canales de ciclos consecutivos de un mismo ensayo, se obtendrá una base de datos con columnas de identificación iguales que en *exp.conj.acum.cf*, [Cuadro 5.2](#), pero esta vez el espectro no irá en una única columna sino que se separa en 1025 columnas correspondientes a los canales para obtener su diferencia.

La función *get.experimentos.canal(data, L, quim1, quim2)*, [Código 5.58](#), permitirá obtener la base de datos *exp.canal.acum.cf* correspondiente a los espectros originales acumulados con fondo. No necesita mayor explicación pues es similar a la función *get.experimentos(data, L, quim1, quim2)*, [Código 5.11](#), que nos permitía obtener *exp.conj.acum.cf*.

Código 5.58: get.experimentos.canal(data, L, quim1, quim2)

```
# 5 - Obtención de espectros unitarios para cada ciclo.
# De éstos tiene sentido obtener espectros medios,
# no así de los espectros acumulados originales.
```

```

# Parámetros con fondo y sin fondo para un intervalo
# dado con espectros unitarios y no acumulados, es
# decir, con los espectros que resultan de calcular la
# diferencia cada 2 espectros acumulados consecutivos
# para cada grupo de 145 ciclos.

library(plyr)      # join
library(stringr)  # str_split_fixed
library(data.table) # data.table
library(reshape2) # melt

# Necesitamos el equivalente a la dataframe
# 'exp.conj.acum.cf' con los canales separados para
# poder restar unos de otros.

get.experimentos.canal <- function (data, L, quim1,
                                   quim2)
{
  LCRD <- data.frame(str_split_fixed(names(data),
                                    "_", 4))

  names(LCRD) <- c ("leyes", "ciclo", "replica",
                  "detector")

  muestras <- data.frame(L, quim1, quim2)

  names(muestras) <- c("leyes", "CaF2", "SiO2")

  pl.experimentos <- join(LCRD, muestras,
                          by = "leyes")

  # Añadimos los espectros como columnas
  # independientes para cada canal y no como una
  # unidad en una única columna.

  return(data.frame(pl.experimentos,
                    data.frame(t(data))))
}

```

Ya se puede obtener la base de datos *exp.canal.acum.cf* con los canales en columnas independientes, [Código 5.59](#).

Código 5.59: exp.canal.acum.cf

```
exp.canal.acum.cf <-
  get.experimentos.canal(espectro.acum.cf, leyes,
                        CaF2, SiO2)

# 'espectro.acum.cf' variables 1025x11745 orig. acum.
# con fondo (cf)

# 'exp.canal.acum.cf' espectros originales cf acum.
# dim 11745 x 1031 (espectros acumulados en canales):
# row name(00_001_A_BGO) L C R D CaF2 SiO2 X1...X1025
```

Ahora se restarán los canales consecutivamente dentro de cada conjunto de 145 ciclos de un mismo experimento. La función *diff()* de *Rbase* elimina la primera fila al no tener otra fila que restarle. Se creará una función, *diff2()*, Código 5.60, que solucione este problema y considere un primer valor en cada fila correspondiente a un espectro 0.

Código 5.60: diff2()

```
# diff() resta elementos consecutivos pero elimina la
# primera fila y se pierden las referencias a los
# ciclos. Creamos una nueva función que mantenga una
# primera fila como 0s de los espectros de ciclo 0.

diff2 <- function(x) diff(c(0,x))
```

Con la función *diff2()* ya se pueden restar consecutivamente los canales de los 145 registros acumulados de cada experimento, tras haberlos agrupado por *leyes*, *ciclo*, *réplica* y *detector*, Código 5.61.

Código 5.61: exp.canal.unit.cf

```
# Restamos (diff2) consecutivamente los espectros
# acumulados para obtener los unitarios:

exp.canal.unit.cf <- ddply(exp.canal.acum.cf,
                          .(detector, replica, leyes),
                          numcolwise(diff2))

# 'exp.canal.unit.cf' espectros unitarios cf.
# dim 11745 x 1030 (espectros en canales):
```

```

# Se perdió la columna 'ciclo' y se desordenaron
# las primeras columnas.
# Además, numcolwise() aplicó diff2 a las columnas
# CaF2 y SiO2 que son numéricas. Como no las vamos
# necesitar para los parámetros, las eliminaremos.
# Si se quieren reconstruir se puede a partir de la
# columna 'leyes' y 'muestrs' con join (plyr).
# Las ordenamos como estaban en exp.canal.acum.cf.

exp.canal.unit.cf <-
  exp.canal.unit.cf[ , c(3, 2, 1, 6:1030)]

# Si no eliminásemos CaF2 y SiO2:
# exp.canal.unit.cf <-
#   exp.canal.unit.cf[ , c(3, 2, 1, 4:1030)]

# Ahora hay que introducir la columna 'ciclo' después
# de 'leyes'.

```

Para insertar la columna con las identificaciones de los ciclos repetimos el código ya visto en `get.experimentos.prev()`, [Código 5.9](#), para generar los ciclos con 3 dígitos y luego creamos una columna en que repetimos los 145 identificadores tantas veces como ensayos hay hechos, en este caso 81 (3 detectores, 3 réplicas, 9 muestras), [Código 5.62](#).

Código 5.62: exp.canal.unit.cf - identificación

```

# Vamos a insertar una columna ciclo con los 000 a 145
# repetidos 81 veces
# (3 detectores x 3 replicas x 9 leyes)

num_ciclos <- 145

ciclo <- c()
# Padding
for (i in 1: num_ciclos) {
  ciclo <- cbind(ciclo, ifelse(nchar(i) < 3,
    ifelse(nchar(i) == 1, sprintf("00 %d", i),
      sprintf("0 %d", i)), i))
}

#   sprintf es una instrucción tipo print() de C

```

```

ciclo <- rep(ciclo, 81)
exp.canal.unit.cf <- cbind(exp.canal.unit.cf[,1],
                          ciclo,
                          exp.canal.unit.cf[,2:1028])

names(exp.canal.unit.cf) <-
  c("leyes", names(exp.canal.unit.cf)[2:1029])

```

Finalmente, se pueden tomar todas las columnas de los canales y juntarlas en una única celda para que el *espectro* forme un único conjunto en cada celda, formando así la base de datos *exp.conj.unit.cf*, [Código 5.63](#), similar en estructura, como hemos dicho, a *exp.conj.acum.cf*, . [Cuadro 5.2](#).

Código 5.63: exp.conj.unit.cf

```

# Obtenemos 'exp.conj.unit.cf' para poder usar
# prm.intervalo.cf.sf (los fondos son medios)

# Transformamos 'exp.canal.unit.cf' a la estructura
# D R L C CaF2 SiO2 espectro conjunto [206, 268]

df <- exp.canal.unit.cf[,7:ncol(exp.canal.unit.cf)]

df <- split(as.matrix(df), row(df))
# Si no se pone as.matrix(), se cuelga con:

exp.conj.unit.cf <-
  cbind(exp.canal.unit.cf[,1:6], I(df))

names(exp.conj.unit.cf) <-
  c(names(exp.canal.unit.cf[,1:6]), "espectro")

# Eliminamos la base de datos intermedia df que es
# grande y no la necesitamos.

rm(df)

```

Parametrización espectros unitarios con fondo

A partir de *exp.conj.acum.cf* es fácil obtener la suma de las cuentas de un intervalo definido por sus canales de inicio y final utilizando la función *prm.intervalo.cf.sf(data, inicio, final)*, definida en [Código 5.21](#). Esta función utiliza internamente la función *lista_lista.sf(lista)*, que permite corregir el fondo, por lo que se pueden obtener las sumas de las cuentas de los canales o parámetros con y sin fondo simultáneamente. Para la comparación con los valores teóricos A_n^{unit} , [Ecuación 5.4](#), utilizaremos los parámetros con el fondo corregido.

Los parámetros para los intervalos correspondientes al análisis de SiO_2 y CaF_2 se obtendrán, aplicando *prm.intervalo.cf.sf(data, inicio, final)* con el código dado por [Código 5.64](#) y [Código 5.65](#).

Código 5.64: Ai.SiO2.unit

```
Ai.SiO2.unit <- prm.intervalo.cf.sf(exp.conj.unit.cf,
                                210, 235)
```

Código 5.65: Ai.CaF2.unit

```
Ai.CaF2.unit <- prm.intervalo.cf.sf(exp.conj.unit.cf,
                                600, 730)
```

5.7.5. Comparación áreas decaimiento teóricas y experimentales

Funciones auxiliares de comparación

Las áreas unitarias sin fondo teóricas las tenemos en la columna *Ai.unit* de las bases de datos *SiO2.decay* y *CaF2.decay*, [Código 5.56](#), tal como se puede ver en [Cuadro 5.34](#) y [Cuadro 5.33](#).

Las *Ai.unit* están calculadas para una muestra unitaria, por lo que para poder compararlas con los datos experimentales de cada muestra será necesario multiplicarlas por un coeficiente de proporcionalidad, *coef.prop*, que resulta de hacer la media de las divisiones entre todas los parámetros sin fondo experimentales y los teóricos.

Código 5.66: Coeficiente de proporcionalidad

```
# Proporcionalidad datos experimentales
# 'BGO_A_02.SiO2$Prm.sf' y teóricos
# 'SiO2.decay$Ai.unit'
```

```
coef.prop <- mean(data$Prm.sf / SiO2.decay$Ai.unit)

# En el caso de CaF2:

coef.prop <- mean(data$Prm.sf / CaF2.decay$Ai.unit)
```

Este coeficiente lo utilizaremos dentro de la función que nos permite plotear simultáneamente $A_t^{unit\ teor}$, $A_e^{unit\ xp}$ y una media móvil de los datos experimentales para comparar más fácilmente con los datos teóricos. La media móvil toma en cada punto la media de una serie de datos para suavizar la curva, por defecto hemos tomado la media móvil de 30 puntos. La función parece más complicada de lo que en realidad es debido al hecho de que plotea y pone títulos de identificación de cada gráfica.

Código 5.67: plot.Ai

```
# Función para plotear Ai experimentales, medias
# móviles y teóricos frente a ciclos.

library(caTools) # Running mean (media móvil):
library(TTR) # SD acumulada

plot.Ai <- function(data, coef, parametro,
                    mediamov = 30) {

  plot.ts(data$Prm.sf, type = "b", col = "blue", pch = 1,
    main = bquote(atop( A[i]^unit.exp. - A[i]^unit.teor.,
      .(parametro))),
    xlab = "Ciclo", ylab = "Ai", ylim = c(-20, 120),
    xaxt = "n", yaxt = "n")

  axis(1, at=seq(0, 155, by=10)) #eje x
  axis(2, at=seq(-20, 155, by=10)) # eje y
  # Media móvil (running mean)
  # Por defecto toma 30 datos)
  points(1:145, runmean(data$Prm.sf, mediamov,
    alg = "fast"), type = "l", col = "red")
  # Curva teórica y coef. proporcionalidad.
  # points(1:145, CaF2.decay$Ai.unit * coef,
  #       type = "l", col = "black")
  points(1:145, SiO2.decay$Ai.unit * coef,
    type = "l", col = "black")
```

```

# Media unitaria acumulada
data$cumsum <- cumsum(data$Prm.sf)/(1:145)
points(1:145, data$cumsum,
       type = "l", col = "green", lwd = 2)
# Desviación estándar acumulada
cumsd <- runSD(data$Prm.sf, cumulative = TRUE) #TTR
points(1:145, cumsd,
       type = "l", col = "brown")

# legend("topleft",
legend("bottomright",
      c(expression(A[i]^unit.exp.),
        "Media móvil",
        expression(A[i]^unit.teor.),
        expression(A[i.media.acum]^unit.exp.),
        "Desv. estándar acum."),
      col = c('blue', 'red', 'black', 'green',
              'brown'),
      lty = 1,
      pch = c(1, NA_integer_, NA_integer_,
              NA_integer_, NA_integer_),
      bty = "n")
}

```

Ploteado áreas unitarias de decaimiento frente a ciclo

De las bases de datos *Ai.SiO2.unit*, [Código 5.64](#), y *Ai.CaF2.unit* [Código 5.65](#), se extraerán los grupos de 145 ciclos de cada experimento con el detector BGO, réplica A, y les aplicaremos las funciones anteriores.

Primero se obtienen las gráficas comparativas para los ensayos con el detector BGO, réplica A, para el caso de análisis del SiO_2 .

Código 5.68: plot.BGO_A.Ai.SiO2.unit - ciclo

```

# SiO2
#####

# 75.42 % SiO2 - '02' BGO_A_02.SiO2

data <- Ai.SiO2.unit[Ai.SiO2.unit$detector=="BGO" &
                   Ai.SiO2.unit$replica == "A" &

```

```
      Ai.SiO2.unit$leyes=="02", ]

coef.prop <- mean(data$Prm.sf / SiO2.decay$Ai.unit)

plot.Ai(data, coef.prop,
        "75.42 %" ~ SiO[2] ~ "210 - 235")

#####

# 38.23 % SiO2 - '11' BGO_A_11.SiO2

data <- Ai.SiO2.unit[Ai.SiO2.unit$detector=="BGO" &
                    Ai.SiO2.unit$replica == "A" &
                    Ai.SiO2.unit$leyes=="11", ]

coef.prop <- mean(data$Prm.sf / SiO2.decay$Ai.unit)

plot.Ai(data, coef.prop,
        "38.23 %" ~ SiO[2] ~ "210 - 235")

#####

# 55.17 % SiO2 - '27'

data <- Ai.SiO2.unit[Ai.SiO2.unit$detector=="BGO" &
                    Ai.SiO2.unit$replica == "A" &
                    Ai.SiO2.unit$leyes=="27", ]

coef.prop <- mean(data$Prm.sf / SiO2.decay$Ai.unit)

plot.Ai(data, coef.prop,
        "55.17 %" ~ SiO[2] ~ "210 - 235")

#####

# 36.88 % SiO2 - '42'

data <- Ai.SiO2.unit[Ai.SiO2.unit$detector=="BGO" &
                    Ai.SiO2.unit$replica == "A" &
                    Ai.SiO2.unit$leyes=="42", ]

coef.prop <- mean(data$Prm.sf / SiO2.decay$Ai.unit)

plot.Ai(data, coef.prop,
        "36.88 %" ~ SiO[2] ~ "210 - 235")
```

```
#####  
  
# 25.26% SiO2 - '60'  
  
data <- Ai.SiO2.unit[Ai.SiO2.unit$detector=="BGO" &  
  Ai.SiO2.unit$replica == "A" &  
  Ai.SiO2.unit$leyes=="60", ]  
  
coef.prop <- mean(data$Prm.sf / SiO2.decay$Ai.unit)  
  
plot.Ai(data, coef.prop,  
  "25.26%" ~ SiO[2] ~ "210 - 235")  
  
#####  
  
# 14.06% SiO2 - '76'  
  
data <- Ai.SiO2.unit[Ai.SiO2.unit$detector=="BGO" &  
  Ai.SiO2.unit$replica == "A" &  
  Ai.SiO2.unit$leyes=="76", ]  
  
coef.prop <- mean(data$Prm.sf / SiO2.decay$Ai.unit)  
  
plot.Ai(data, coef,  
  "14.06%" ~ SiO[2] ~ "210 - 235")  
  
#####  
  
# 5.04% SiO2 - '91'  
  
data <- Ai.SiO2.unit[Ai.SiO2.unit$detector=="BGO" &  
  Ai.SiO2.unit$replica == "A" &  
  Ai.SiO2.unit$leyes=="91", ]  
  
coef.prop <- mean(data$Prm.sf / SiO2.decay$Ai.unit)  
  
plot.Ai(data, coef.prop,  
  "5.04%" ~ SiO[2] ~ "210 - 235")  
  
#####  
  
# 0.92% SiO2 - '98'
```



```

data <- Ai.SiO2.unit[Ai.SiO2.unit$detector=="BGO" &
                    Ai.SiO2.unit$replica == "A" &
                    Ai.SiO2.unit$leyes=="98", ]

coef.prop <- mean(data$Prm.sf / SiO2.deca$Ai.unit)

plot.Ai(data, coef.prop,
         "0.92 %" ~ SiO[2] ~ "210 - 235")

```

Las gráficas comparativas obtenidas se muestran en [Figura 5.49](#) a [Figura 5.56](#).

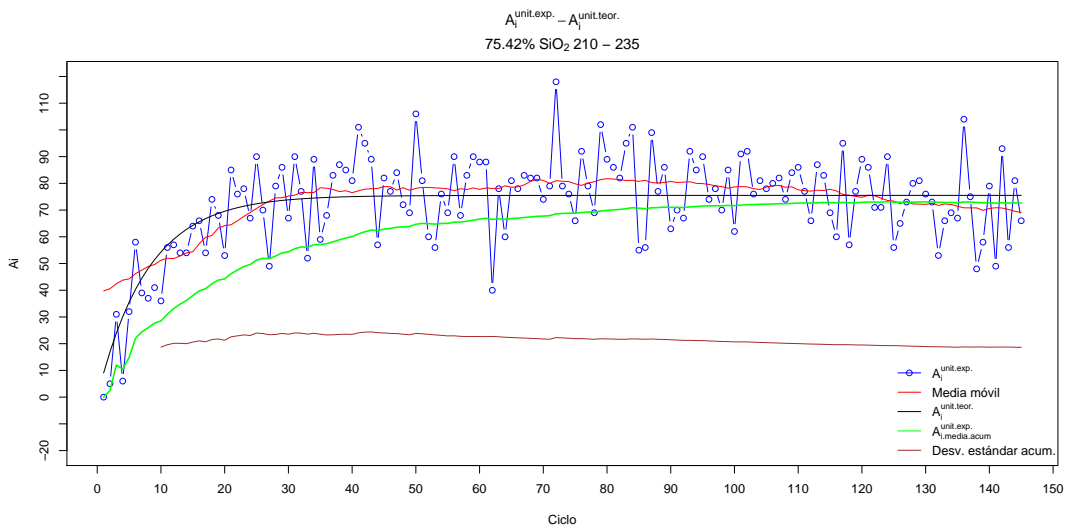


Figura 5.49: Comparación para el análisis del silicio entre áreas de decaimiento teóricas y experimentales por detector, réplica y muestra. BGO_A_02.AiSiO2.

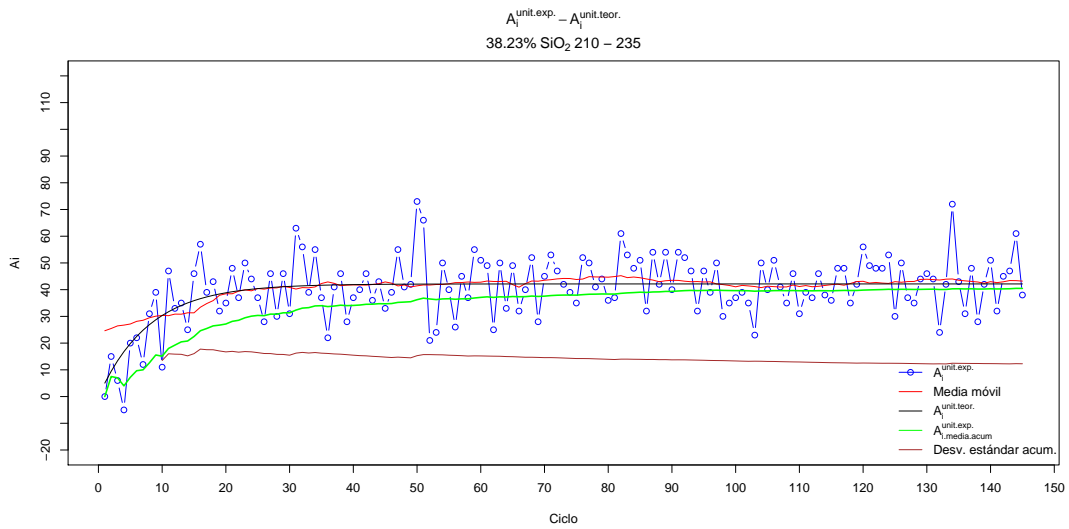


Figura 5.50: Comparación para el análisis del silicio entre áreas de decaimiento teóricas y experimentales por detector, réplica y muestra. BGO_A_11.AiSiO₂.

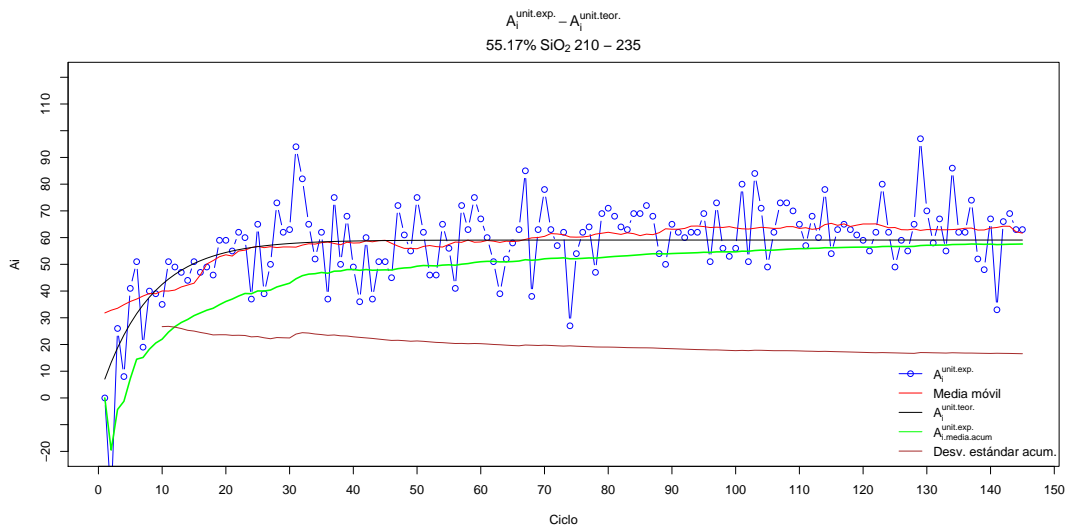


Figura 5.51: Comparación para el análisis del silicio entre áreas de decaimiento teóricas y experimentales por detector, réplica y muestra. BGO_A_27.AiSiO₂.

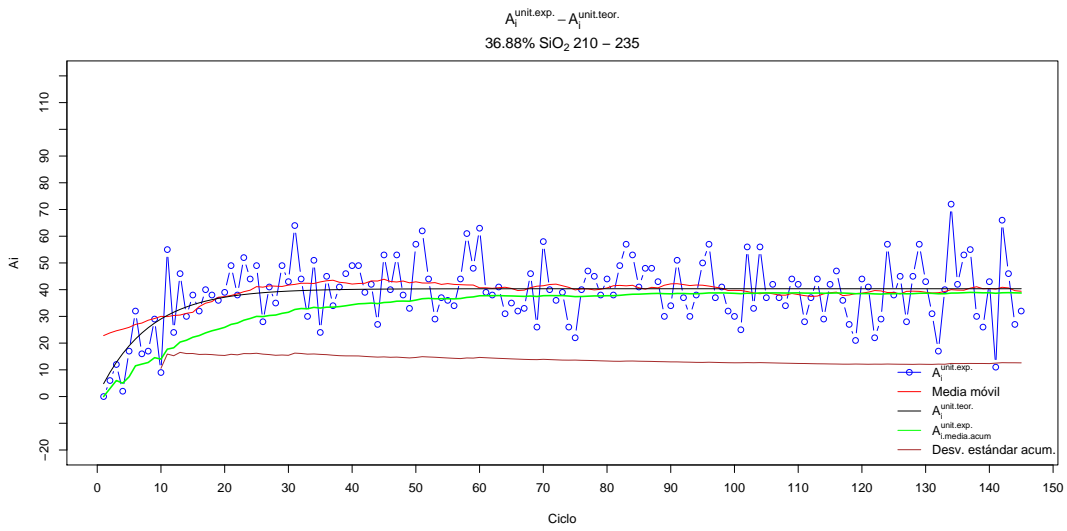


Figura 5.52: Comparación para el análisis del silicio entre áreas de decaimiento teóricas y experimentales por detector, réplica y muestra. BGO_A_42.AiSiO₂.

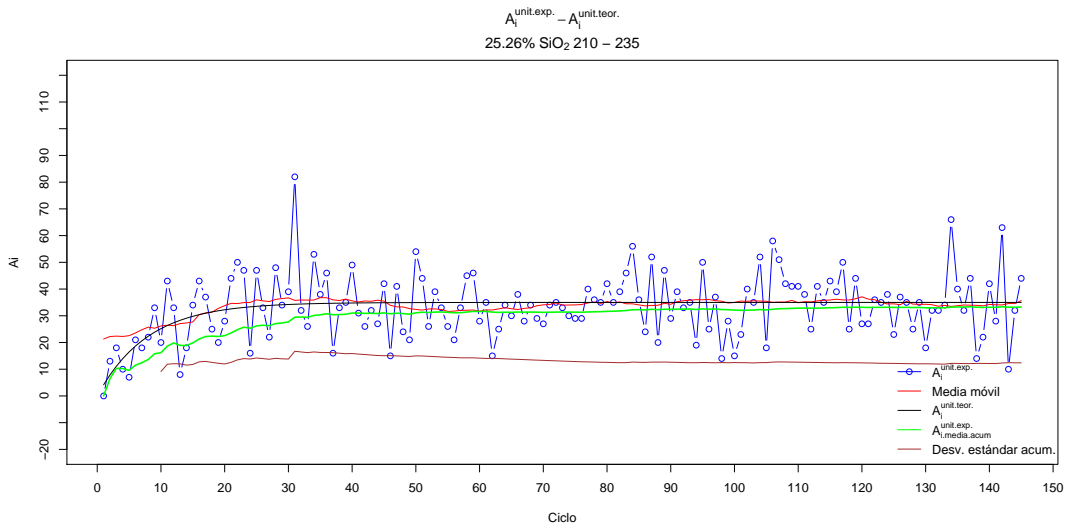


Figura 5.53: Comparación para el análisis del silicio entre áreas de decaimiento teóricas y experimentales por detector, réplica y muestra. BGO_A_60.AiSiO₂.

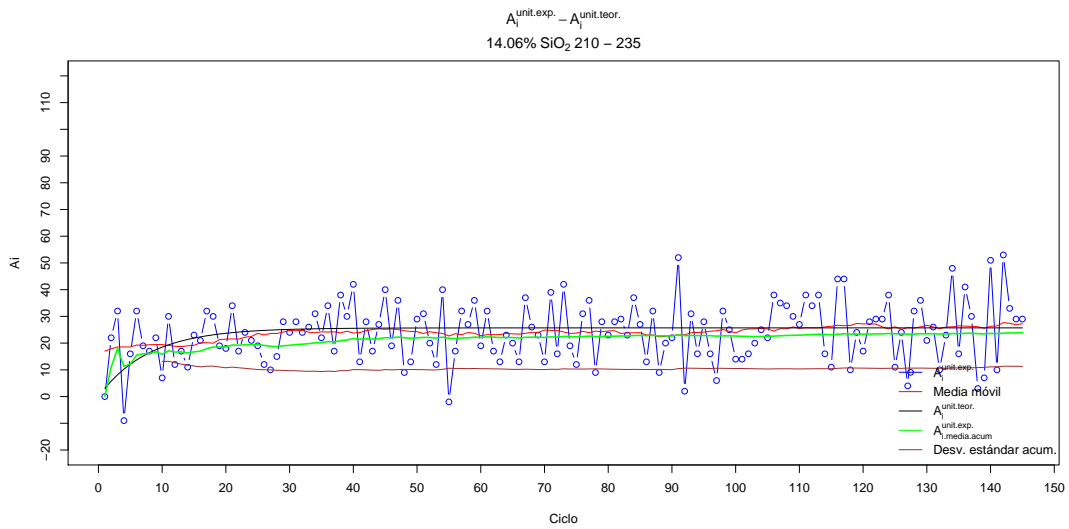


Figura 5.54: Comparación para el análisis del silicio entre áreas de decaimiento teóricas y experimentales por detector, réplica y muestra. BGO_A_76.AiSiO₂.

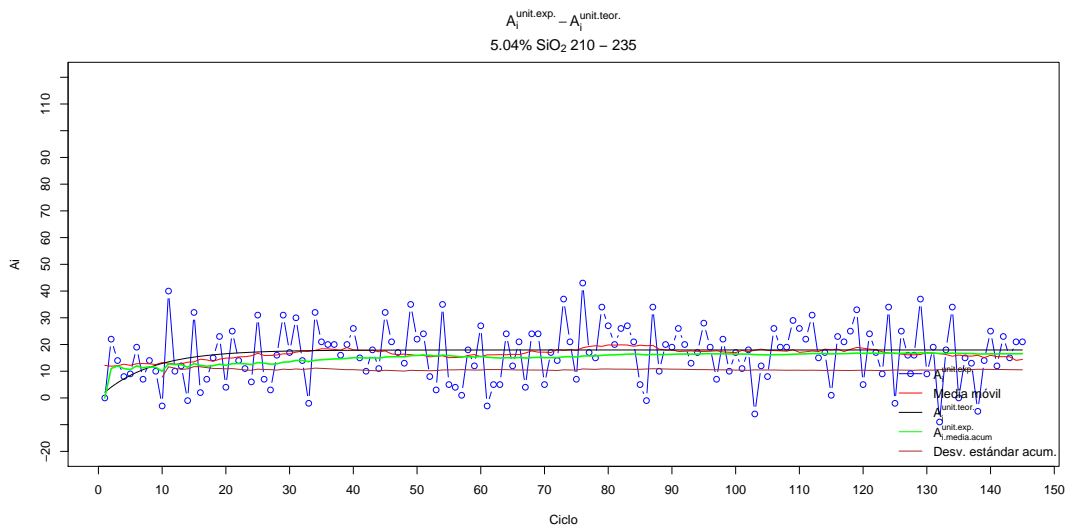


Figura 5.55: Comparación para el análisis del silicio entre áreas de decaimiento teóricas y experimentales por detector, réplica y muestra. BGO_A_91.AiSiO₂.

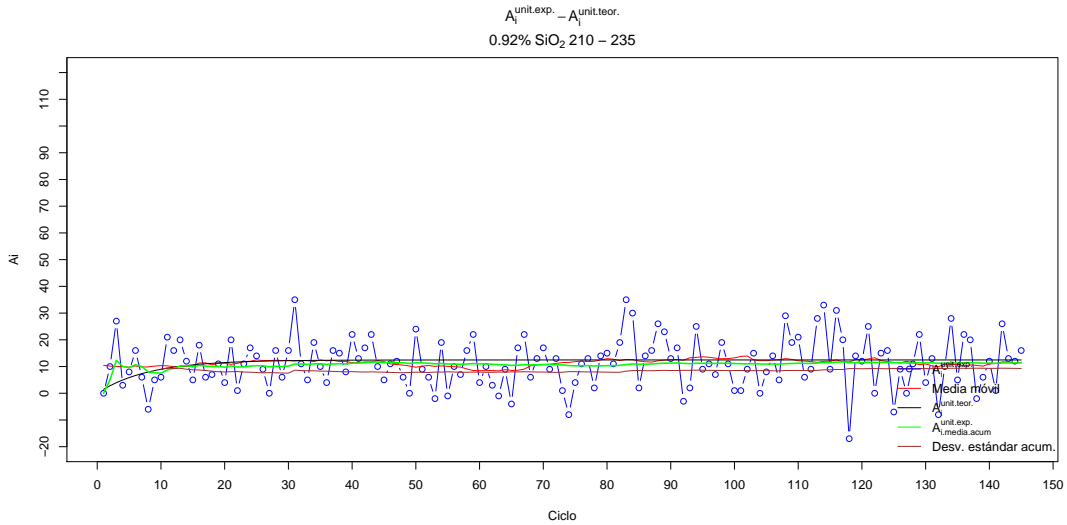


Figura 5.56: Comparación para el análisis del silicio entre áreas de decaimiento teóricas y experimentales por detector, réplica y muestra. BGO_A_98.AiSiO2.

Ahora se obtienen las gráficas comparativas para los mismos ensayos con el detector BGO, réplica A, para el caso de análisis del CaF_2 .

Código 5.69: plot.BGO_A.Ai.CaF2.unit - ciclo

```
# CaF2
# En plot.Ai hay que utilizar
# points(1:145, CaF2.decay$Ai.unit * coef,
#       type = "l", col = "black")
#       ylim = c(-20, 150)
# axis(2, at=seq(-20, 155, by=10)) # eje y
#####

#90.98 % CaF2 - '91'

data <- Ai.CaF2.unit[Ai.CaF2.unit$detector=="BGO" &
                    Ai.CaF2.unit$replica == "A" &
                    Ai.CaF2.unit$leyes=="91", ]

coef.prop <- mean(data$Prm.sf / SiO2.decay$Ai.unit)

plot.Ai(data, coef.prop,
        "90.98 %" ~ CaF[2] ~ "600 - 730")
```

```
#####

# 76.50 % CaF2 - '76'

data <- Ai.CaF2.unit[Ai.CaF2.unit$detector=="BGO" &
  Ai.CaF2.unit$replica == "A" &
  Ai.CaF2.unit$leyes=="76", ]

coef.prop <- mean(data$Prm.sf / SiO2.decay$Ai.unit)

plot.Ai(data, coef.prop,
  "76.50 %" ~ CaF[2] ~ "600 - 730")

#####

# 59.92 % CaF2 - '60'

data <- Ai.CaF2.unit[Ai.CaF2.unit$detector=="BGO" &
  Ai.CaF2.unit$replica == "A" &
  Ai.CaF2.unit$leyes=="60", ]

coef.prop <- mean(data$Prm.sf / SiO2.decay$Ai.unit)

plot.Ai(data, coef.prop,
  "59.92 %" ~ CaF[2] ~ "600 - 730")

#####

# 42.05 % CaF2 - '42'

data <- Ai.CaF2.unit[Ai.CaF2.unit$detector=="BGO" &
  Ai.CaF2.unit$replica == "A" &
  Ai.CaF2.unit$leyes=="42", ]

coef.prop <- mean(data$Prm.sf / SiO2.decay$Ai.unit)

plot.Ai(data, coef.prop,
  "42.05 %" ~ CaF[2] ~ "600 - 730")

#####

# % 27.05CaF2 - '27'
```

```

data <- Ai.CaF2.unit[Ai.CaF2.unit$detector=="BGO" &
                    Ai.CaF2.unit$replica == "A" &
                    Ai.CaF2.unit$leyes=="27", ]

coef.prop <- mean(data$Prm.sf / SiO2.decay$Ai.unit)

plot.Ai(data, coef.prop,
        "27.05 %" ~ CaF[2] ~ "600 - 730")

#####

# 11.39 % CaF2 - '11'

data <- Ai.CaF2.unit[Ai.CaF2.unit$detector=="BGO" &
                    Ai.CaF2.unit$replica == "A" &
                    Ai.CaF2.unit$leyes=="11", ]

coef.prop <- mean(data$Prm.sf.prop / SiO2.decay$Ai.unit)

plot.Ai(data, coef,
        "11.39 %" ~ CaF[2] ~ "600 - 730")

#####

# 2.28 % CaF2 - '02'

data <- Ai.CaF2.unit[Ai.CaF2.unit$detector=="BGO" &
                    Ai.CaF2.unit$replica == "A" &
                    Ai.CaF2.unit$leyes=="02", ]

coef.prop <- mean(data$Prm.sf / SiO2.decay$Ai.unit)

plot.Ai(data, coef.prop,
        "2.28 %" ~ CaF[2] ~ "600 - 730")

```

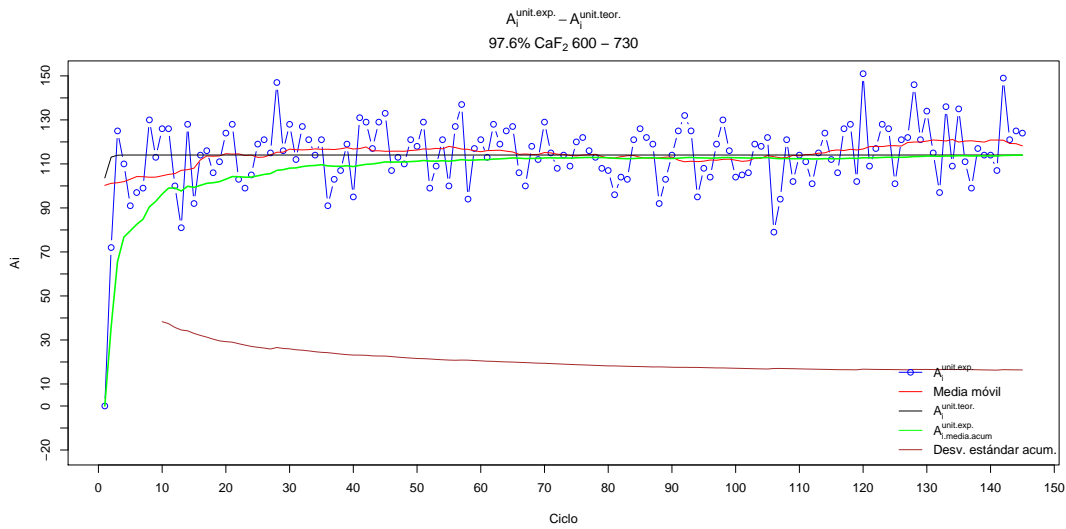


Figura 5.57: Comparación para el análisis del silicio entre áreas de decaimiento teóricas y experimentales por detector, réplica y muestra. BGO_A_98.AiCaF2.

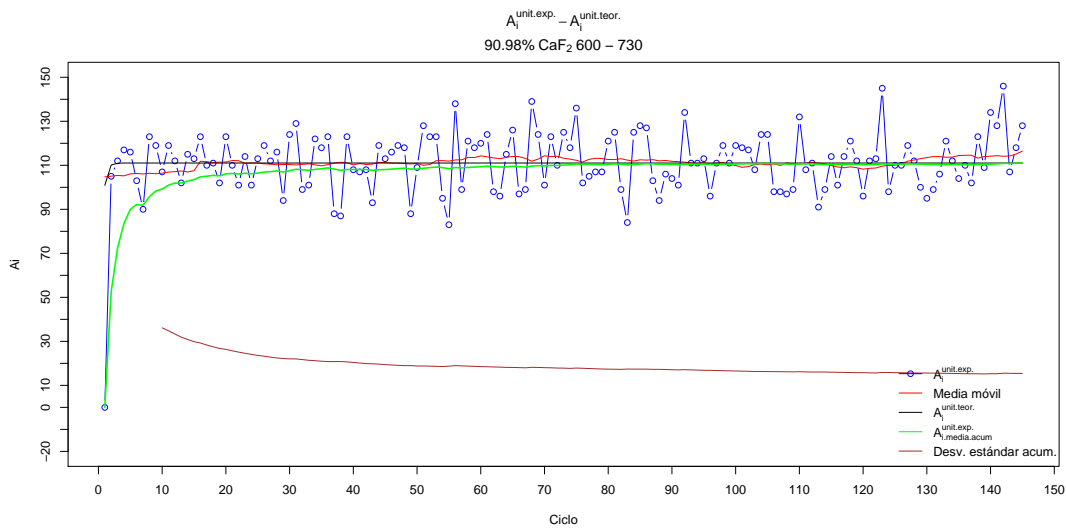


Figura 5.58: Comparación para el análisis del silicio entre áreas de decaimiento teóricas y experimentales por detector, réplica y muestra. BGO_A_91.AiCaF2.

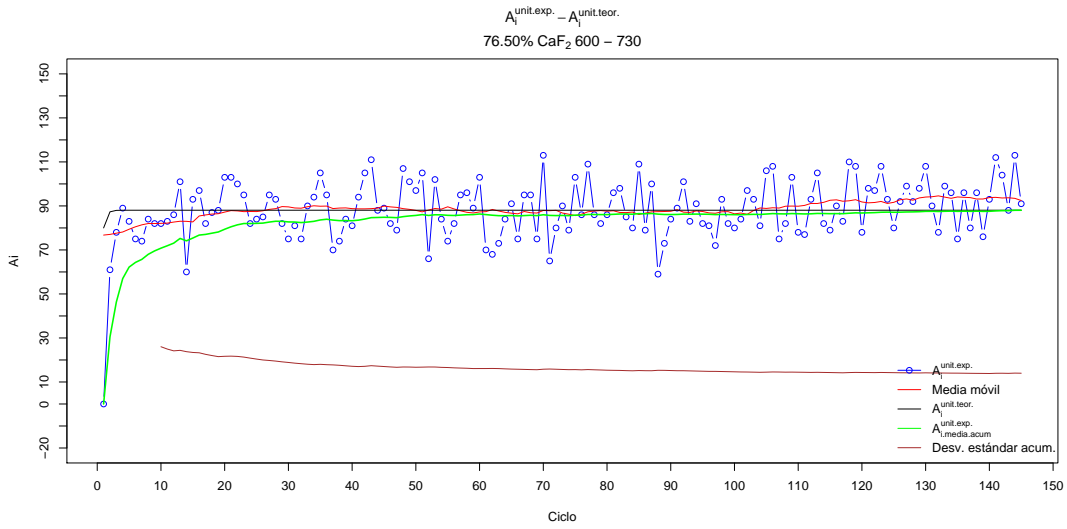


Figura 5.59: Comparación para el análisis del silicio entre áreas de decaimiento teóricas y experimentales por detector, réplica y muestra. BGO_A_76.AiCaF2.

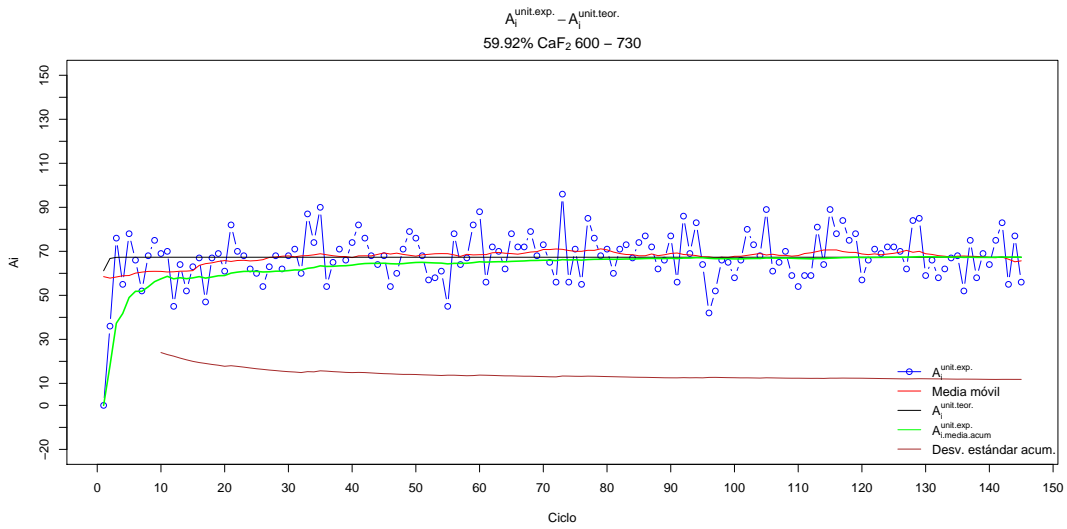


Figura 5.60: Comparación para el análisis del silicio entre áreas de decaimiento teóricas y experimentales por detector, réplica y muestra. BGO_A_60.AiCaF2.

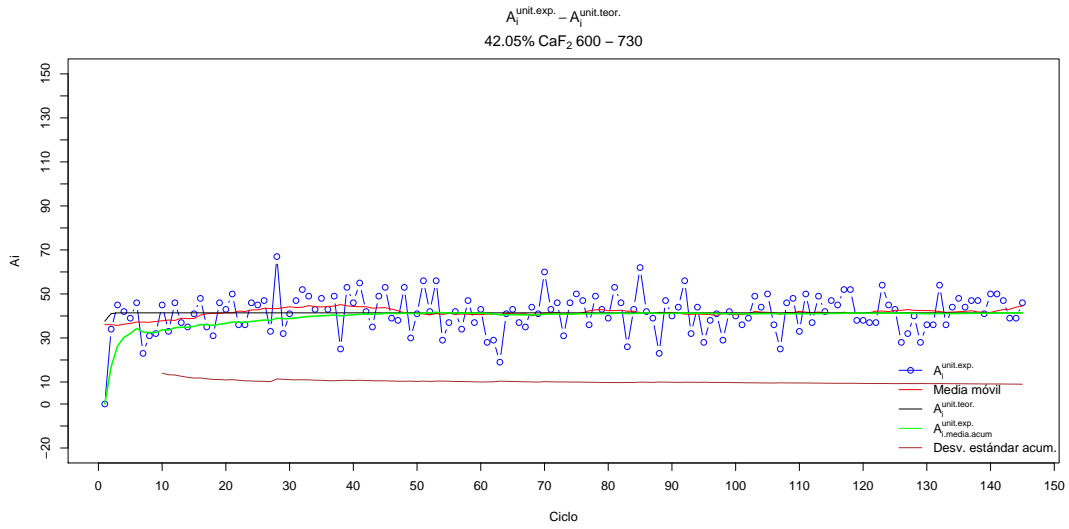


Figura 5.61: Comparación para el análisis del silicio entre áreas de decaimiento teóricas y experimentales por detector, réplica y muestra. BGO_A_42.AiCaF2.

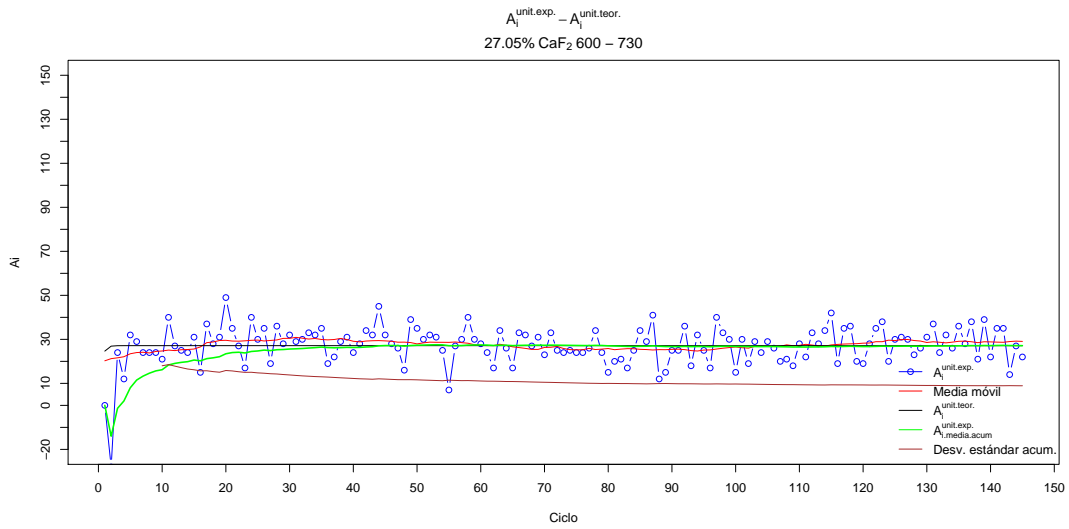


Figura 5.62: Comparación para el análisis del silicio entre áreas de decaimiento teóricas y experimentales por detector, réplica y muestra. BGO_A_27.AiCaF2.

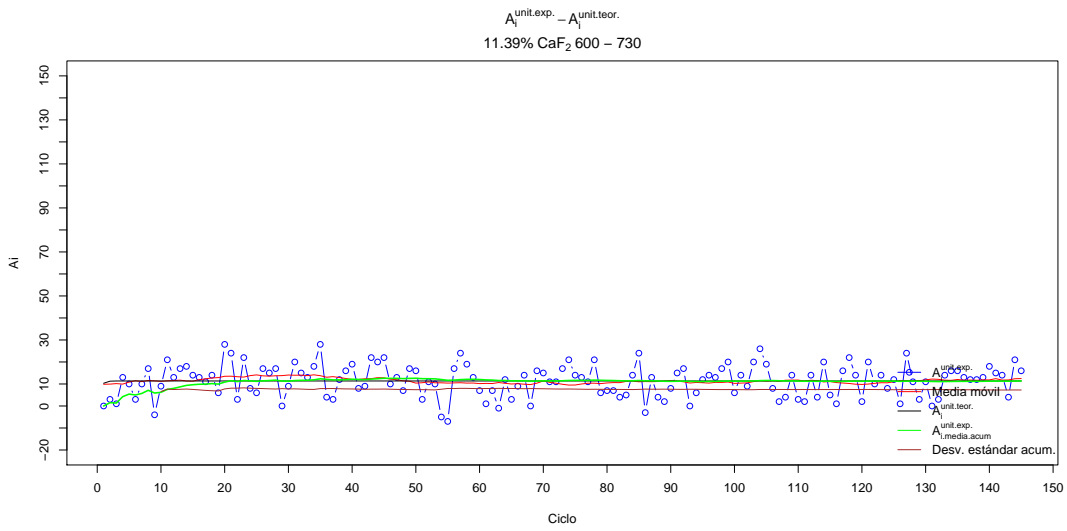


Figura 5.63: Comparación para el análisis del silicio entre áreas de decaimiento teóricas y experimentales por detector, réplica y muestra. BGO_A_11.AiCaF2.

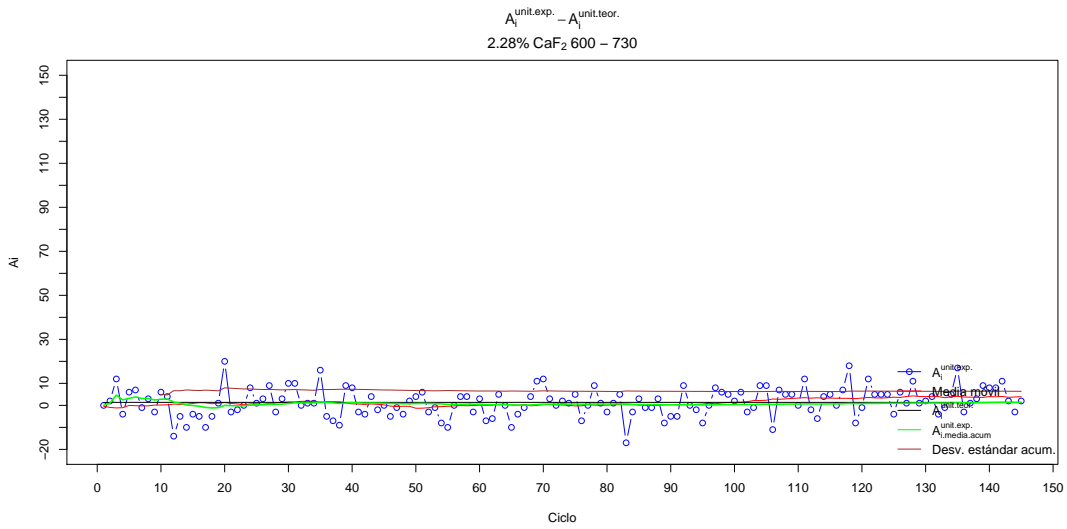


Figura 5.64: Comparación para el análisis del silicio entre áreas de decaimiento teóricas y experimentales por detector, réplica y muestra. BGO_A_02.AiCaF2.

Se puede comparar gráficamente la distribución de parámetros en un grupo de 145 ciclos con una distribución normal de manera gráfica con [Código 5.70](#). El resultado se ve en [Figura 5.65](#).

Código 5.70: Histograma A_{exp}^{unit} BGO_A_11.

```
# 38.23 % SiO2 - '11' BGO_A_11.SiO2

data <- Ai.SiO2.unit[Ai.SiO2.unit$detector=="BGO" &
  Ai.SiO2.unit$replica == "A" &
  Ai.SiO2.unit$leyes=="11", ]

# Histograma y curva de distribución normal:
hist(data$Pm.cf, breaks=30,
  main = "Distribución parámetros 75.42 % SiO2",
  sub = "BGO_A_02. Intervalo 210-235",
  xlab = bquote(A[i]^unit.exp.),
  freq = FALSE)
curve(dnorm(x, mean(data$Pm.cf), sd(data$Pm.cf)),
  add=TRUE)
```

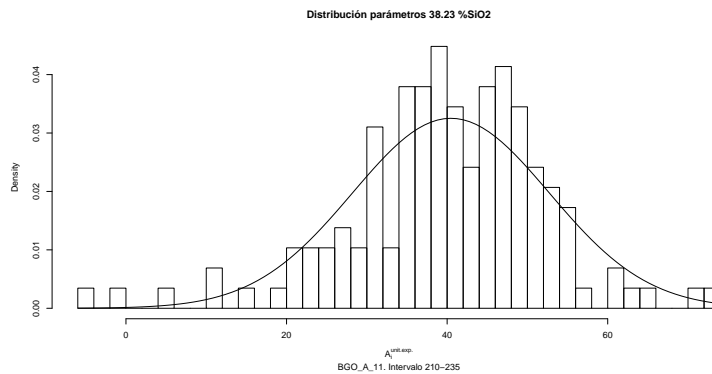


Figura 5.65: Histograma 38.23 % SiO2 - BGO_A_11.SiO2

5.7.6. Áreas unitarias de decaimiento. Promedios y desviaciones

Como se ve en las [Figura 5.49](#) a [Figura 5.49](#), la media móvil se aproxima a la curva teórica pero existe una gran dispersión de los datos obtenidos experimentalmente alrededor de ambas.

Se estudiará la desviación estándar de los datos experimentales con el fin de conocer la precisión que se puede alcanzar con el método de activación neutrónica en la determinación del SiO_2 y CaF_2 . No se consideran más que los casos de los detectores BGO y $NaI2x2$, pues los obtenidos con el detector $NaI3x3$ servían únicamente para ver que el método de determinación de la zona de interés del espectro no dependía de los canales en que se hiciese el registro así como para ver que no se engañaba con la desalineación de los espectros.

Las bases de datos con los parámetros obtenidas en [Subsección 5.7.4](#), ya utilizadas en [Sección 5.7.5](#), [Ai.SiO2.unit](#), [Código 5.64](#), y [Ai.CaF2.unit](#) [Código 5.65](#) serán las que utilizaremos para obtener las medias, desviaciones estándar y proporción entre desviación y media. Se calculará también la correlación, para cada grupo de leyes por detector y réplica, con los análisis químicos obtenidos. Finalmente, en [Sección 5.8](#) se calculará el número mínimo de ciclos necesarios para obtener la media con un error dado en el número de cuentas y un nivel de confianza determinado con las desviaciones estándar obtenidas.

Lo haremos con la librería `data.table` para R [\[37\]](#).

Promedios, desviaciones y correlaciones SiO_2

El [Código 5.71](#) permite calcular las medias, desviaciones estándar y proporción entre desviación y medias para los parámetros determinados en el intervalo 210 / 235 para el análisis de la sílice. El resultado lo vemos en [Cuadro 5.36](#).

Código 5.71: Medias y desviaciones estándar para SiO_2

```
dt <- data.table(Ai.SiO2.unit,
                 key = c("detector", "replica", "leyes"))

dt <- dt[leyes != '00' & detector != 'NaI3x3',
        list(Prm.medio = round(mean(Prm.sf), digits=0),
             Prm.sd = round(sd(Prm.sf), digits = 0)),
        by = key(dt)]

dt1 <- dt[, sd.mean := round(100*Prm.sd/Prm.medio,
                             digits = 0)]

dt1 <- merge(dt, muestras, by="leyes")

dt1 <- dt1[, cor.Ai := round(cor(Prm.medio, SiO2),
                              digits = 3),
           by="detector,replica"]
```

detector	replica	leyes	Prm.medio	Prm.sd	Prm.sd/Prm.medio	SiO ₂	cor.Ai
02	BGO	A	73	19	26	75.42	0.997
02	BGO	B	70	17	24	75.42	0.998
02	BGO	C	74	16	22	75.42	0.997
11	BGO	A	40	12	30	38.23	0.997
11	BGO	B	39	12	31	38.23	0.998
11	BGO	C	40	13	32	38.23	0.997
27	BGO	A	58	17	29	55.17	0.997
27	BGO	B	56	14	25	55.17	0.998
27	BGO	C	55	15	27	55.17	0.997
42	BGO	A	39	13	33	36.88	0.997
42	BGO	B	38	13	34	36.88	0.998
42	BGO	C	39	12	31	36.88	0.997
60	BGO	A	33	12	36	25.26	0.997
60	BGO	B	32	11	34	25.26	0.998
60	BGO	C	34	12	35	25.26	0.997
76	BGO	A	24	11	46	14.06	0.997
76	BGO	B	22	11	50	14.06	0.998
76	BGO	C	23	11	48	14.06	0.997
91	BGO	A	17	11	65	5.04	0.997
91	BGO	B	14	10	71	5.04	0.998
91	BGO	C	16	10	62	5.04	0.997
98	BGO	A	11	9	82	0.92	0.997
98	BGO	B	9	10	111	0.92	0.998
98	BGO	C	11	9	82	0.92	0.997

Cuadro 5.35: Medias, desviaciones estándar y correlaciones para SiO₂ con detector BGO.

Tras introducir los análisis químicos de la base de datos *muestras*, se calculan las correlaciones solamente para el detector *BGO* ya que, con el detector *NaI2x2*, las cuentas medias son tan reducidas que no tiene sentido calcularlas, [Código 5.7](#). El resultado se presenta en [Cuadro 5.35](#).

Las correlaciones de las medias con los análisis químicos de SiO₂ son muy altas al igual que ocurría cuando en [Sección 5.6](#) determinamos objetivamente la zona de interés. La explicación es que al tratar con parámetros de espectros acumulados en realidad se trabajaba con una media de todos los espectros (aunque fuese con fondo, que puede interpretarse como una constante y no afecta a una media) sin haber dividido por el número de componentes. Por ello se obtienen niveles de correlación similares.

detector	replica	leyes	Prm.medio	Prm.sd	Prm.sd/Prm.medio
BGO	A	02	73	19	26
BGO	A	11	40	12	30
BGO	A	27	58	17	29
BGO	A	42	39	13	33
BGO	A	60	33	12	36
BGO	A	76	24	11	46
BGO	A	91	17	11	65
BGO	A	98	11	9	82
BGO	B	02	70	17	24
BGO	B	11	39	12	31
BGO	B	27	56	14	25
BGO	B	42	38	13	34
BGO	B	60	32	11	34
BGO	B	76	22	11	50
BGO	B	91	14	10	71
BGO	B	98	9	10	111
BGO	C	02	74	16	22
BGO	C	11	40	13	32
BGO	C	27	55	15	27
BGO	C	42	39	12	31
BGO	C	60	34	12	35
BGO	C	76	23	11	48
BGO	C	91	16	10	62
BGO	C	98	11	9	82
NaI2x2	A	02	7	9	129
NaI2x2	A	11	5	9	180
NaI2x2	A	27	7	9	129
NaI2x2	A	42	6	8	133
NaI2x2	A	60	7	8	114
NaI2x2	A	76	8	9	112
NaI2x2	A	91	7	9	129
NaI2x2	A	98	9	8	89
NaI2x2	B	02	9	9	100
NaI2x2	B	11	6	10	167
NaI2x2	B	27	9	9	100
NaI2x2	B	42	8	9	112
NaI2x2	B	60	8	9	112
NaI2x2	B	76	8	8	100
NaI2x2	B	91	10	8	80
NaI2x2	B	98	9	9	100
NaI2x2	C	02	-13	24	-185
NaI2x2	C	11	4	9	225
NaI2x2	C	27	7	9	129
NaI2x2	C	42	8	10	125
NaI2x2	C	60	8	9	112
NaI2x2	C	76	9	10	111
NaI2x2	C	91	8	9	112
NaI2x2	C	98	8	9	112

Cuadro 5.36: Medias y desviaciones estándar para SiO_2 . Detectores BGO y NaI2x2.

Modelo de regresión lineal SiO_2

Se obtendrá la recta de regresión lineal que permitiría calcular la ley en $\%SiO_2$, [Código 5.72](#). Se utilizarán todos los parámetros unitarios sin fondo obtenidos en los experimentos y, en [Sección 5.7.6](#), se hará con parámetros medios para ciclos y réplicas con el fin de ver si hay diferencia.

Código 5.72: Regresión lineal SiO_2

```
# Regresión lineal BGO con todos los Ai unitarios sf

# SiO2

dt.SiO2 <- data.table(Ai.SiO2.unit[,c(1,2,3,4,7,8)],
  key = c("detector", "replica", "leyes"))

dt.SiO2 <- merge(dt.SiO2[leyes != '00' &
  detector != 'NaI2x2' &
  detector != 'NaI3x3', ],
  muestras, by="leyes")

lm.SiO2 <- dt.SiO2[,lm(Prm.sf ~ SiO2)]

summary(lm.SiO2)
# Ploteado lm()
par(mfrow=c(2,2),mar = c(2.5,2.5, 2.5, 2.5),bty = "n")
plot(lm.SiO2)

# Ploteado puntos y abline(lm())
# plot(dt.SiO2$SiO2, dt.SiO2$Prm.sf,
#   xlab = expression(paste("%", CaF[2], sep = "")),
#   ylab = "Prm",
#   pch = 20,
#   col="red")
# abline(lm.SiO2)

# Ploteado intervalos de confianza
#Intervalo de confianza 95 - "red"
predSiO2.95 <- predict(lm.SiO2,
  data.frame(dt.SiO2$SiO2),
  interval="confidence",
  level = 0.95)
matplot(dt.SiO2$SiO2, predSiO2.95[,1],
```



```

col = "red", type = "l",
xlab = expression(paste("%", CaF[2], sep = "")),
ylab = "Prm")
matplot(dt.SiO2$SiO2, predSiO2.95[,2],
col = "blue", type = "l", add=TRUE)
matplot(dt.SiO2$SiO2, predSiO2.95[,3],
col = "blue", type = "l", add=TRUE)

# Parámetros medidos:
matpoints(dt.SiO2$SiO2, dt.SiO2$Prm.sf,
type = "p", pch = 20, col="red")

#Intervalo de confianza 80 - "purple"
predSiO2.80 <- predict(lm.SiO2,
data.frame(dt.SiO2$SiO2),
interval="confidence",
level = 0.80)
matplot(dt.SiO2$SiO2, predSiO2.80[,2],
col = "purple", type = "l", add=TRUE)
matplot(dt.SiO2$SiO2, predSiO2.80[,3],
col = "purple", type = "l", add=TRUE)

```

El resultado se ve en [Figura 5.66](#) y las características del modelo de regresión lineal en [Código 5.73](#) y [Figura 5.67](#), con una gran dispersión de los valores unitarios alrededor de la recta de regresión.

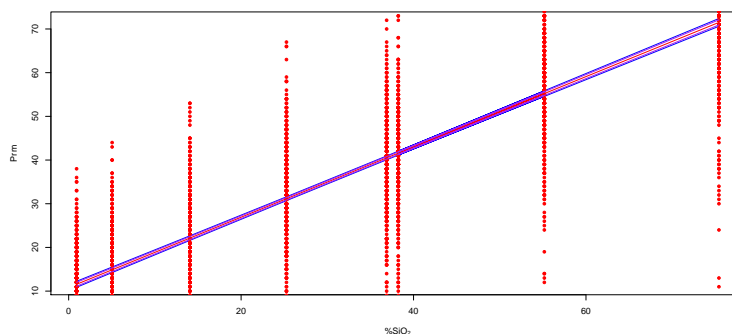


Figura 5.66: Línea de regresión SiO_2

Código 5.73: Resumen regresión lineal SiO_2

Call:

```
lm(formula = Prm.sf ~ SiO2)
```

Residuals:

	Min	1Q	Median	3Q	Max
	-94.213	-7.213	0.503	7.864	50.853

Coefficients:

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t)
(Intercept)	10.822808	0.358416	30.20	<2e-16
SiO2	0.804613	0.009098	88.44	<2e-16

(Intercept) ***

SiO2 ***

Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual stand. error: 12.79 on 3478 degrees of freedom

Multiple R-squared: 0.6922, Adjusted R-squared: 0.6921

F-statistic: 7821 on 1 and 3478 DF, p-value: < 2.2e-16

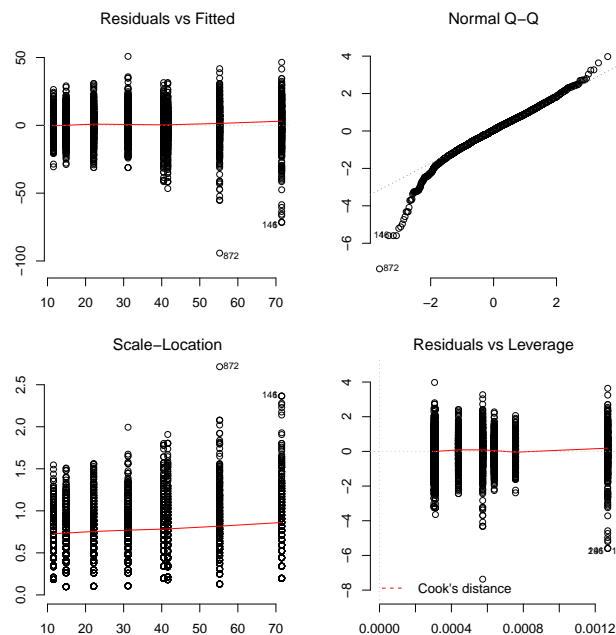


Figura 5.67: Modelo Lineal SiO_2

Modelo de regresión lineal SiO_2 medio

Se obtendrá la recta de regresión lineal que permitiría calcular la ley en $\%SiO_2$ para un parámetro medio de las mediciones de un determinado número de ciclos, [Código 5.74](#).

Código 5.74: Regresión lineal SiO_2 medio

```
dt <- data.table(Ai.SiO2.unit,
                 key = c("detector", "replica", "leyes"))

dt <- dt[leyes != '00' &
        detector != 'NaI2x2' &
        detector != 'NaI3x3',
        list(Prm.medio = round(mean(Prm.sf), digits=0),
             Prm.sd = round(sd(Prm.sf), digits = 0)),
        by = key(dt)]

dt1 <- merge(dt, muestras, by="leyes") #plyr

obj <- dt1[, lm(Prm.medio ~ SiO2)]
summary(obj)
par(mfrow=c(2,2), mar = c(2.5, 2.5, 2.5, 2.5), bty = "n")
plot(obj)

# library(plotrix)
# sizeplot(dt1$SiO2, dt1$Prm.medio,
#          xlab = expression(paste("%", SiO[2], sep = "")),
#          ylab = "Prm",
#          pch = 20,
#          col="red")

abline(obj)

# Ploteado intervalos de confianza
#Intervalo de confianza 95 - "red"
predSiO2.95 <- predict(lm.SiO2,
                      data.frame(dt.SiO2$SiO2),
                      interval="confidence",
                      level = 0.95)

matplot(dt.SiO2$SiO2, predSiO2.95[,1],
        col = "red", type = "l",
        xlab = expression(paste("%", CaF[2], sep = "")),
```

```

      ylab = "Prm")
matplot(dt.SiO2$SiO2, predSiO2.95[,2],
        col = "blue", type = "l", add=TRUE)
matplot(dt.SiO2$SiO2, predSiO2.95[,3],
        col = "blue", type = "l", add=TRUE)

# Parámetros medidos:
matpoints(dt.SiO2$SiO2, dt.SiO2$Prm.sf,
          type = "p", pch = 20, col="red")

#Intervalo de confianza 80 - "purple"
predSiO2.80 <- predict(lm.SiO2,
                      data.frame(dt.SiO2$SiO2),
                      interval="confidence",
                      level = 0.80)

matplot(dt.SiO2$SiO2, predSiO2.80[,2],
        col = "purple", type = "l", add=TRUE)
matplot(dt.SiO2$SiO2, predSiO2.80[,3],
        col = "purple", type = "l", add=TRUE)

```

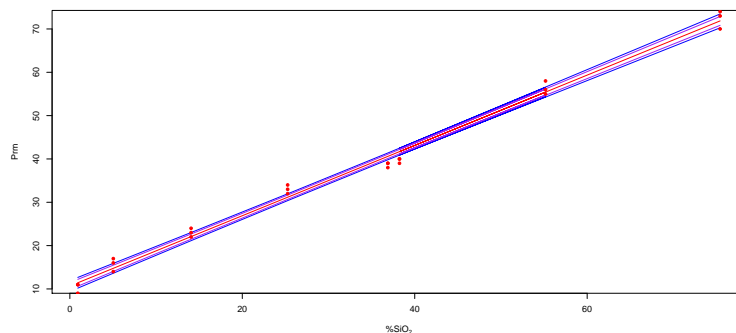


Figura 5.68: Línea de regresión SiO_2 medio

El resultado se ve en [Figura 5.68](#) y las características del modelo de regresión lineal en [Código 5.75](#) y [Figura 5.69](#). Comparando los valores que definen la recta de regresión lineal con los parámetros unitarios, [Código 5.73](#) y los unitarios medios, [Código 5.75](#), se ve que son prácticamente iguales; la recta de regresión obtenida es la misma prácticamente. La diferencia se observa comparando las figuras de las rectas de regresión, [Figura 5.66](#) y [Figura 5.68](#), donde se puede ver cómo obtener parámetros unitarios medios acerca éstos a la recta de regresión evitando la dispersión. Estos parámetros medios corresponden a la media de 435 unitarios (réplicas de 145 ciclos), por lo que para obtenerlos aún más próximos y dentro de las zonas de confianza de 0.80 o, más aún de 0.95, sería necesario utilizar parámetros medios correspondientes a un número mucho mayor de ciclos con los tiempos de proceso utilizados. En [Sección 5.8](#) calcularemos cuántos ciclos es necesario en función de la confianza que se quiera tener.

Código 5.75: Resumen regresión lineal SiO_2 medio

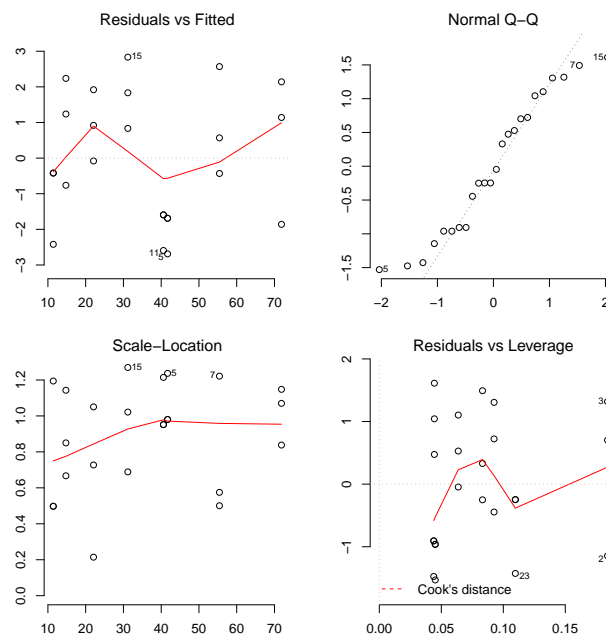
```

Call: lm(formula = Prm.medio ~ SiO2)
Residuals:
    Min       1Q   Median       3Q      Max
-2.6883 -1.6169 -0.2498  1.3868  2.8339

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  10.6734     0.6069   17.59 1.92e-14 ***
SiO2          0.8113     0.0154   52.66 < 2e-16 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*'
                 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual stand. error: 1.798 on 22 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.9921,    Adjusted R-squared: 0.9918
F-statistic: 2773 on 1 and 22 DF, p-value: < 2.2e-16

```

Figura 5.69: Modelo Lineal SiO_2 medio

Promedios, desviaciones y correlaciones CaF_2

En la sección anterior hemos visto para el caso de SiO_2 que los resultados del modelo de regresión llevan a la necesidad de utilizar parámetros medios. Por este motivo en el caso del CaF_2 solamente se calculará el modelo lineal con parámetros medios, [Sección 5.7.6](#).

El [Código 5.76](#) permite calcular las medias, desviaciones estándar y proporción entre desviación y medias para los parámetros determinados en el intervalo 600/730 para el análisis de CaF_2 . El resultado se ve en [Cuadro 5.37](#).

Código 5.76: Medias y desviaciones estándar para CaF_2

```
dt <- data.table(Ai.CaF2.unit,
                 key = c("detector", "replica", "leyes"))

dt <- dt[leyes != '00' & detector != 'NaI3x3',
        list(Prm.medio = round(mean(Prm.sf), digits=0),
             Prm.sd = round(sd(Prm.sf), digits = 0)),
        by = key(dt)]

dt1 <- dt[, sd.mean := round(100*Prm.sd/Prm.medio,
                             digits = 0)]

dt1 <- merge(dt, muestras, by="leyes")

dt1 <- dt1[, cor.Ai := round(cor(Prm.medio, CaF2),
                              digits = 3),
           by="detector,replica"]
```

Se calculan las correlaciones, tras introducir los análisis químicos de la base de datos *muestras*, [Código 5.7](#) y tal como ocurrió para la SIO_2 , [Sección 5.7.6](#), solamente para el detector *BGO* ya que con el detector *NaI2x2* las cuentas medias son tan reducidas que no tiene sentido calcularlas. El resultado se presenta en [Cuadro 5.38](#).

Las correlaciones de las medias con los análisis químicos de CaF_2 son muy altas al igual que ocurría cuando en [Sección 5.6](#) determinamos objetivamente la zona de interés. La explicación es que al tratar con parámetros de espectros acumulados en realidad se utilizaba una media de todos los espectros (aunque fuese con fondo, que puede interpretarse como una constante y no afecta a una media) sin haber dividido por el número de componentes. Por ello, se obtienen niveles de correlación similares.

detector	replica	leyes	Prm.medio	Prm.sd	Prm.sd/Prm.medio
BGO	A	02	1	6	600
BGO	A	11	11	7	64
BGO	A	27	27	9	33
BGO	A	42	41	9	22
BGO	A	60	67	12	18
BGO	A	76	88	14	16
BGO	A	91	111	15	14
BGO	A	98	114	16	14
BGO	B	02	2	7	350
BGO	B	11	13	7	54
BGO	B	27	29	9	31
BGO	B	42	43	9	21
BGO	B	60	72	12	17
BGO	B	76	93	14	15
BGO	B	91	109	15	14
BGO	B	98	117	17	15
BGO	C	02	2	6	300
BGO	C	11	13	7	54
BGO	C	27	29	9	31
BGO	C	42	43	10	23
BGO	C	60	70	11	16
BGO	C	76	90	13	14
BGO	C	91	113	16	14
BGO	C	98	115	15	13
NaI2x2	A	02	2	6	300
NaI2x2	A	11	7	6	86
NaI2x2	A	27	17	7	41
NaI2x2	A	42	24	7	29
NaI2x2	A	60	41	10	24
NaI2x2	A	76	53	10	19
NaI2x2	A	91	67	11	16
NaI2x2	A	98	69	12	17
NaI2x2	B	02	1	6	600
NaI2x2	B	11	8	6	75
NaI2x2	B	27	17	7	41
NaI2x2	B	42	25	8	32
NaI2x2	B	60	43	9	21
NaI2x2	B	76	52	10	19
NaI2x2	B	91	66	14	21
NaI2x2	B	98	68	12	18
NaI2x2	C	02	-7	10	-143
NaI2x2	C	11	7	6	86
NaI2x2	C	27	16	8	50
NaI2x2	C	42	24	8	33
NaI2x2	C	60	39	9	23
NaI2x2	C	76	52	11	21
NaI2x2	C	91	65	12	18
NaI2x2	C	98	69	12	17

Cuadro 5.37: Medias y desviaciones estándar para CaF_2 . Detectores BGO y NaI2x2.

detector	replica	leyes	Prm.medio	Prm.sd	Prm.sd/Prm.medio	CaF ₂	cor.Ai
02	BGO	A	1	6	600	2.28	0.997
02	BGO	B	2	7	350	2.28	0.998
02	BGO	C	2	6	300	2.28	0.998
11	BGO	A	11	7	64	11.39	0.997
11	BGO	B	13	7	54	11.39	0.998
11	BGO	C	13	7	54	11.39	0.998
27	BGO	A	27	9	33	27.05	0.997
27	BGO	B	29	9	31	27.05	0.998
27	BGO	C	29	9	31	27.05	0.998
42	BGO	A	41	9	22	42.05	0.997
42	BGO	B	43	9	21	42.05	0.998
42	BGO	C	43	10	23	42.05	0.998
60	BGO	A	67	12	18	59.92	0.997
60	BGO	B	72	12	17	59.92	0.998
60	BGO	C	70	11	16	59.92	0.998
76	BGO	A	88	14	16	76.50	0.997
76	BGO	B	93	14	15	76.50	0.998
76	BGO	C	90	13	14	76.50	0.998
91	BGO	A	111	15	14	90.98	0.997
91	BGO	B	109	15	14	90.98	0.998
91	BGO	C	113	16	14	90.98	0.998
98	BGO	A	114	16	14	97.60	0.997
98	BGO	B	117	17	15	97.60	0.998
98	BGO	C	115	15	13	97.60	0.998

Cuadro 5.38: Medias, desviaciones estándar y correlaciones para CaF₂ con detector BGO.

Modelo de regresión lineal CaF₂ medio

Se obtendrá la recta de regresión lineal que permitiría calcular la ley en %CaF₂ para un parámetro medio de las mediciones de un determinado número de ciclos, [Código 5.77](#).

Código 5.77: Regresión lineal CaF₂ medio

```
dt <- data.table(Ai.CaF2.unit,
                 key = c("detector", "replica", "leyes"))

dt <- dt[leyes != '00' &
         detector != 'NaI2x2' &
         detector != 'NaI3x3',
```



```

    list(Prm.medio = round(mean(Prm.sf), digits=0),
         Prm.sd = round(sd(Prm.sf), digits = 0)),
        by = key(dt) ]

dt1 <- merge(dt, muestras, by="leyes") #plyr

obj <- dt1[, lm(Prm.medio ~ CaF2) ]
summary(obj)
par(mfrow=c(2,2), mar = c(2.5, 2.5, 2.5, 2.5), bty = "n")
plot(obj)

# Ploteado intervalos de confianza

#Intervalo de confianza 95 - "red"
predCaF2.95 <- predict(lm.CaF2,
                      data.frame(dt.CaF2$CaF2),
                      interval="confidence",
                      level = 0.95)
matplot(dt.CaF2$CaF2, predCaF2.95[,1],
        col = "red", type = "l",
        xlab = expression(paste("%", CaF[2], sep = "")),
        ylab = "Prm")
matplot(dt.CaF2$CaF2, predCaF2.95[,2],
        col = "blue", type = "l", add=TRUE)
matplot(dt.CaF2$CaF2, predCaF2.95[,3],
        col = "blue", type = "l", add=TRUE)

# Parámetros medios:
matpoints(dt.CaF2$CaF2, dt.CaF2$Prm.medio,
          type = "p", pch = 20, col="red")

#Intervalo de confianza 80 - "purple"
predCaF2.80 <- predict(lm.CaF2,
                      data.frame(dt.CaF2$CaF2),
                      interval="confidence",
                      level = 0.80)
matplot(dt.CaF2$CaF2, predCaF2.80[,2],
        col = "purple", type = "l", add=TRUE)
matplot(dt.CaF2$CaF2, predCaF2.80[,3],
        col = "purple", type = "l", add=TRUE)

```

El resultado se ve en [Figura 5.70](#) y las características del modelo de regresión lineal en [Código 5.78](#) y [Figura 5.71](#).

Código 5.78: Resumen regresión lineal CaF_2 medio**Call:**

```
lm(formula = Prm.medio ~ CaF2)
```

Residuals:

Min	1Q	Median	3Q	Max
-6.9652	-1.9466	0.3553	2.5290	5.1982

Coefficients:

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t)
(Intercept)	-3.4578	1.1306	-3.058	0.00576 **
CaF2	1.2229	0.0185	66.104	< 2e-16 ***

```
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*'
                 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

Residual standard error: 3.056 on 22 degrees of freedom

Multiple **R**-squared: 0.995, Adjusted **R**-squared: 0.9948

F-statistic: 4370 on 1 and 22 DF, p-value: < 2.2e-16

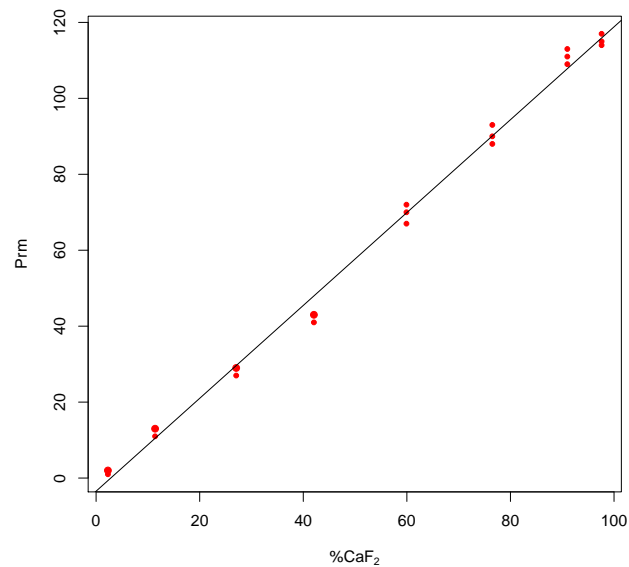
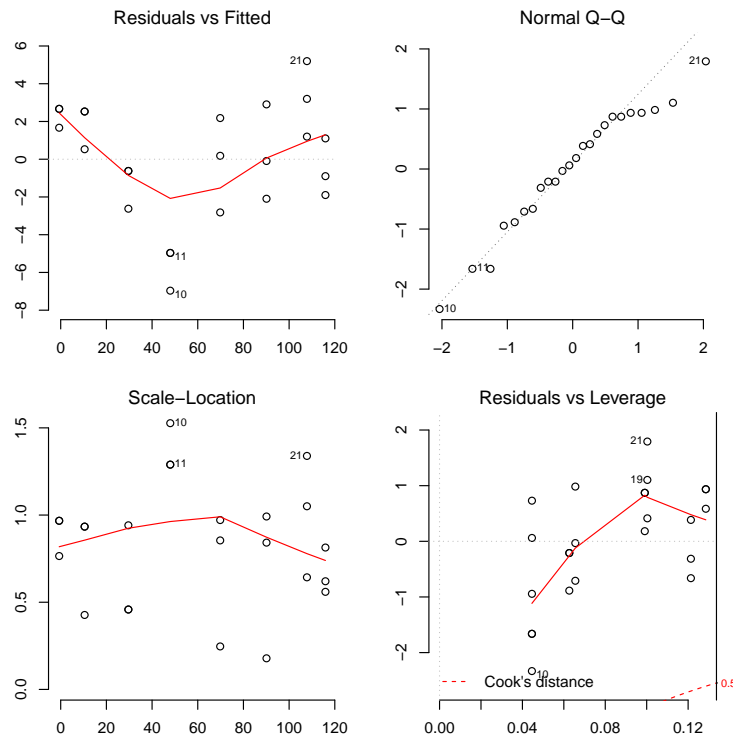


Figura 5.70: Línea de regresión CaF_2 medio

Figura 5.71: Modelo Lineal CaF_2 medio

5.8. Determinación del número de ciclos

En Sección 5.7.6 y Sección 5.7.6 se ha comprobado que correlaciones de las medias con los análisis químicos de SiO_2 y CaF_2 son muy altas pero con unas desviaciones estándar también muy altas.

Se va a determinar cuál es el número mínimo de ciclos a realizar con el fin de obtener un error absoluto en número de cuentas y nivel de confianza prefijados para las desviaciones estándar obtenidas, Cuadro 5.36 y Cuadro 5.37, en los ensayos con el detector *BGO*.

Ecuación 5.6 permite determinar el tamaño de la muestra para medias dado un determinado margen de error. El resultado de la fórmula se redondea siempre hacia el entero superior para asegurar que se logra el margen de error especificado.

$$n = \left(\frac{z_{\alpha/2} \sigma}{E} \right)^2 \quad (5.6)$$

n Tamaño de la muestra.

$z_{\alpha/2}$ Multiplicador.

σ Desviación estándar.

E Error absoluto.

Cuadro 5.39 muestra los niveles de confianza y sus multiplicadores $z_{\alpha/2}$ correspondientes.

Nivel de confianza	$z_{\alpha/2}$
80	1.28
90	1.645
95	1.96
98	2.326
99	2.576

Cuadro 5.39: Multiplicadores Z y niveles de confianza.

5.8.1. Numero de ciclos por réplicas

Código 5.79 permite obtener el valor mínimo del tamaño de muestra para cada ley. Se hace para los 5 intervalos de confianza de **Cuadro 5.39** con los errores absolutos de 2 y 5 cuentas, tanto para SiO_2 como para CaF_2 .

Como valor se toma el máximo de los valores determinados con cada réplica para cada ley, que sería el mínimo a efectuar para buscar una media con los márgenes prefijados. Los valores obtenidos figuran en **Cuadro 5.40**. El número de ciclos a realizar sería el máximo de las tres réplicas de manera similar a **Cuadro 5.41** y **Cuadro 5.42** en que sólo aparece el máximo de las 3 réplicas para cada una de las muestras.

En **Subsección 5.8.2**, se calculará el número de ciclos para obtener con confianza .95 un error relativo al parámetro medio. Al introducir en **Ecuación 5.7** el valor del parámetro medio, descontando entonces los 40 primeros ciclos en que no se estabilizó todavía. Ahora no era necesario pues la variación de la desviación estándar, como se ve en la figuras de **Subsección 5.7.5**, no tiene ese problema ya que su variación simplemente depende del tamaño de la muestra y, por tanto, va decreciendo según aumenta el número de ciclos.

Código 5.79: Estimación del tamaño de muestra para medias, dado un predeterminado margen de error.

```
# Error absoluto 2 cuentas
dt[ ,
  `:=`(n.99.2 = ceiling((2.576 * Prm.sd / 2)^2),
        n.98.2 = ceiling((2.326 * Prm.sd / 2)^2),
        n.95.2 = ceiling((1.96 * Prm.sd / 2)^2),
        n.90.2 = ceiling((1.645 * Prm.sd / 2)^2),
        n.80.2 = ceiling((1.28 * Prm.sd / 2)^2))]
# El número de muestras mínimo para cada detector y ley
# vendrá dado por el máximo de las 3 réplicas:
dt[, list(n.99.2 = max(n.99.2),
          n.98.2 = max(n.98.2),
          n.95.2 = max(n.95.2),
          n.90.2 = max(n.90.2),
          n.80.2 = max(n.80.2)),
  by="detector,leyes"]

# Error absoluto 5 cuentas
dt[ ,
  `:=`(n.99.5 = ceiling((2.576 * Prm.sd / 5)^2),
        n.98.5 = ceiling((2.326 * Prm.sd / 5)^2),
        n.95.5 = ceiling((1.96 * Prm.sd / 5)^2),
        n.90.5 = ceiling((1.645 * Prm.sd / 5)^2),
        n.80.5 = ceiling((1.28 * Prm.sd / 5)^2))]
# El número de muestras mínimo para cada detector y ley
# vendrá dado por el máximo de las 3 réplicas:
dt[, list(n.99.5 = max(n.99.5),
          n.98.5 = max(n.98.5),
          n.95.5 = max(n.95.5),
          n.90.5 = max(n.90.5),
          n.80.5 = max(n.80.5)),
  by="detector,leyes"]
```

detector	replica	leyes	Prm		Error abs. 2 cuentas					Error abs. 5 cuentas				
			medio	sd	99	98	95	90	80	99	98	95	90	80
BGO	A	02	77	14	326	266	189	133	81	53	43	31	22	13
BGO	B	02	74	12	239	195	139	98	59	39	32	23	16	10
BGO	C	02	77	12	239	195	139	98	59	39	32	23	16	10
BGO	A	11	43	10	166	136	97	68	41	27	22	16	11	7
BGO	B	11	42	10	166	136	97	68	41	27	22	16	11	7
BGO	C	11	43	11	201	164	117	82	50	33	27	19	14	8
BGO	A	27	61	12	239	195	139	98	59	39	32	23	16	10
BGO	B	27	59	11	201	164	117	82	50	33	27	19	14	8
BGO	C	27	58	13	281	229	163	115	70	45	37	26	19	12
BGO	A	42	40	11	201	164	117	82	50	33	27	19	14	8
BGO	B	42	39	12	239	195	139	98	59	39	32	23	16	10
BGO	C	42	41	10	166	136	97	68	41	27	22	16	11	7
BGO	A	60	34	11	201	164	117	82	50	33	27	19	14	8
BGO	B	60	33	10	166	136	97	68	41	27	22	16	11	7
BGO	C	60	36	12	239	195	139	98	59	39	32	23	16	10
BGO	A	76	25	12	239	195	139	98	59	39	32	23	16	10
BGO	B	76	23	11	201	164	117	82	50	33	27	19	14	8
BGO	C	76	24	12	239	195	139	98	59	39	32	23	16	10
BGO	A	91	17	10	166	136	97	68	41	27	22	16	11	7
BGO	B	91	14	10	166	136	97	68	41	27	22	16	11	7
BGO	C	91	16	10	166	136	97	68	41	27	22	16	11	7
BGO	A	98	11	10	166	136	97	68	41	27	22	16	11	7
BGO	B	98	10	10	166	136	97	68	41	27	22	16	11	7
BGO	C	98	11	9	135	110	78	55	34	22	18	13	9	6

Cuadro 5.40: Número de ciclos a ensayar con detector BGO para el análisis de SiO_2 con errores absolutos 2 y 5 cuentas

detector	leyes	n.99.2	n.98.2	n.95.2	n.90.2	n.80.2
BGO	02	82	67	48	34	21
BGO	11	82	67	48	34	21
BGO	27	135	110	78	55	34
BGO	42	166	136	97	68	41
BGO	60	239	195	139	98	59
BGO	76	326	266	189	133	81
BGO	91	425	347	246	174	105
BGO	98	480	391	278	196	119

Cuadro 5.41: Número de ciclos a ensayar con detector BGO para el análisis de CaF_2 y Error = 2.

detector	leyes	n.99.5	n.98.5	n.95.5	n.90.5	n.80.5
BGO	02	14	11	8	6	4
BGO	11	14	11	8	6	4
BGO	27	22	18	13	9	6
BGO	42	27	22	16	11	7
BGO	60	39	32	23	16	10
BGO	76	53	43	31	22	13
BGO	91	68	56	40	28	17
BGO	98	77	63	45	32	19

Cuadro 5.42: Número de ciclos a ensayar con detector BGO para el análisis de CaF_2 y Error = 5.

5.8.2. Numero de ciclos por leyes

Ahora, en vez de obtener el número mínimo de ciclos unitarios a realizar como el máximo obtenido de las 3 réplicas correspondientes, se va a obtener directamente considerando las 3 réplicas de 145 ciclos como 435 ensayos para cada ley, agrupando por leyes.

Código 5.80, para SiO_2 y CaF_2 es común salvo que, para la sílice, vamos a calcular la media sólo con los ciclos 41 a 145, pues en los primeros 40 ciclos todavía no se estabilizó la medida. Por tanto, al número de ciclos del cuadro hay que sumar 40 ciclos en el caso de la sílice. Otra diferencia es el código de errores relativos ya que éstos son diferentes debido a la diferencia de parámetros obtenidos con sílice y flúor.

[Ecuación 5.6](#) debe ser modificada para introducir el error relativo, que se obtendrá dividiendo el absoluto por el parámetro medio, resultando la [Ecuación 5.7](#).

$$n = \left(\frac{z_{\alpha/2} \sigma}{\bar{x} \varepsilon} \right)^2 \quad (5.7)$$

\bar{x} Media.

ε Error relativo.

En [Cuadro 5.40](#) a [Cuadro 5.42](#) da la impresión errónea de que es necesario realizar más ensayos cuanto mayor es la riqueza. Esto es así porque un error absoluto en cuentas pequeño como son 2 ó 5 cuentas es difícil de obtener con desviaciones grandes y no cuando éstas y el parámetro medio son menores, pero entonces el error relativo se dispara. Para demostrarlo, esta vez se calcularán, tanto para sílice como para flúor, el número mínimo de ensayos con errores absoluto de 5 cuentas y los respectivos errores relativos respecto al parámetro medio y una confianza de 0.95. Se ve así que se necesitan, para un mismo error relativo, mayor número de ciclos cuanto menor es la ley, [Cuadro 5.43](#) [Cuadro 5.44](#).

Código 5.80: Estimación del tamaño de muestra para medias, dado un predeterminado margen de error.

```
# SiO2
# Para SiO2 consideramos sólo los ciclos 41:145 y no
# en los que todavía cre4ce el parámetro
num_ciclos <- 145
ciclo <- c()
# Padding
for (i in 41: num_ciclos) {
  ciclo <- cbind(ciclo, ifelse(nchar(i) < 3,
    ifelse(nchar(i) == 1, sprintf("00 %d", i),
    sprintf("0 %d", i)), i))
}

dt <-
data.table(Ai.SiO2.unit[Ai.SiO2.unit$ciclo %in% ciclo, ],
  key = c("detector", "replica", "leyes"))

# CaF2
```



```

# número mínimo de ciclos considerando la media por ley
dt <- data.table(Ai.CaF2.unit,
                 key = c("detector", "replica", "leyes"))

# Común
dt <- dt[leyes != '00' & detector != 'NaI2x2' &
        detector != 'NaI3x3',
        list(Prm.medio = round(mean(Prm.sf), digits=0),
             Prm.sd = round(sd(Prm.sf), digits = 0)),
        by = leyes]

dt

# Error relativo con 5 cuentas:
round(500/dt$Prm.medio, digits = 2)

# Errores absolutos y relativos confianza 95 %

#SiO2 41-145
dt[ ,
  `:=`(n.95.2 = ceiling((1.96 * Prm.sd / 2)^2),

       n.99.5 = ceiling((1.96 * Prm.sd / 5)^2),

       n.95.7r =
       ceiling((1.96 * Prm.sd/ (Prm.medio * 0.0658))^2),

       n.95.12r =
       ceiling((1.96 * Prm.sd/ (Prm.medio * 0.119))^2),

       n.95.8r =
       ceiling((1.96 * Prm.sd/ (Prm.medio * 0.0847))^2),

       n.95.13r =
       ceiling((1.96 * Prm.sd/ (Prm.medio * 0.125))^2),

       n.95.15r =
       ceiling((1.96 * Prm.sd/ (Prm.medio * 0.1471))^2),

       n.95.21r =
       ceiling((1.96 * Prm.sd/ (Prm.medio * 0.2083))^2),

       n.95.32r =
       ceiling((1.96 * Prm.sd/ (Prm.medio * 0.3125))^2),

```

```
n.95.45r =  
ceiling((1.96 * Prm.sd / (Prm.medio * 0.4545))^2)  
)]  
  
# CaF2  
dt[ ,  
  `:=` (n.95.2 = ceiling((1.96 * Prm.sd / 2)^2),  
  
  n.99.5 = ceiling((1.96 * Prm.sd / 5)^2),  
  
  n.95.250r =  
  ceiling((1.96 * Prm.sd / (Prm.medio * 2.5))^2),  
  
  n.95.42r =  
  ceiling((1.96 * Prm.sd / (Prm.medio * 0.4167))^2),  
  
  n.95.17r =  
  ceiling((1.96 * Prm.sd / (Prm.medio * 0.1724))^2),  
  
  n.95.12r =  
  ceiling((1.96 * Prm.sd / (Prm.medio * 0.119))^2),  
  
  n.95.17r =  
  ceiling((1.96 * Prm.sd / (Prm.medio * 0.0714))^2),  
  
  n.95.6r =  
  ceiling((1.96 * Prm.sd / (Prm.medio * 0.0556))^2),  
  
  n.95.5r =  
  ceiling((1.96 * Prm.sd / (Prm.medio * 0.045))^2),  
  
  n.95.4r =  
  ceiling((1.96 * Prm.sd / (Prm.medio * 0.0435))^2)  
)]
```

leyes	SiO_2	Prm		Cuentas error abs.			Error relativo 5 cuentas (%)						
		medio	sd	2	5	6.58	11.9	8.47	12.5	14.71	20.83	31.25	45.45
02	75.42	76	13	163	26	26	8	16	8	6	3	2	1
11	38.23	42	10	97	16	51	16	31	14	11	6	3	2
27	55.17	59	12	139	23	37	12	23	11	8	4	2	1
42	36.88	40	11	117	19	68	21	41	19	14	7	3	2
60	25.26	34	11	117	19	93	29	57	26	19	10	5	2
76	14.06	24	11	117	19	187	57	113	52	38	19	9	4
91	5.04	16	10	97	16	347	106	210	97	70	35	16	8
98	0.92	11	9	78	13	594	182	359	165	119	60	27	13

Cuadro 5.43: Número de ciclos a ensayar con detector BGO para el análisis de SiO_2 y Confianza .95

leyes	CaF_2	Prm		Cuentas error abs.			Error relativo 5 cuentas (%)						
		medio	sd	2	5	250	41.67	17.24	11.9	7.14	5.56	4.5	4.35
02	2.28	2	6	35	6	6	200	1164	2442	6783	11185	17074	18272
11	11.39	12	7	48	8	1	8	44	93	257	423	646	691
27	27.05	29	9	78	13	1	3	13	27	73	120	183	196
42	42.05	42	9	78	13	1	2	6	13	35	58	88	94
60	59.92	70	12	139	23	1	1	4	8	23	37	56	60
76	76.50	90	14	189	31	1	1	4	7	19	31	46	50
91	90.98	111	16	246	40	1	1	3	6	16	26	40	43
98	97.60	115	16	246	40	1	1	3	6	15	25	37	40

Cuadro 5.44: Número de ciclos a ensayar con detector BGO para el análisis de CaF_2 y Confianza .95

Capítulo 6

Conclusiones

En esta tesis se han hecho ensayos de activación neutrónica de 9 muestras de fluorita con contenidos en CaF_2 de cero (fondo) a prácticamente 100% con 3 detectores: BGO, NaI_{2x2} y NaI_{3x3}. El número de ensayos con cada detector y muestra ha sido el mismo: 3 réplicas de 145 ciclos, lo que ha llevado a un total de 11745 registros, 3915 por cada detector. Se han utilizado los mismos ensayos para determinar simultáneamente los contenidos en flúor y sílice, cuyos productos de decaimiento tienen vidas medias que hacen que para el primero se puedan considerar como ensayos independientes y para la sílice como activación cíclica hasta lograr una estabilización de las medidas.

Se ha sistematizado la catalogación de los ficheros con el fin de gestionarlos mediante el software libre de tratamiento estadístico *R* y se desarrollaron una serie de algoritmos para su estudio y análisis. Estos algoritmos son susceptibles de ser agrupados en un *paquete* de software que permita el tratamiento de espectros digitales multicanales.

El análisis de los registros espectrales multicanales se ha hecho independientemente de su correspondencia con un canal de energía tras una calibración. De hecho esta asociación se ha utilizado solamente para demostrar que los intervalos de canales detectados algorítmicamente como adecuados para la determinación del contenido en sílice y flúor de muestras de fluorita se corresponde con las energías de los picos de decaimiento γ teóricos. Estos intervalos han sido *detectados* mediante los algoritmos desarrollados en esta Tesis y, la aplicación iterativa de los mismos sobre intervalos cada vez más cerrados permitiría afinar el intervalo óptimo con mejor correlación para el cálculo de las leyes de las muestras. El algoritmo funcionó incluso en condiciones de cambio de escala, como fue el caso de los ensayos de una de las réplicas con el detector NaI_{3x3} y, la desalineación de los espectros de las distintas leyes, debida a fallo por descalibración en su adquisición, impidió la detección del intervalo de detección de la sílice.

Se demostró que, por las especiales características de los espectros de las muestras

de fluorita y de las áreas de detección de sílice y flúor, la precisión del intervalo tiene especial importancia en el caso del primero pero en el segundo no es necesaria esa precisión, si no que se podría utilizar como intervalo para el cálculo del flúor la mitad superior del espectro, no influyendo una ligera desalineación.

Las correlaciones obtenidas fueron del mismo orden utilizando espectros con fondo o sin fondo aunque, para el estudio de áreas de decaimiento y número de ciclos, se utilizaron espectros sin fondo en los que el fondo se corrigió individualmente en función del ciclo correspondiente, por consistencia y equiparación con el desarrollo teórico. Se podría haber hecho con los espectros con fondo pues éste se puede considerar como una constante que no hace variar las correlaciones.

Se comparó la evolución de las áreas de decaimiento teóricas con las experimentales para los casos de la sílice y flúor y se demostró que los valores experimentales medidos coinciden con los esperados teóricamente, estabilizándose la medida para la sílice a partir de unos 40 ciclos y siendo prácticamente constante en todos ellos en el caso del flúor.

El algoritmo desarrollado para el cálculo de la evolución de áreas de decaimiento puede emplearse para el diseño de tiempos óptimos experimentales de activación neutrónica de cualquier elemento.

El número de ciclos que hace que el promedio se estabilice hacia su valor asintótico, para un nivel de confianza y un error relativo determinados, disminuye con el aumento de la ley. Sin embargo, la utilización de un error absoluto en número de cuentas resulta engañoso y parece indicar lo contrario debido a que, con la desviación estándar obtenida, es preciso un gran número de ensayos para que, con leyes altas, se logre un error pequeño.

Los intervalos óptimos para la determinación de SiO_2 y CaF_2 tienen elevadas R^2 con respecto a los análisis químicos. En el caso de la SiO_2 es inferior debido a que los tiempos de ciclo utilizados estaban adaptados a la determinación de CaF_2 .

Se calculó la desviación estándar de las medidas obtenidas de modo que la determinación de leyes de flúor y sílice, mediante activaciones neutrónica con una fuente de 1 Ci de Am-Be y tiempos de activación cortos, aunque repetidos cíclicamente, con el fin de ser utilizados industrialmente de una manera rápida, parece adecuado para leyes no muy bajas. Con este tipo de fuentes las cuentas obtenidas son del orden de una por cada punto en ley, tanto para la sílice como para el flúor, por lo que el método puede ser adecuado cuando la variación en la medida no es superior al valor a determinar.

Apéndice A

Programa de captación del espectro y manipulación del motor lineal: Compax 3

```
1 // Compax3.cpp: define el punto de entrada de la aplicación.
2 //
3
4 #include "stdafx.h"
5 #include "Compax3.h"
6 #include <stdio.h>
7 #include <string.h>
8 #include <stdlib.h>
9 #include <math.h>
10 #include <Windowsx.h>
11 #include <commctrl.h> //Para la barra de progreso
12
13 #define MAX_LOADSTRING 100
14 #define MAX_SIZE_STRING 20//Máximo tamaño de los datos a enviar
15 #define ACCELERATION_MAX 488
16 #define VELOCITY_MAX 4.7
17 //#define ACCELERATION_MAX 250
18 //#define VELOCITY_MAX 2.3
19
20 // Variables globales:
21 HINSTANCE hInst;
22 // Instancia actual
23 TCHAR szTitle[MAX_LOADSTRING];
24 // Texto de la barra de título
```

```
25 TCHAR szWindowClass[MAX_LOADSTRING];
26 // nombre de clase de la ventana principal
27 BOOL gsCritica;
28 // Seccion critica del puerto COM1
29 BOOL symmetrical;
30 // Seleccion de comunicacion Simétrica/Antisimétrica
31 INT caseError;
32 HANDLE hHilo;
33 //Hilo encargado de ejecutar la conexion RS232
34 HANDLE hHilo2;
35 HWND hwndPB; // Handle of progress bar
36 int tipoMCA;
37 HWND hwndGamma; //Handle del programa Gamma
38 HWND hwndSaveAs;
39 int ciclo;
40
41 //Estructura donde se van a guardar los datos del motor
42 struct _Bloque
43 {
44     int position, positionSecond, positionEnd, aceleration,
45         deceleration, velocity,
46         jerk, delayTime0, delayTime1, delayTime2, nCicles,
47         motionTime, startTime, endTime;
48     //HWND hDialog;
49 };
50 typedef struct _Bloque Bloque;
51 typedef Bloque* PBloque;
52
53 Bloque Info;
54 PBloque PInfo;
55
56 int ciclos=0;
57
58
59 // Declaraciones de funciones adelantadas incluidas en este módulo de
60 código:
61 ATOM MyRegisterClass(HINSTANCE hInstance);
62 BOOL InitInstance(HINSTANCE, int);
63 LRESULT CALLBACK WndProc(HWND, UINT, WPARAM, LPARAM);
64 LRESULT CALLBACK DlgProc(HWND hWnd, UINT Msg, WPARAM wParam, LPARAM
    lParam);
```



```

64 INT_PTR CALLBACK      Communication(HWND, UINT, WPARAM, LPARAM);
65 INT_PTR CALLBACK      CommAsymmetrical(HWND, UINT, WPARAM, LPARAM);
66 INT_PTR CALLBACK      About(HWND, UINT, WPARAM, LPARAM);
67 VOID                  SendInfo (LPVOID);
68 VOID                  SaveData (LPVOID);
69 BOOL                  WriteInPort(char *, DWORD);
70 BOOL                  CatchInformationSymetrical(HWND);
71 BOOL                  CatchInformationAsymetrical(HWND);
72 BOOL                  ConfigPosition(int, int, PBloque);
73 BOOL                  Calculates(double);
74 VOID                  TratarError(HWND);
75
76 int APIENTRY _tWinMain(HINSTANCE hInstance,
77                       HINSTANCE hPrevInstance,
78                       LPTSTR lpCmdLine,
79                       int nCmdShow)
80 {
81     UNREFERENCED_PARAMETER(hPrevInstance);
82     UNREFERENCED_PARAMETER(lpCmdLine);
83
84     // TODO: colocar código aquí.
85     MSG msg;
86     HACCEL hAccelTable;
87
88     // Inicializar cadenas globales
89     LoadString(hInstance, IDS_APP_TITLE, szTitle, MAX_LOADSTRING);
90     LoadString(hInstance, IDC_COMPAX3, szWindowClass, MAX_LOADSTRING);
91     MyRegisterClass(hInstance);
92     gsCritica = TRUE;
93
94     // Realizar la inicialización de la aplicación:
95     if (!InitInstance (hInstance, nCmdShow))
96     {
97         return FALSE;
98     }
99
100    hAccelTable = LoadAccelerators(hInstance, MAKEINTRESOURCE(IDC_
        COMPAX3));
101
102    // Bucle principal de mensajes:
103    while (GetMessage(&msg, NULL, 0, 0))
104    {
105        if (!TranslateAccelerator(msg.hwnd, hAccelTable, &msg))

```

```
106         {
107             TranslateMessage (&msg);
108             DispatchMessage (&msg);
109         }
110     }
111
112     return (int) msg.wParam;
113 }
114
115
116
117 //
118 // FUNCIÓN: MyRegisterClass()
119 //
120 // PROPÓSITO: registrar la clase de ventana.
121 //
122 // COMENTARIOS:
123 //
124 // Esta función y su uso son sólo necesarios si desea que el código
125 // sea compatible con sistemas Win32 anteriores a la función
126 // 'RegisterClassEx' que se agregó a Windows 95. Es importante llamar a
127 // esta función
128 // para que la aplicación obtenga iconos pequeños bien formados
129 // asociados a ella.
130 //
131 ATOM MyRegisterClass (HINSTANCE hInstance)
132 {
133     WNDCLASSEX wcex;
134
135     wcex.cbSize = sizeof (WNDCLASSEX);
136
137     wcex.style = CS_HREDRAW | CS_VREDRAW;
138     wcex.lpfnWndProc = WndProc;
139     wcex.cbClsExtra = 0;
140     wcex.cbWndExtra = 0;
141     wcex.hInstance = hInstance;
142     wcex.hIcon = LoadIcon (hInstance,
143         MAKEINTRESOURCE (IDI_COMPAX3));
144     wcex.hCursor = LoadCursor (NULL, IDC_ARROW);
145     wcex.hbrBackground = (HBRUSH) (COLOR_WINDOW+1);
146     wcex.lpszMenuName = MAKEINTRESOURCE (IDC_COMPAX3);
147     wcex.lpszClassName = szWindowClass;
148     wcex.hIconSm = LoadIcon (wcex.hInstance, MAKEINTRESOURCE
```

```
(IDI_SMALL));  
147  
148     return RegisterClassEx(&wcex);  
149 }  
150  
151 //  
152 // FUNCIÓN: InitInstance(HINSTANCE, int)  
153 //  
154 // PROPÓSITO: guardar el identificador de instancia y crear la ventana  
    principal  
155 //  
156 // COMENTARIOS:  
157 //  
158 // En esta función, se guarda el identificador de instancia en una  
    variable común y  
159 // se crea y muestra la ventana principal del programa.  
160 //  
161 BOOL InitInstance(HINSTANCE hInstance, int nCmdShow)  
162 {  
163     HWND hWnd;  
164  
165     hInst = hInstance; // Almacenar identificador de instancia en una  
        variable global  
166  
167     hWnd = CreateWindow(szWindowClass, szTitle, WS_OVERLAPPEDWINDOW,  
168         CW_USEDEFAULT, 0, CW_USEDEFAULT, 0, NULL, NULL, hInstance, NULL);  
169  
170     if (!hWnd)  
171     {  
172         return FALSE;  
173     }  
174  
175     ShowWindow(hWnd, nCmdShow);  
176     UpdateWindow(hWnd);  
177  
178     return TRUE;  
179 }  
180  
181 //  
182 // FUNCIÓN: WndProc(HWND, UINT, WPARAM, LPARAM)  
183 //  
184 // PROPÓSITO: procesar mensajes de la ventana principal.  
185 //
```

```
186 // WM_COMMAND : procesar el menú de aplicación
187 // WM_PAINT : pintar la ventana principal
188 // WM_DESTROY : enviar un mensaje de finalización y volver
189 //
190 //
191 LRESULT CALLBACK WndProc(HWND hWnd, UINT message, WPARAM wParam, LPARAM
    lParam)
192 {
193     int wmId, wmEvent;
194     PAINTSTRUCT ps;
195     HDC hdc;
196
197     switch (message)
198     {
199     case WM_COMMAND:
200         wmId = LOWORD(wParam);
201         wmEvent = HIWORD(wParam);
202         // Analizar las selecciones de menú:
203         switch (wmId)
204         {
205         case ID_COMUNICACION_SIM32772:
206             symmetrical = TRUE;
207             DialogBox(hInst, MAKEINTRESOURCE(IDD_DIALOG1),
                hWnd, Communication);
208             break;
209         case ID_COMUNICACION_ASIM32773:
210             symmetrical = FALSE;
211             DialogBox(hInst, MAKEINTRESOURCE(IDD_DIALOG2),
                hWnd, CommAsymmetrical);
212             break;
213         case IDM_ABOUT:
214             DialogBox(hInst, MAKEINTRESOURCE(IDD_ABOUTBOX),
                hWnd, About);
215             break;
216         case IDM_EXIT:
217             DestroyWindow(hWnd);
218             break;
219         default:
220             return DefWindowProc(hWnd, message, wParam, lParam
                );
221         }
222     case WM_PAINT:
223
```

```

224         hdc = BeginPaint(hWnd, &ps);
225         // TODO: agregar código de dibujo aquí...
226         EndPaint(hWnd, &ps);
227         break;
228     case WM_DESTROY:
229         PostQuitMessage(0);
230         break;
231     default:
232         return DefWindowProc(hWnd, message, wParam, lParam);
233     }
234     return 0;
235 }
236
237 //Controlador de mensajes en el cuadro de comunicación
238 INT_PTR CALLBACK Communication(HWND hDlg, UINT message, WPARAM
    wParam, LPARAM lParam)
239 {
240     int wmIdenti, wmEvento; //Para la gestión
241     //Opciones de seguridad del hilo
242     //LPSECURITY_ATTRIBUTES lpSecurityThread;
243     //lpSecurityThread->bInheritHandle =TRUE;
244     BOOL followProcess; //Indica la detencion del proceso por parte del
        usuario
245     HWND hwndCombo;
246     //HWND hwndRadio;
247     PInfo = &Info;
248     char* datos[12]={"300", "325", "350", "375", "400", "425", "450", "475",
        "500", "1000", "1500", "2000"}; //Valores de los tiempos de
        desplazamiento
249     //char* datos[10]={"350", "375", "400", "425", "450", "475", "500", "
        1000", "1500", "2000"}; //Valores de los tiempos de
        desplazamiento
250
251     /* Intentar poner que este marcado uno por defecto
252     hwndRadio = GetDlgItem(hDlg, IDC_RADIO1);
253     hwndRadio*/
254
255     switch (message)
256     {
257         case WM_INITDIALOG:
258             hwndCombo = GetDlgItem(hDlg, IDC_COMBO2);
259             ComboBox_AddString(hwndCombo, datos[0]);
260             ComboBox_AddString(hwndCombo, datos[1]);

```

```
261         ComboBox_AddString(hwndCombo, datos[2]);
262         ComboBox_AddString(hwndCombo, datos[3]);
263         ComboBox_AddString(hwndCombo, datos[4]);
264         ComboBox_AddString(hwndCombo, datos[5]);
265         ComboBox_AddString(hwndCombo, datos[6]);
266         ComboBox_AddString(hwndCombo, datos[7]);
267         ComboBox_AddString(hwndCombo, datos[8]);
268         ComboBox_AddString(hwndCombo, datos[9]);
269         ComboBox_AddString(hwndCombo, datos[10]);
270         ComboBox_AddString(hwndCombo, datos[11]);
271
272         break;
273
274         case WM_COMMAND:
275             wmIdenti = LOWORD(wParam);
276             wmEvento = HIWORD(wParam);
277             switch (wmIdenti)
278             {
279                 case ID_CONVERTIR:
280                     if (gsCritica == TRUE)
281                     {
282                         gsCritica = FALSE;
283
284                         if(!CatchInformationSymetrical(hDlg))
285                         {
286                             TratarError(hDlg);
287                             break;
288                         }
289
290                         SetDlgItemInt(hDlg, IDC_EDIT5, Info.velocity, TRUE);
291                         SetDlgItemInt(hDlg, IDC_EDIT6, Info.aceleration, TRUE);
292                         //SetDlgItemInt(hDlg, IDC_EDIT7, (int) ((Info.velocity)/(VELOCITY_MAX*
293                             3.5)), TRUE); //Con el filtro
294                         SetDlgItemInt(hDlg, IDC_EDIT7, (int) ((Info.velocity)/(VELOCITY_MAX*10)
295                             ), TRUE); //Sin Filtro
296                         SetDlgItemInt(hDlg, IDC_EDIT8, Info.nCicles, TRUE);
297                         SetDlgItemInt(hDlg, IDC_EDIT9, Info.delayTime1, TRUE);
298
299                         //DialogBox(hInst, MAKEINTRESOURCE(IDD_FIGURA), hWnd,
300                             CommAsymmetrical);
301
302                         if(MessageBox(NULL, "Se van a cargar los siguientes datos, ¿Desea
303                             continuar?",
```

```
300     "Pregunta", MB_YESNO | MB_ICONQUESTION)==IDNO)
301     {
302     gsCritica = TRUE;
303     break;
304     }
305
306     /*hHilo = CreateThread(
307     NULL, //Permite terminar el hilo
308     0,    //Tamaño de pila por defecto
309     (LPTHREAD_START_ROUTINE) SendInfo, //Función ejecutada por el
        hilo
310     (void*) hDlg, //Parametro que se pasa a la función
311     0,    //El hilo se ejecuta tras crearse
312     NULL); //Puntero a la variable que recibe la ID del hilo*/
313
314     //Se crea la barra de progreso
315     followProcess=DialogBox(hInst, MAKEINTRESOURCE(IDD_CONTROLS_DLG),
316     hDlg, reinterpret_cast<DLGPROC>(DlgProc));
317
318     if(followProcess == FALSE && gsCritica==FALSE)
319     {
320     TerminateThread(hHilo, 0);
321     char* stop= "0 1100,3=$4003\r";
322     WriteInPort(stop, (DWORD)strlen(stop));
323     Sleep(1);
324     //Apaga el motor
325     char* cadena3= "0 1100,3=0\r";
326     WriteInPort(cadena3, (DWORD)strlen(cadena3));
327     gsCritica = TRUE;
328     SendMessage(hwndGamma, WM_COMMAND, (WPARAM)2100, (LPARAM)0); //Stop
        Gamma Acquisition
329     }
330
331     }
332     else
333     MessageBox(hDlg, "Existe una configuración ejecutándose",
334     "CUIDADO", MB_OK| MB_ICONWARNING);
335     break;
336     case ID_HELP:
337     MessageBox(hDlg, "Introducir los datos correspondientes a los
        posicionamientos de "
338     "fuente y de detector, así como los tiempos de proceso y de
        desplazamiento. "
```

```
339     "Pulsar el botón convertir para determinar los diferentes parámetros
      que se "
340     "cargarán en el equipo. Si los datos son correctos, pulse SI en el
      siguiente "
341     "diálogo. A continuación se creará una barra que indica el progreso
      del movimiento. "
342     "En caso de surgir algún problema con el equipo en movimiento "
343     "se debe pulsar el botón CANCELAR de dicha barra.",
344     "AYUDA", MB_OK| MB_ICONINFORMATION);
345     break;
346     /*case ID_ABORT:
347     TerminateThread(hHilo, 0);
348     break; */
349     case ID_EXIT:
350     EndDialog(hDlg, LOWORD(wParam));
351     gsCritica = TRUE;
352     return (INT_PTR)TRUE;
353     break;
354     case IDCANCEL:
355     EndDialog(hDlg, LOWORD(wParam));
356     gsCritica = TRUE;
357     return (INT_PTR)TRUE;
358     break;
359     }
360 }
361 //EndDialog(hDlg, LOWORD(wParam));
362 return (INT_PTR)FALSE;
363
364 }
365 //Funcion que trata errores
366 VOID TratarError(HWND hDlg)
367 {
368     switch(caseError)
369     {
370     case 1:
371     MessageBox(hDlg, "Introducir datos correctamente", "ERROR", MB_OK | MB_
        ICONERROR);
372     gsCritica = TRUE;
373     break;
374     case 2:
375     MessageBox(hDlg, "El número de ciclos calculado es mayor de 14, pruebe a
        disminuir el tiempo de proceso",
376     "ERROR", MB_OK | MB_ICONERROR);
```



```
377     gsCritica = TRUE;
378     break;
379     case 3:
380     MessageBox(hDlg, "Los tiempos de fuente/detector son incorrectos, pruebe
        a disminuir el tiempo "
381     "de desplazamiento o bien a aumentar el tiempo de proceso", "ERROR", MB
        _OK | MB_ICONERROR);
382     gsCritica = TRUE;
383     break;
384     case 4:
385     MessageBox(hDlg, "La velocidad calculada está fuera del rango de
        operación, "
386     "pruebe a disminuir el tiempo de desplazamiento", "ERROR", MB_OK | MB_
        ICONERROR);
387     gsCritica = TRUE;
388     break;
389     case 5:
390     MessageBox(hDlg, "La velocidad calculada está fuera del rango de
        operación, "
391     "pruebe a aumentar el tiempo de desplazamiento", "ERROR", MB_OK | MB_
        ICONERROR);
392     gsCritica = TRUE;
393     break;
394     case 6:
395     MessageBox(hDlg, "Debe abrir el programa Gamma Acquisition y seleccionar
        la fuente correspondiente (UNISPEC u OSPREY)", "ERROR", MB_OK | MB_
        ICONERROR);
396     gsCritica = TRUE;
397     break;
398     default:
399     MessageBox(hDlg, "Error desconocido, por favor, inténtelo de nuevo",
400     "ERROR", MB_OK | MB_ICONERROR);
401     gsCritica = TRUE;
402     break;
403     }
404 }
405 }
406 //Controlador de mensajes en el cuadro de comunicación
407 INT_PTR CALLBACK CommAsymmetrical(HWND hDlg, UINT message, WPARAM wParam,
        LPARAM lParam)
408 {
409     int wmIdenti, wmEvento; //Para la gestión
410     //HANDLE hHilo;
```

```
411 PInfo = &Info;
412
413 if (message == WM_COMMAND)
414 {
415     wmIdenti = LOWORD (wParam);
416     wmEvento = HIWORD (wParam);
417     switch (wmIdenti)
418     {
419         case IDOK:
420             if (gsCritica == TRUE)
421             {
422                 gsCritica = FALSE;
423
424                 if(!CatchInformationAsymetrical(hDlg))
425                 {
426                     TratarError(hDlg);
427                     break;
428                 }
429
430                 hHilo = CreateThread(
431                     NULL, //Usar atributos por defecto
432                     0, //Tamaño de pila por defecto
433                     (LPTHREAD_START_ROUTINE) SendInfo, //Función ejecutada por el hilo
434                     (void*) hDlg, //Parametro que se pasa a la función
435                     0, //El hilo se ejecuta tras crearse
436                     NULL); //Puntero a la variable que recibe la ID del hilo
437             }
438         else
439             MessageBox(hDlg, "Existe una configuración ejecutándose",
440                 "CUIDADO", MB_OK| MB_ICONWARNING);
441         break;
442         case IDCANCEL:
443             EndDialog(hDlg, LOWORD(wParam));
444             return (INT_PTR)TRUE;
445         break;
446     }
447 }
448 return (INT_PTR)FALSE;
449
450 }
451
452 // Controlador de mensajes del cuadro Acerca de.
453 INT_PTR CALLBACK About (HWND hDlg, UINT message, WPARAM wParam, LPARAM
```

```
        lParam)
454 {
455     UNREFERENCED_PARAMETER(lParam);
456     switch (message)
457     {
458     case WM_INITDIALOG:
459         return (INT_PTR)TRUE;
460
461     case WM_COMMAND:
462         if (LOWORD(wParam) == IDOK || LOWORD(wParam) == IDCANCEL)
463         {
464             EndDialog(hDlg, LOWORD(wParam));
465             return (INT_PTR)TRUE;
466         }
467         break;
468     }
469     return (INT_PTR)FALSE;
470 }
471
472
473 //Funcion encargada de capturar los datos De la configuracion simétrica
474 BOOL CatchInformationSymetrical(HWND hDlg)
475 {
476     BOOL translated;
477
478     int space, processTime, j;
479     int td_
480         300[14]={0, 38230, 66620, 94110, 121510, 148960, 176210, 203750, 258100, 285330,
481
482         312230, 339720, 339720, 367060};
483     int td_
484         325[14]={0, 38401, 66782, 94513, 122112, 149712, 177015, 204413, 231774, 259146,
485
486         286495, 313733, 341213, 368663};
487     int td_
488         350[14]={0, 38601, 67182, 94913, 122612, 150221, 177715, 205213, 232747, 260246,
489
490         287695, 315120, 342413, 370011};
491     int td_
492         375[14]={0, 38751, 67382, 95313, 123111, 150821, 178415, 206063, 233647, 261246,
493
494         288795, 316452, 343913, 371511};
495     int td_
```

```
400[14]={0, 38915, 67582, 95713, 123611, 151421, 179115, 206863, 234547, 262246,
488 289952, 317652, 345373, 373021};
489 int td_
      425[14]={0, 39115, 67882, 96113, 124111, 152021, 179815, 207663, 235447, 263346,
490 291112, 318852, 346773, 373521};
491 int td_
      450[14]={0, 39215, 68232, 96513, 124611, 152621, 180612, 208463, 236447, 264346,
492 292412, 320152, 348073, 374000};
493 int td_
      475[14]={0, 39355, 68432, 96813, 125011, 153320, 181312, 209363, 237347, 265346,
494 293412, 321652, 349573, 377421};
495 int td_
      500[14]={0, 39550, 68660, 97210, 125220, 153820, 182200, 210230, 238340, 266240,
496 29530, 322650, 350730, 378920};
497 int td_1000[14]={0, 42680, 73910, 104520, 135460, 165200, 195330, 225560, 256130,
498 286250, 316510, 346640, 376550};
499 int td_1500[14]={0, 45580, 78220, 111490, 143850, 176210, 208440, 240680, 272910,
500 305110, 336410, 369490, 401600};
501 int td_2000[14]={0, 48410, 83230, 118120, 152510, 185520, 220540, 254940, 288930,
502 322440, 357450, 391390, 425420};
503
504 if (IsDlgButtonChecked(hDlg, IDC_RADIO1) == BST_CHECKED)
505 {//Comprueba si esta abierto el programa Gamma Acquisition seleccionada
      la fuente correspondiente
506   hwndGamma = FindWindow((LPCTSTR)NULL, "Gamma - UNISPEC");//UNISPEC
507   if(!hwndGamma)
508     hwndGamma = FindWindow((LPCTSTR)NULL, "Gamma - UNISPEC*");
509 }
510 else if (IsDlgButtonChecked(hDlg, IDC_RADIO2) == BST_CHECKED)
511 {//Comprueba si esta abierto el programa Gamma Acquisition seleccionada
      la fuente correspondiente
512   hwndGamma = FindWindow((LPCTSTR)NULL, "Gamma - OSPREY");//OSPREY
513   if(!hwndGamma)
514     hwndGamma = FindWindow((LPCTSTR)NULL, "Gamma - OSPREY*");
515 }
516 else
517 {
518   caseError = 6;
```

```
519     return FALSE;
520 }
521
522 if(!hwndGamma)
523 {
524     caseError = 6;
525     return FALSE;
526 }
527
528
529 Info.position = GetDlgItemInt(hDlg, IDC_EDIT1, &translated, TRUE);
530 if(translated == FALSE)
531 {
532     caseError=1;
533     return FALSE;
534 }
535
536 Info.positionSecond = GetDlgItemInt(hDlg, IDC_EDIT2, &translated, TRUE);
537 if(translated == FALSE)
538 {
539     caseError=1;
540     return FALSE;
541 }
542
543 Info.positionEnd = GetDlgItemInt(hDlg, IDC_EDIT3, &translated, TRUE);
544 if(translated == FALSE)
545 {
546     caseError=1;
547     return FALSE;
548 }
549
550
551 processTime = GetDlgItemInt(hDlg, IDC_EDIT4, &translated, TRUE);
552 if((translated == FALSE) || (processTime == 0))
553 {
554     caseError=1;
555     return FALSE;
556 }
557
558
559 Info.motionTime = GetDlgItemInt(hDlg, IDC_COMBO2, &translated, TRUE);
560 if((translated == FALSE) || (Info.motionTime == 0))
561 {
```

```
562 caseError=1;
563 return FALSE;
564 }
565
566
567 for(j=0; j<14; j++)
568 {
569     if((Info.motionTime==300)&&(processTime > td_300[j]) &&(processTime <=
        td_300[j+1]))
570         break;
571     if((Info.motionTime==325)&&(processTime > td_325[j]) &&(processTime <=
        td_325[j+1]))
572         break;
573     if((Info.motionTime==350)&&(processTime > td_350[j]) &&(processTime <=
        td_350[j+1]))
574         break;
575     if((Info.motionTime==375)&&(processTime > td_375[j]) &&(processTime <=
        td_375[j+1]))
576         break;
577     if((Info.motionTime==400)&&(processTime > td_400[j]) &&(processTime <=
        td_400[j+1]))
578         break;
579     if((Info.motionTime==425)&&(processTime > td_425[j]) &&(processTime <=
        td_425[j+1]))
580         break;
581     if((Info.motionTime==450)&&(processTime > td_450[j]) &&(processTime <=
        td_450[j+1]))
582         break;
583     if((Info.motionTime==475)&&(processTime > td_475[j]) &&(processTime <=
        td_475[j+1]))
584         break;
585     if((Info.motionTime==500)&&(processTime > td_500[j]) &&(processTime <=
        td_500[j+1]))
586         break;
587     if((Info.motionTime==1000)&&(processTime > td_1000[j]) &&(processTime <=
        td_1000[j+1]))
588         break;
589     if((Info.motionTime==1500)&&(processTime > td_1500[j]) &&(processTime <=
        td_1500[j+1]))
590         break;
591     if((Info.motionTime==2000)&&(processTime > td_2000[j]) &&(processTime <=
        td_2000[j+1]))
592         break;
```

```
593     if(j==13)
594     {
595         caseError=2;
596         return FALSE;
597     }
598
599 }
600
601
602 Info.nCicles = j+1;
603
604 Info.delayTime0 = 0;
605
606 double tiempoCiclo = (double)processTime/(2*Info.nCicles);
607
608 Info.delayTime1= (int)tiempoCiclo - Info.motionTime;
609
610 if(Info.delayTime1<0)
611 {
612     caseError=3;
613     return FALSE;
614 }
615
616
617 Info.delayTime2 = Info.delayTime1;
618
619 if((Info.position>0 && Info.positionSecond>0) || (Info.position<0 && Info
        .positionSecond<0))
620     space=abs(abs(Info.position)-abs(Info.positionSecond));
621 else
622     space= abs(Info.position-Info.positionSecond);
623
624 if(!Calculates( (double)space))
625 {
626     return FALSE;
627 }
628
629 /*Calculo de los tiempos de inicio y de los tiempos finales*/
630 double k1,k2;
631
632 if((Info.position>0 && Info.positionEnd>0) || (Info.position<0 && Info.
        positionEnd<0))
633     space=abs(abs(Info.position)-abs(Info.positionEnd));
```

```
634 else
635     space= abs(Info.position-Info.positionEnd);
636
637     k1=(VELOCITY_MAX*1000)/(ACCELERATION_MAX);
638     k2=(space*1000)/(Info.velocity);
639
640     Info.startTime= ceil (k1+k2);
641
642     if((Info.positionSecond>0 && Info.positionEnd>0) || (Info.positionSecond
        <0 && Info.positionEnd<0))
643         space=abs(abs(Info.positionSecond)-abs(Info.positionEnd));
644     else
645         space= abs(Info.positionSecond-Info.positionEnd);
646
647         k1=(VELOCITY_MAX*1000)/(ACCELERATION_MAX);
648         k2=(space*1000)/(Info.velocity);
649
650         Info.endTime= ceil (k1+k2);
651         if (Info.endTime < 300)
652             Info.endTime = 1000; //Si el tiempo final es menor de 300 ms se da mayor
                margen; lseg
653 //Info.startTime = ceil ((VELOCITY_MAX/(ACCELERATION_MAX))*1000+ space/(
        Info.velocity));
654
655     return TRUE;
656
657 }
658
659 BOOL CatchInformationAsymetrical(HWND hDlg)
660 {
661     BOOL translated;
662
663     int space;//valores de la ecuacion de 2ºgrado
664
665     Info.position = GetDlgItemInt (hDlg, IDC_EDIT1, &translated, TRUE);
666     if(translated == FALSE)
667         return FALSE;
668
669     Info.positionSecond = GetDlgItemInt(hDlg, IDC_EDIT2, &translated, TRUE);
670     if(translated == FALSE)
671         return FALSE;
672
673     Info.velocity = GetDlgItemInt(hDlg, IDC_EDIT3, &translated, TRUE);
```



```
674 if((translated == FALSE) || (Info.velocity == 0))
675     return FALSE;
676
677 Info.aceleration = GetDlgItemInt(hDlg, IDC_EDIT4, &translated, TRUE);
678 if((translated == FALSE) || (Info.aceleration == 0))
679     return FALSE;
680
681 Info.deceleration = GetDlgItemInt(hDlg, IDC_EDIT5, &translated, TRUE);
682 if((translated == FALSE) || (Info.deceleration == 0))
683     return FALSE;
684
685 Info.delayTime0 = GetDlgItemInt(hDlg, IDC_EDIT6, &translated, TRUE);
686 if(translated == FALSE)
687     return FALSE;
688
689 Info.delayTime1 = GetDlgItemInt(hDlg, IDC_EDIT7, &translated, TRUE);
690 if(translated == FALSE)
691     return FALSE;
692
693 Info.delayTime2 = GetDlgItemInt(hDlg, IDC_EDIT8, &translated, TRUE);
694 if(translated == FALSE)
695     return FALSE;
696
697 Info.nCicles = GetDlgItemInt(hDlg, IDC_EDIT9, &translated, TRUE);
698 if(translated == FALSE)
699     return FALSE;
700
701 space=abs(abs(Info.position)-abs(Info.positionSecond));
702
703 //Info.motionTime=CalculateTime((float)space, (float)Info.velocity, (
704     float)Info.aceleration, (float) Info.deceleration);
705
706 return TRUE;
707 }
708
709 //Función que calcula y carga la velocidad y la aceleracion/deceleracion
710 BOOL Calculates(double eT)
711 {
712     double velocidad, aceleracion, k;
713
714     double td=(double) Info.motionTime;
715
```

```
716  /*td = td/1000;
717
718  k = (td*td)/4;
719  aceleracion = eT/k;
720  velocidad = aceleracion*(td/2);*/
721
722  td = td/1000;
723
724  k=VELOCITY_MAX/(ACCELERATION_MAX);
725
726  velocidad = eT/(td-k);
727  aceleracion = velocidad/k;
728
729
730
731  if(aceleracion<=0 || velocidad<=0 || aceleracion >= (ACCELERATION_MAX*
      1000) || velocidad >=(VELOCITY_MAX*1000))
732  {
733    caseError=5; //error debido a que velocidad o la aceleracion es negativa.
      Se debe dar mas tiempo de desplazamiento
734    return FALSE;
735  }
736
737  /*if (aceleracion >=((450)*ACCELERATION_MAX) || velocidad >=((450)*
      VELOCITY_MAX))
738  {
739    caseError =5; //error debido a valores demasiado grandes.
740    return FALSE;
741  }*/
742  /*FILTRO Antiguo
743  if (aceleracion >=((350)*ACCELERATION_MAX))
744  {
745    caseError =5; //error debido a valores demasiado grandes.
746    return FALSE;
747  }
748
749  if (aceleracion < 100000)
750    Info.jerk = 100000;
751  else if(aceleracion >200000)
752  {
753    caseError =5; //error debido a valores demasiado grandes.
754    return FALSE;
755  }
```

```
756 else
757     Info.jerk = 1000000;
758     */
759     //Filtro nuevo
760     if (aceleracion < 150000)
761         Info.jerk = 100000;
762     else
763     {
764         Info.jerk = 500000;
765     } //Fin de filtro nuevo
766
767     Info.aceleration = (int) ceil(aceleracion);
768     Info.deceleration = (int) ceil(aceleracion);
769
770     Info.velocity = (int) ceil(velocidad);
771
772     return TRUE;
773 }
774
775
776 void SaveData (LPVOID parametro)
777 {
778
779     char buffer[10];
780
781     itoa(ciclo,buffer,10);
782
783     Sleep(500);
784
785     printf("No hago nada");
786
787     //SendMessage(hwndGamma, WM_COMMAND, (WPARAM)1200, (LPARAM)0); //abre
        SAVE AS GAMMA
788
789     char s[100];
790
791
792     hwndSaveAs = FindWindow((LPCTSTR)NULL, "Save");//UNISPEC
793
794     if (!hwndSaveAs)
795         printf("No funciona");
796
797     SendMessage(hwndSaveAs,WM_GETTEXT,100, (LPARAM)s);
```

```
798
799  HWND button=FindWindowEx(hwndSaveAs, 0, "Button", "&Save");
800  if (button==NULL)
801      printf("No funciona");
802
803
804  HWND edit=FindWindowEx(hwndSaveAs, 0, "Edit", "");
805
806  if (!edit)
807      printf("No funciona");
808
809  HWND type=FindWindowEx(hwndSaveAs, 0, "ComboBox", "0x00250696");
810
811  HWND type2=GetDlgItem(hwndSaveAs, 0x0470);
812
813  if (!type2)
814      printf("No funciona");
815
816  strcpy_s(s, 15, "Muestra10.txt"); //Cambiar nombre del archivo por el
      deseado
817  strcat_s(buffer, 10, ".iec");
818  strcat_s(s, buffer);
819
820
821  SendMessage(edit, WM_SETTEXT, 0, (LPARAM) s);
822  //SendMessage(type, WM_SETTEXT, 0, (LPARAM) "IEC1455 File (*.IEC)");
823  SendMessage(type2, CB_SHOWDROPDOWN, true, 0);
824
825  //En esta linea poner un 0 donde está el 2 para guardar como cnf
826  SendMessage(type2, CB_SETCURSEL, 2, 0);
827
828  SendMessage(button, BM_SETSTATE, 1, (LPARAM) 0);
829  Sleep(275); //da algo de tiempo
830  SendMessage(button, WM_LBUTTONDOWN, 0, (LPARAM) 0);
831  SendMessage(button, WM_LBUTTONUP, 0, (LPARAM) 0);
832
833  /* if (hwndSaveAs)
834      {
835          char s[100];
836
837          strcpy (s, "prueba.cnf");
838          SendMessage(hwndSaveAs, WM_GETTEXT, 100, (LPARAM) s);
839          printf("Funciona");
```

```
840     */
841
842     printf("No funciona");
843
844 }
845
846 //Funcion encargada de transmitir los comandos, si se ha producido algún
      error se sale del hilo
847 void SendInfo (LPVOID parametro)
848 {
849     FILE *f;
850
851     ciclos++;
852     SendMessage(hwndPB, PBM_STEPIT, 0, 0);
853
854     //CONFIGURACION POSICION 1. Fuente
855     if(!ConfigPosition(1,PInfo->position, PInfo))
856     {
857         EndDialog((HWND)parametro, 1);
858         gsCritica = TRUE;
859         ExitThread(1);
860     }
861 }
862
863 //CONFIGURACION POSICION 2. Detector
864 if(!ConfigPosition(2,PInfo->positionSecond, PInfo))
865 {
866     EndDialog((HWND)parametro, 1);
867     gsCritica = TRUE;
868     ExitThread(1);
869 }
870
871 //CONFIGURACION POSICION 3. Posición Final
872 if(!ConfigPosition(3,PInfo->positionEnd, PInfo))
873 {
874     EndDialog((HWND)parametro, 1);
875     gsCritica = TRUE;
876     ExitThread(1);
877 }
878
879
880 //Energizar el motor
881 char* cadena= "O 1100,3=1\r";
```

```
882 if (!WriteInPort(cadena, (DWORD)strlen(cadena)))
883 {
884     EndDialog((HWND)parametro, 1);
885     gsCritica = TRUE;
886     ExitThread(1);
887 }
888
889 char* stop= "O 1100,3=$4003\r";
890 char* startFirstPosition= "O 1100,3=$6103\r";
891 char* startSecondPosition= "O 1100,3=$6203\r";
892 char* startEndPosition= "O 1100,3=$6303\r";
893 int i,nCiclos, dT0,dT1, dT2;
894
895 dT0= PInfo->delayTime0;
896 dT1= PInfo->delayTime1;
897 dT2= PInfo->delayTime2;
898 nCiclos = PInfo->nCicles;
899
900
901 SendMessage(hwndGamma, WM_COMMAND, (WPARAM)3050, (LPARAM)0); //Clear
    Spectrum->Gamma Acquisition
902 SendMessage(hwndPB, PBM_STEPIT, 0, 0);
903
904
905 //Sleep(1);
906 //WriteInPort(hComm, stop, (DWORD)strlen(stop));
907 //Sleep(5);
908 if (!WriteInPort(startEndPosition, (DWORD)strlen(startEndPosition)))
909 {
910     EndDialog((HWND)parametro, 1);
911     gsCritica = TRUE;
912     ExitThread(1);
913     return;
914 }
915
916 Sleep(PInfo->startTime);
917
918
919 for (ciclo=1;ciclo<=nCiclos;ciclo++)
920 {
921
922
923     //printf("Entro en el bucle\n");
```

```
924 //char buffer[20];
925 //char buffer2[10];
926 //strcpy(buffer, "C:\\");
927 //itoa(i,buffer2,9);
928 //char *nameFile=strcat(buffer,buffer2);
929 //if ((f=fopen(nameFile,"w"))==NULL) printf ("A la ...");
930
931 if(!WriteInPort(stop, (DWORD)strlen(stop))
932 {
933     EndDialog((HWND)parametro, 1);
934     gsCritica = TRUE;
935     ExitThread(1);
936     return;
937 }
938
939 Sleep(5);
940
941 if(!WriteInPort(startFirstPosition, (DWORD)strlen(startFirstPosition))
942 {
943     EndDialog((HWND)parametro, 1);
944     gsCritica = TRUE;
945     ExitThread(1);
946     return;
947 }
948
949 SendMessage(hwndPB, PBM_STEPIT, 0, 0);
950
951 if(ciclo==1)
952     Sleep(PInfo->startTime);
953 else
954     Sleep(PInfo->motionTime);
955
956 if(ciclo==1 && !(symmetrical))
957     Sleep(dT0-1523); //se han restado tiempos de procesado de datos
958 else
959     Sleep(dT1-1523); //se han restado tiempos de procesado de datos
960
961 if(!WriteInPort(stop, (DWORD)strlen(stop))
962 {
963     EndDialog((HWND)parametro, 1);
964     gsCritica = TRUE;
965     ExitThread(1);
966     return;
```

```
967     }
968
969     Sleep(1);
970
971     hHilo2 = CreateThread(
972         NULL,    //Usar atributos por defecto
973         0,      //Tamaño de pila por defecto
974         (LPTHREAD_START_ROUTINE) SaveData, //Función ejecutada por el hilo
975         (void*) NULL, //Parametro que se pasa a la función
976         0,      //El hilo se ejecuta tras crearse
977         NULL);
978
979     SendMessage(hwndGamma, WM_COMMAND, (WPARAM)1200, (LPARAM)0); //abre SAVE
        AS GAMMA
980
981
982     Sleep(5);
983
984     if(!WriteInPort(startSecondPosition, (DWORD)strlen(startSecondPosition))
        )
985     {
986         EndDialog((HWND)parametro, 1);
987         gsCritica = TRUE;
988         ExitThread(1);
989         return;
990     }
991
992     Sleep(PInfo->motionTime);
993
994
995     SendMessage(hwndGamma, WM_COMMAND, (WPARAM)2050, (LPARAM)0); //Start
        Gamma Acquisition
996     SendMessage(hwndPB, PBM_STEPIT, 0, 0);
997
998     Sleep(dT2);
999     SendMessage(hwndGamma, WM_COMMAND, (WPARAM)2100, (LPARAM)0); //Stop
        Gamma Acquisition
1000 /*Sleep(100);
1001
1002     hHilo2 = CreateThread(
1003         NULL,    //Usar atributos por defecto
1004         0,      //Tamaño de pila por defecto
1005         (LPTHREAD_START_ROUTINE) SaveData, //Función ejecutada por el hilo
```



```
1006     (void*) NULL, //Parametro que se pasa a la función
1007     0, //El hilo se ejecuta tras crearse
1008     NULL);
1009
1010     SendMessage(hwndGamma, WM_COMMAND, (WPARAM)1200, (LPARAM)0); //abre SAVE
        AS GAMMA */
1011
1012
1013     hwndSaveAs = FindWindow((LPCTSTR)NULL, "Save");//UNISPEC
1014     if(hwndSaveAs)
1015     {
1016         char s[100];
1017
1018         strcpy(s, "prueba.cnf");
1019         SendMessage(hwndSaveAs, WM_GETTEXT, 100, (LPARAM)s);
1020         printf("Funciona");
1021     }
1022
1023     printf("No funciona");
1024     //SendMessage(hwndGamma, WM_GETDLGCODE, (LPARAM)00000480, (GETTEXT)"
        loco");
1025
1026     //fclose(f);*/
1027
1028 }
1029
1030 /*WriteInPort(hComm, stop, (DWORD)strlen(stop));
1031 Sleep(1);
1032 WriteInPort(hComm, startFirstPosition, (DWORD)strlen(startFirstPosition))
        ;
1033
1034 Sleep(PInfo->motionTime);*/
1035
1036 if(!WriteInPort(stop, (DWORD)strlen(stop)))
1037 {
1038     EndDialog((HWND)parametro, 1);
1039     gsCritica = TRUE;
1040     ExitThread(1);
1041     return;
1042 }
1043
1044 Sleep(5);
1045
```

```
1046 if(!WriteInPort(startEndPosition, (DWORD)strlen(startEndPosition)))
1047 {
1048     EndDialog((HWND)parametro, 1);
1049     gsCritica = TRUE;
1050     ExitThread(1);
1051     return;
1052 }
1053
1054 Sleep(PInfo->endTime); //Tarda muy poco tiempo
1055 SendMessage(hwndPB, PBM_STEPIT, 0, 0);
1056
1057 //Sleep(5000); //Ponerlo bien, añadir un tiempo extra si es excesivamente
        pequeño
1058
1059 //WriteInPort(stop, (DWORD)strlen(stop));
1060 //Sleep(5);
1061 //Apaga el motor
1062 char* cadena3= "O 1100,3=0\r";
1063 if(!WriteInPort(cadena3, (DWORD)strlen(cadena3)))
1064 {
1065     EndDialog((HWND)parametro, 1);
1066     gsCritica = TRUE;
1067     ExitThread(1);
1068     return;
1069 }
1070
1071
1072 EndDialog((HWND)parametro, 1);
1073 MessageBox(NULL, "Se ha terminado la ejecución del programa",
1074     "Fin de Ejecución", MB_OK | MB_ICONINFORMATION);
1075
1076 //delete this; Hay que borrar
1077
1078 gsCritica = TRUE;
1079 ExitThread(1);
1080 }
1081
1082 //Función que configura la posición
1083 BOOL ConfigPosition(int n,int position, PBloque PB)
1084 {
1085     //Command for entry into the set table
1086     char setTable[MAX_SIZE_STRING];
1087     sprintf(setTable, "O 1904, %d=$32\r",n);
```

```
1088  if(!WriteInPort(setTable, (DWORD)strlen(setTable)))
1089      return FALSE;
1090  Sleep(100);
1091
1092  //Velocidad
1093  char velocidad[MAX_SIZE_STRING];
1094  sprintf(velocidad, "O 1902, %d= %d\r", n, PB->velocity) ;
1095  //Sleep(1);
1096  if(!WriteInPort(velocidad, (DWORD)strlen(velocidad))
1097      return FALSE;
1098  Sleep(100);
1099
1100  //Posicion Absoluta
1101  char absPosition [MAX_SIZE_STRING];
1102  sprintf(absPosition, "O 1905, %d=1\r", n);
1103  //Sleep(1);
1104  if(!WriteInPort(absPosition, (DWORD)strlen(absPosition))
1105      return FALSE;
1106  Sleep(100);
1107
1108  //Aceleración
1109  char aceleracion[MAX_SIZE_STRING];
1110  sprintf(aceleracion, "O 1906, %d= %d\r", n, PB->acceleration) ;
1111  //Sleep(1);
1112  if(!WriteInPort(aceleracion, (DWORD)strlen(aceleracion))
1113      return FALSE;
1114  Sleep(100);
1115
1116  //Deceleración
1117  char deceleracion [MAX_SIZE_STRING];
1118  sprintf(deceleracion, "O 1907, %d= %d\r", n, PB->deceleration) ;
1119  //Sleep(1);
1120  if(!WriteInPort(deceleracion, (DWORD)strlen(deceleracion))
1121      return FALSE;
1122  Sleep(100);
1123
1124  //Jerk
1125  char jerk [MAX_SIZE_STRING];
1126  sprintf(jerk, "O 1908, %d= %d\r", n, PB->jerk) ;
1127  //Sleep(1);
1128  if(!WriteInPort(jerk, (DWORD)strlen(jerk))
1129      return FALSE;
1130  Sleep(100);
```

```
1131
1132 //Posicion
1133 char posicion[MAX_SIZE_STRING];
1134 sprintf(posicion, "O 1901, %d= %d\r", n, position) ;
1135 //Sleep(1);
1136 if(!WriteInPort(posicion, (DWORD)strlen(posicion)))
1137     return FALSE;
1138
1139 Sleep(100);
1140 return TRUE;
1141 }
1142
1143 //Función encargada de escribir en el puerto COM1, retorna TRUE en caso de
        que
1144 //no se produzca ningún error y FALSE en caso contrario
1145
1146 BOOL WriteInPort(char * lpBuf, DWORD dwToWrite)
1147 {
1148     HANDLE hComm;
1149     DWORD dwWritten;
1150     char* gszPort = "COM1";
1151     //PBloque PB;
1152     //PB= (PBloque) parametro;
1153
1154     hComm = CreateFile( gszPort,
1155         GENERIC_READ | GENERIC_WRITE,
1156         0,
1157         0,
1158         OPEN_EXISTING,
1159         FILE_ATTRIBUTE_NORMAL,
1160         0);
1161
1162     if (hComm == INVALID_HANDLE_VALUE)
1163     { // error opening port; abort
1164
1165         CloseHandle(hComm);
1166         MessageBox(NULL, "Existe una configuración ejecutándose",
1167             "CUIDADO", MB_OK| MB_ICONWARNING);
1168         return FALSE;
1169     }
1170
1171     DCB dcb;
1172
```

```
1173     if (!GetCommState(hComm,&dcb))
1174     {
1175
1176     CloseHandle(hComm);
1177     MessageBox(NULL, "Existe una configuración ejecutándose",
1178     "CUIDADO", MB_OK| MB_ICONWARNING);
1179     return FALSE;
1180     }
1181
1182     dcb.BaudRate = CBR_115200; //115200 Baud
1183     dcb.ByteSize = 8; //8 data bits
1184     dcb.Parity = NOPARITY; //no parity
1185     dcb.StopBits = ONESTOPBIT; //1 stop
1186     //dcb.fDtrControl=DTR_CONTROL_DISABLE; //Deshabilita el control por
        hardware
1187     //dcb.fRtsControl=RTS_CONTROL_DISABLE; //Sin control de flujo
1188
1189
1190
1191     if (!SetCommState(hComm,&dcb))
1192     {
1193
1194     CloseHandle(hComm);
1195     MessageBox(NULL, "Se ha producido un error en la ejecución del programa"
1196     ,
        "Fin de Ejecución", MB_OK | MB_ICONINFORMATION);
1197     return FALSE;
1198     }
1199
1200
1201     // Issue write.
1202     if (!WriteFile(hComm, lpBuf, dwToWrite, &dwWritten, NULL))
1203     {
1204     CloseHandle(hComm);
1205     MessageBox(NULL, "Se ha producido un error inesperado en el transcurso
        del programa",
1206     "Fin de Ejecución", MB_OK | MB_ICONINFORMATION);
1207     return FALSE;
1208     }
1209
1210     if(dwWritten != dwToWrite)
1211     {
1212     CloseHandle(hComm);
```

```
1213     MessageBox(NULL, "Se ha producido un error inesperado en la ejecución
1214         del programa",
1215         "Fin de Ejecución", MB_OK | MB_ICONINFORMATION);
1216     return FALSE;
1217 }
1218     CloseHandle(hComm);
1219     //delete hComm;
1220     return TRUE;
1221 }
1222
1223 //-----
1224 //Barra de progreso. Indica el estado del proceso
1225 //-----
1226 LRESULT CALLBACK DlgProc(HWND hWndDlg, UINT Msg,
1227     WPARAM wParam, LPARAM lParam)
1228 {
1229     INITCOMMONCONTROLSEX InitCtrlEx;
1230
1231     InitCtrlEx.dwSize = sizeof(INITCOMMONCONTROLSEX);
1232     InitCtrlEx.dwICC = ICC_PROGRESS_CLASS;
1233     InitCommonControlsEx(&InitCtrlEx);
1234
1235     switch(Msg)
1236     {
1237     case WM_INITDIALOG:
1238         hwndPB=CreateWindowEx(0, PROGRESS_CLASS, NULL,
1239             WS_CHILD | WS_VISIBLE| PBS_SMOOTH,
1240             20, 20, 260, 30,
1241             hWndDlg, NULL, hInst, NULL);
1242         SendMessage(hwndPB, PBM_SETRANGE, 0, MAKELPARAM(0, 10*(3*Info.nCicles+2)
1243             ));
1244
1245         hHilo = CreateThread(
1246             NULL, //Permite terminar el hilo
1247             0, //Tamaño de pila por defecto
1248             (LPTHREAD_START_ROUTINE) SendInfo, //Función ejecutada por el hilo
1249             (void*) hWndDlg, //Parametro que se pasa a la función
1250             0, //El hilo se ejecuta tras crearse
1251             NULL); //Puntero a la variable que recibe la ID del hilo
1252
1253     return TRUE;
```

```
1254 case WM_COMMAND:
1255     switch(wParam)
1256     {
1257     /*case IDOK:
1258         EndDialog(hWndDlg, 0);
1259         return TRUE;*/
1260     case IDCANCEL:
1261         EndDialog(hWndDlg, 0);
1262         return TRUE;
1263     }
1264     break;
1265 }
1266
1267 /*
1268 if(gsCritica)
1269 {
1270     EndDialog(hWndDlg, 1);
1271     MessageBox(NULL, "Se ha terminado la ejecución del programa",
1272         "Fin de Ejecución", MB_OK | MB_ICONINFORMATION);
1273     return TRUE;
1274 }*/
1275
1276 return FALSE;
1277 }
```


Bibliografía

- [1] Joseph Adler. *R in a nutshell: A desktop quick reference*. O'Reilly Media, Inc., 2010.
- [2] HM Agrawal, Kailash Pandey, K Surendra Babu, Ashok Kumar, and R Pepelnik. Neutron activation cross-sections at (14.6 ± 0.3) MeV. *Annals of Nuclear Energy*, 35(9):1713–1719, 2008.
- [3] Abdulkadir Aksoy, Fatah Z Khiari, and Meyassar N Al-Haddad. Sensitivities of 14 MeV neutron activation analysis using a drift-tube neutron generator at KFUPM. *Arabian Journal for Science and Engineering*, 28(1):61–72, 2003.
- [4] MA Al-Mugrabi and NM Spyrou. The use of simulation for the optimisation of the signal-to-noise ratio in cyclic activation analysis. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, 110(1):67–77, 1987.
- [5] Zeev B Alfassi and Natan Lavi. Simultaneous determination of sodium, magnesium, aluminium, silicon and phosphorus by instrumental neutron-activation analysis using reactor and epithermal neutrons. *Analyst*, 109(7):959–962, 1984.
- [6] David B Allison, Xiangqin Cui, Grier P Page, and Mahyar Sabripour. Microarray data analysis: from disarray to consolidation and consensus. *Nature reviews genetics*, 7(1):55–65, 2006.
- [7] T Alonso-Sánchez, MA Rey Ronco, María Pilar Castro-García, and Francisco José Carnero-Rodríguez. Design for an asymmetrical cyclic neutron activation process for determining fluorite grade in fluorspar concentrate. *Journal of Mathematical Chemistry*, 50(2):394–409, 2012.
- [8] C Álvarez, J Pisonero, and N Bordel. Quantification of fluorite mass-content in powdered ores using a laser-induced breakdown spectroscopy method based on the detection of minor elements and caF molecular bands. *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*, 100:123–128, 2014.

- [9] OSWALD U Anders. Use of very-short-lived isotopes in activation analysis. *Analytical Chemistry*, 33(12):1706–1709, 1961.
- [10] OU Anders. Determination of fluorine by neutron activation. *Analytical Chemistry*, 32(10):1368–1369, 1960.
- [11] JM Bakes and PG Jeffery. Communications. The determination of fluorine by neutron activation. *Analyst*, 91(1080):216–217, 1966.
- [12] FA Balogun, IA Tubosun, AO Akanle, JO Ojo, CA Adesanmi, JA Ajao, and NM Spyrou. INAA in the determination of the elemental constituents of a natural fluorite. *Journal of radioanalytical and nuclear chemistry*, 222(1-2):35–38, 1997.
- [13] D Bates, M Maechler, B Bolker, and S Walker. Package LME4: linear mixed-effects models using eigen and S4. *October*, 25:2013, 2013.
- [14] L Paul Bédard and Kathryn L Linge. GGR Biennial Review: Atomic Absorption, Inductively Coupled Plasma-Atomic Emission Spectrometry, Neutron Activation Analysis and X-Ray Fluorescence Spectrometry Review for 2008–2009. *Geostandards and Geoanalytical Research*, 34(4):343–352, 2010.
- [15] Yoav Benjamini and Yosef Hochberg. Controlling the false discovery rate: a practical and powerful approach to multiple testing. *Journal of the Royal Statistical Society. Series B (Methodological)*, pages 289–300, 1995.
- [16] M Borsaru and C Ceravolo. A low activity spectrometric gamma- gamma borehole logging tool for the coal industry. *The International journal of radiation applications and instrumentation. Part E. Nuclear geophysics*, 8(4):343–350, 1994.
- [17] M Borsaru and PJ Mathew. Fast neutron activation analysis of bulk coal samples for alumina, silica and ash. *Analytica Chimica Acta*, 142:349–354, 1982.
- [18] E Bujdosó. Analysis by Nuclear Reactions and Activation. A Current Bibliography. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, 243(3):847–854, 2000.
- [19] GD Burholt, EAY Caesar, and TC Jones. The fast cyclic activation system for neutron activation analysis in the university of London reactor. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*, 204(1):231–234, 1982.
- [20] AP Bushkov and VI Prokopchik. The activation method for determining fluorite. *Atomic Energy*, 21(3):868–870, 1966.

- [21] RL Caldwell, WR Mills Jr, LS Allen, PR Bell, and RL Heath. Combination neutron experiment for remote analysis. *Science (New York, NY)*, 152(3721):457–465, 1966.
- [22] María Pilar Castro-García, T Alonso-Sánchez, and MA Rey-Ronco. Study of the gamma spectrum of ^{16}N with a BGO detector, for the purpose of calibration and of determining the fluorine grade of mineral samples. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, 298(2):915–921, 2013.
- [23] María Pilar Castro García et al. *Activación neutrónica cíclica para la determinación del contenido en flúor de muestras de mineral de fluorita*. PhD thesis, Universidad de Oviedo. <http://www.tesisred.net>, 2012.
- [24] A Chatt, KN Desilva, J Holzbecher, DC Stuart, RE Tout, and DE Ryan. Cyclic neutron activation analysis of biological and metallurgical samples. *Canadian Journal of Chemistry*, 59(11):1660–1664, 1981.
- [25] VB Chermeninov. Borehole influence on the spectral shape of induced gamma-radiation of ^{16}N . *Atomic Energy*, 66(5):399–402, 1989.
- [26] VB Chermeninov. Metrological support to fluorine neutron-activation logging. *Measurement Techniques*, 34(8):838–841, 1991.
- [27] DR Chettle and JH Fremlin. Techniques of in vivo neutron activation analysis. 1984.
- [28] Edgar F Codd. *The relational model for database management: version 2*. Addison-Wesley Longman Publishing Co., Inc., 1990.
- [29] Stanton H Cohn. In vivo neutron activation analysis: State of the art and future prospects. *Medical physics*, 8(2):145–154, 1981.
- [30] Ian W Croudace and Keith Randle. A rapid and non-destructive method of fluorine determination using fast-neutron activation analysis. *Chemical geology*, 67(1):165–170, 1988.
- [31] Ian W Croudace and Keith Randle. Fluorine abundances or twenty nine geological and other reference samples using fast-neutron activation analysis. *Geostandards Newsletter*, 17(2):217–218, 1993.
- [32] Lloyd A Currie. Nomenclature in evaluation of analytical methods including detection and quantification capabilities (Recommendations 1995). *Pure and Applied Chemistry*, 67(10):1699–1723, 1995.

- [33] NG Cutmore, BD Sowerby, JS Watt, and RJ Holmes. Nuclear techniques for on-line analysis in mineral and coal processing. *Nuclear Analytical Techniques for on-line elemental analysis in industry*, page 37, 1988.
- [34] Tamraparni Dasu and Theodore Johnson. *Exploratory data mining and data cleaning*, volume 479. John Wiley & Sons, 2003.
- [35] K De Neve, Karel Strijckmans, and Richard Dams. Feasibility study of cyclic charged particle activation analysis. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 431(1):366–377, 1999.
- [36] L De Norre, J Op De Beeck, and J Hoste. Determination of fluorine in zinc ores using an isotope neutron source based automated neutron activation analysis system. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, 59(2):453–466, 1980.
- [37] Matthew Dowle, T Short, S Lianoglou, and Maintainer Matt Dowle. Package data.table. 2014.
- [38] Ayşe Durusoy and Iskender Atilla Reyhancan. Measurements of activation cross-sections for the $^{19}\text{F}(\text{n}, \alpha)^{16}\text{N}$ reaction for neutrons with energies between 13 and 15 MeV. *Annals of Nuclear Energy*, 33(2):159–162, 2006.
- [39] ECD. Energy citations database - search results. <http://www.osti.gov/scitech/>.
- [40] EXFOR. Experimental Nuclear Reaction Data. www.nndc.bnl.gov/exfor/.
- [41] TS Fan, ZY Guo, WG Ye, WL Liu, YQ Feng, XX Song, G Huang, TJ Liu, YJ Hong, C Liu, et al. NDOS: Nuclear Data Online Services. *Annals of Nuclear Energy*, 31(11):1275–1284, 2004.
- [42] Zhang Feng and Liu Jun-tao. Monte Carlo simulation of PGNA system for determining element content in the rock sample. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, 299(3):1219–1224, 2014.
- [43] J Frána, M Vobecky, Z Randa, J Benada, and J Kuncir. Instrumental Neutron Activation Analysis of lunar samples by means of short activation. Technical report, Inst. of Nuclear Research, Rez, Czech, 1971.
- [44] Jerome Friedman, Trevor Hastie, and Rob Tibshirani. Regularization paths for generalized linear models via coordinate descent. *Journal of statistical software*, 33(1):1, 2010.

- [45] María Pilar Castro García. *Activación neutrónica cíclica para la determinación del contenido en flúor de muestras de mineral de fluorita*. Universidad de Oviedo, Servicio de Publicaciones, 2012.
- [46] Michael D Glascock and Hector Neff. Neutron activation analysis and provenance research in archaeology. *Measurement Science and Technology*, 14(9):1516, 2003.
- [47] R Göldner, E Maul, and D Wagner. An equipment for the on-line determination of the fluorine, silicon and barium content of fluorspar and baryte ores. *Journal of radioanalytical and nuclear chemistry*, 174(1):35–42, 1993.
- [48] VP Guinn. Past, present, future of neutron activation analysis. *Journal of radioanalytical and nuclear chemistry*, 160(1):9–19, 1992.
- [49] VP Guinn and CD Wagner. Instrumental neutron activation analysis. *Analytical Chemistry*, 32(3):317–323, 1960.
- [50] W Haerdi, P Voldet, and D Monnier. On the possibilities of the nondestructive determination of fluorine by neutron activation and gamma spectrometry of ^{20}F or ^{16}N (half lives 10.7 and 7.35 sec respectively). Comparative study. Application to criolite. *Helvetica Chimica Acta (Switzerland)*, 48, 1965.
- [51] CC Hayward, G Oldham, and AR Ware. 14 MeV Neutron Activation Analysis applied to a non-aqueous flowing system. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, 7(2):341–346, 1971.
- [52] Torsten Hothorn, Frank Bretz, and Peter Westfall. Simultaneous inference in general parametric models. *Biometrical Journal*, 50(3):346–363, 2008.
- [53] Xiaolin Hou. Cyclic activation analysis. *Encyclopedia of Analytical Chemistry*, 2000.
- [54] Ethan L Hull, Richard H Pehl, Michelle R Stanley, Charles C Foster, Kevin Komisarck, Gary W East, John D Vanderwerp, and Dennis L Friesel. A ^{16}N gamma-ray facility. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 385(3):489–491, 1997.
- [55] P Ila. Determination of total oxygen in standard rocks by cyclic activation analysis using a 14 MeV neutron generator. *Journal of radioanalytical and nuclear chemistry*, 148(2):415–422, 1991.

- [56] SS Ismail, F Grass, and GP Westphal. A new highly efficient set-up for cyclic and pseudocyclic short time activation analysis with high count rates. *Journal of radioanalytical and nuclear chemistry*, 233(1):149–153, 1998.
- [57] Reza Izadi Najafabadi and Seyyed Hashem Miri Hakimabad. The effect of detector dimensions on the NaI (TI) detector response function. *Journal of Applied Sciences*, 19, 2009.
- [58] JW Jacobs, RL Korotev, DP Blanchard, and LA Haskin. A well-tested procedure for instrumental neutron activation analysis of silicate rocks and minerals. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, 40(1):93–114, 1977.
- [59] PG Jeffery and JM Bakes. The determination of fluorine in fluorite ores and concentrates by isotope-source fast-neutron activation analysis. *Analyst*, 92(1092):151–155, 1967.
- [60] PG Jeffery and D Williams. The determination of fluorine in deposit-gauge samples. *Analyst*, 86(1026):590–597, 1961.
- [61] Yoshimi Kasugai, Hiroshi Yamamoto, Kiyoshi Kawade, and Toshiyuki Iida. Measurement of (n, p) cross-sections for short-lived products by 13.4–14.9 MeV neutrons. *Annals of Nuclear Energy*, 25(1):23–45, 1998.
- [62] G Kennedy and S Hobeika. Pseudocyclic activation analysis of geological material. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, 151(1):47–53, 1991.
- [63] SE Kesler, JC Van Loon, and JH Bateson. Analysis of fluoride in rocks and an application to exploration. *Journal of Geochemical Exploration*, 2(1):11–17, 1973.
- [64] I Khamis, I Othman, M Nasri, and M Bakkour. Transfer time optimization of a rapid cyclic instrumental neutron activation analysis for trace element detection. *Review of Scientific Instruments*, 72(2):1492–1494, 2001.
- [65] R Khelifi, Z Idiri, and S Tobbeche. Simulation and optimization of cyclic activation analysis of short-lived isotopes with 14 MeV neutron generator. In *Nuclear Analytical Methods in the Life Sciences 1994*, pages 679–686. Springer, 1994.
- [66] R Khelifi, A Tchanchane, and Z Idiri. Gamma ray spectra simulation and optimization in neutron activation analysis. 1996.
- [67] V Kliment and J Tölgyessy. Continuous neutron activation analysis. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, 10(2):273–297, 1972.

- [68] DA Kozhevnikov. Approximate similarity of neutron fields formed by sources with different spectra. *Atomic Energy*, 20(2):197–199, 1966.
- [69] VN Kustov, ON Levitskaya, and VV Ivanenko. Using neutron sources for determining fluorine in mineral concentration processes. *Atomic Energy*, 74(6):492–494, 1993.
- [70] JJ Lauff, ER Champlin, and EP Przybylowicz. Determination of fluorine and of oxygen in the presence of fluorine by selective neutron activation using Californium-252 and a 14 MeV generator. *Analytical Chemistry*, 45(1):52–57, 1973.
- [71] Kristian Hovde Liland, Bjørn-Helge Mevik, and Maintainer Kristian Hovde Liland. Package baseline. 2014.
- [72] AD Majdeddin, V Semkova, R Doczi, Cs M Buczko, and J Csikai. Investigations on (n, α) cross sections in the 14 MeV region. Technical report, International Atomic Energy Agency, Vienna (Austria). International Nuclear Data Committee, 1997.
- [73] Y Maki, T Norjiri, and BA Masilungan. Determination of fluorine by cyclic activation analysis method using $^{241}\text{Am} - \text{Be}$ neutron source. Technical report, Industrial Research Inst. of Kahagawa Prefecture, Yokohama, Japan, 1974.
- [74] Jerry B Marion and Robert M Brugger. Neutron-induced reactions in fluorine. *Physical Review*, 100(1):69, 1955.
- [75] E Maul, D Wagner, and R Göldner. SIACON equipment for the on-line determination of the silicon content of coal. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, 122(2):245–251, 1988.
- [76] W Wayne Meinke and RICHARD E Anderson. Activation analysis using low level neutron sources. *Analytical Chemistry*, 25(5):778–783, 1953.
- [77] VI Melent'ev, VV Oveckhin, and VS Rudenko. Neutron activation determination of the content of oxygen and fluorine in samples of zirconium and tantalum. *Atomic Energy*, 34(1):45–46, 1973.
- [78] Ricardo Franklin Mergarejo. Optimización de una instalación para el análisis por activación neutrónica.
- [79] JW Morgan and WD Ehmann. Precise determination of oxygen and silicon in chondritic meteorites by 14 MeV neutron activation with a single transfer system. *Analytica Chimica Acta*, 49(2):287–299, 1970.

- [80] Brij M Moudgil, SL Zhu, JL Pinault, and Bureau de Recherches Geologiques et Minieres. On-line analysis of phosphate rock slurry by prompt neutron activation technique. *Emerging Computer Techniques for the Minerals Industry*, page 251, 1993.
- [81] NB Narzykulov. Practical utilization of neutron activation analysis. *Atomic Energy*, 24(1):127–128, 1968.
- [82] SEB Nonie, K Randle, and AG Blackband. Development of a computer-based system for fast neutron cyclic activation analysis. *Journal of radioanalytical and nuclear chemistry*, 167(1):89–95, 1993.
- [83] NUDAT. National Nuclear Data Center. www.nndc.bnl.gov/nudat2/.
- [84] AZ Ortaovali, F Özek, I Celenk, and NM Spyrou. Studies on some problems and applications of cyclic activation analysis. *Journal of Radioanalytical Chemistry*, 61(1-2):175–182, 1981.
- [85] E Orvini and M Speziali. Applicability and limits of instrumental neutron activation analysis: state of the art in the year 2000. *Microchemical journal*, 59(1):160–172, 1998.
- [86] NN Papadopoulos, GE Hatzakis, AC Salevris, and NF Tsagas. Optimized automated activation analysis. *Journal of radioanalytical and nuclear chemistry*, 215(1):103–110, 1997.
- [87] SJ Parry, R Benzing, KL Bolstad, and E Steinnes. Epithermal/fast neutron cyclic activation analysis for the determination of fluorine in environmental and industrial materials. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, 244(1):67–72, 2000.
- [88] Susan J Parry. *Activation spectrometry in chemical analysis*, volume 119. Wiley-Interscience, 1991.
- [89] IN Plaksin, VN Smirnov, and LP Starchik. Use of the (α , n) reaction for the quantitative determination of the beryllium, boron and fluorine content of concentration products. *The Soviet Journal of Atomic Energy*, 9(5):899–903, 1961.
- [90] VI Prokopchik. Optimal conditions for neutron activation analysis for continuous determination of fluorite in a current of slurry. *Atomic Energy*, 29(1):737–738, 1970.
- [91] VI Prokopchik, AP Bushkov, and KG Bernadskii. Use of neutron activation analysis for determining fluorite content in mining trolleys. *Atomic Energy*, 27(2):883–885, 1969.

- [92] VI Prokopchik and TI Subbotina. Fluorite activation analysis assay in ore samples and in ore beneficiation products. *Atomic Energy*, 21(5):1108–1109, 1966.
- [93] Erhard Rahm and Hong Hai Do. Data cleaning: Problems and current approaches. *IEEE Data Eng. Bull.*, 23(4):3–13, 2000.
- [94] K Randle. Determination of fluorine in geological samples using accelerator derived neutrons. *Journal of radioanalytical and nuclear chemistry*, 90(2):355–361, 1985.
- [95] MA Rey Ronco. *Desarrollo de un método rápido basado en técnicas de activación neutrónica para la determinación del contenido en flúor de muestras de mineral de fluorita*. PhD thesis, Doctoral thesis, Universidad de Oviedo. <http://www.tesisenred.net/handle/10803/11110>. Accessed, 2007.
- [96] MA Rey Ronco, T Alonso-Sánchez, and María Pilar Castro-García. Mathematical study to improve the sensitivity in the neutron activation analysis of fluorspar. *Journal of mathematical chemistry*, 48(1):165–174, 2010.
- [97] MA Rey Ronco, T Alonso-Sánchez, and María Pilar Castro-García. Production of ^{16}N and obtaining of its gamma spectrum in order to calibrate detectors or determination of fluorine in geological specimens. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 268(17):2766–2772, 2010.
- [98] MA Rey Ronco, T Alonso-Sánchez, and María Pilar Castro-García. Neutron activation of deferred gamma rays: steps to determine the usefulness of this technique in analyzing elements of a mineral sample. In *Journal of Physics: Conference Series*, volume 325, page 012025. IOP Publishing, 2011.
- [99] MA Rey Ronco, T Alonso-Sánchez, and María Pilar Castro-García. A neutron activation technique based on deferred gamma rays applied to the quantification of fluorine in fluorspar mining samples. In *Journal of Physics: Conference Series*, volume 325, page 012021. IOP Publishing, 2011.
- [100] MA Rey Ronco, T Alonso-Sánchez, and María Pilar Castro-García. Modeling of neutron activation process with Americium Beryllium source. application to the activation of fluorspar samples. *Journal of Mathematical Chemistry*, 50(2):325–334, 2012.
- [101] MA Rey Ronco et al. Device and software used to carry out cyclic neutron activation analysis. In *Journal of Physics: Conference Series*, volume 549, page 012006. IOP Publishing, 2014.

- [102] MA Rey Ronco et al. New models for carrying out cyclic neutron activation. discussion of the theoretical response. In *Journal of Physics: Conference Series*, volume 549, page 012007. IOP Publishing, 2014.
- [103] T Alonso Sánchez, MA Rey Ronco, and MP Castro García. A neutron activation technique for the analysis for fluorine in fluorspar samples. *International Journal of Mineral Processing*, 94(1):1–13, 2010.
- [104] Alejandro A Sonzogni, TW Burrows, B Pritychenko, JK Tuli, and DF Winchell. Nuclear structure and radioactive decay resources at the US National Nuclear Data Center. In *International Conference on Nuclear Data for Science and Technology*, pages 101–103. EDP Sciences, 2007.
- [105] NM Spyrou. Cyclic activation analysis – A review. *Journal of Radioanalytical Chemistry*, 61(1-2):211–242, 1981.
- [106] NM Spyrou, Ch Adesanmi, M Kidd, LG Stephens-Newsham, AZ Ortaoval, and F Ozek. Usefulness of thermal and epithermal cyclic activation analysis with a reactor system. *Journal of Radioanalytical Chemistry*, 72(1-2):155–182, 1982.
- [107] NM Spyrou and SA Kerr. Cyclic activation: the measurement of short-lived isotopes in the analysis of biological and environmental samples. *Journal of Radioanalytical Chemistry*, 48(1-2):169–183, 1979.
- [108] NM Spyrou and IP Matthews. A cyclic neutron activation system using an isotopic neutron source for the measurement of short-lived isotopes. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, 61(1):195–209, 1981.
- [109] Antoine Stevens and Leonardo Ramirez-Lopez. An introduction to the prospectr package. 2014.
- [110] R Core Team. R: A language and environment for statistical computing. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria, 2012, 2012.
- [111] R Van Grieken, R Gijbels, A Speecke, and J Hoste. The determination of silicon in steel by 14 MeV neutron activation analysis. *Analytica Chimica Acta*, 43:199–209, 1968.
- [112] Jesús Vigo-Aguiar and Juan LG Guirao. Advances in computational and mathematical chemistry. *Journal of Mathematical Chemistry*, 50(2):311–312, 2012.
- [113] HA Vincent and A Volborth. High precision determination of silicon in rocks by fast-neutron activation analysis. *Nuclear Technology*, 3(12):753–757, 1967.

- [114] JC Vitorelli, AX Silva, VR Crispim, ES Da Fonseca, and WW Pereira. Monte Carlo simulation of response function for a NaI(Tl) detector for gamma rays from $^{241}\text{Am}/\text{Be}$ source. *Applied radiation and isotopes*, 62(4):619–622, 2005.
- [115] James R Vogt and William D Ehmann. Silicon abundances in stony meteorites by fast neutron activation analysis. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 29(5):373–383, 1965.
- [116] Hadley Wickham. *ggplot2: elegant graphics for data analysis*. Springer Science & Business Media, 2009.
- [117] Hadley Wickham. A layered grammar of graphics. *Journal of Computational and Graphical Statistics*, 19(1):3–28, 2010.
- [118] Hadley Wickham. Tidy data. *Under review*, 2014.
- [119] Hadley Wickham et al. Reshaping data with the reshape package. *Journal of Statistical Software*, 21(12):1–20, 2007.
- [120] Hadley Wickham et al. The split-apply-combine strategy for data analysis. *Journal of Statistical Software*, 40(1):1–29, 2011.
- [121] Hadley Wickham and R Francois. dplyr: A grammar of data manipulation. URL <http://CRAN.R-project.org/package=dplyr>. *R package version 0.2*, 2014.
- [122] Leland Wilkinson, D Wills, D Rope, A Norton, and R Dubbs. *The grammar of graphics*. Springer Science & Business Media, 2006.
- [123] David Tin Win. Neutron activation analysis (NAA). *AU J Technol*, 8(1):8–14, 2004.
- [124] J Wing and MA Wahlgren. Fluorine analysis by activation with an isotopic fast-neutron source and counting ^{16}N . *Journal of Radioanalytical Chemistry*, 3(1-2):37–42, 1969.