Eliminação de ruído AWGN de sinais de espectrômetros de EPR por Transformada Discreta de Fourier, com aplicação em dosimetria das radiações

Fábio Pelicano B. Vieira, Joyce S. Bevilacqua

USP – IME – Depto de Matemática Aplicada 05508-090, São Paulo, SP E-mail: fpbvieira@gmail.com, joyce.bevilacqua@gmail.com

Orlando Rodrigues Jr.

IPEN – Gerência de Metrologia das Radiações 05508-000, São Paulo, SP E-mail: <u>rodrijr@ipen.br</u>

RESUMO

Introdução e objetivo

Radiações ionizantes produzem, em certas substâncias, uma quantidade de centros paramagnéticos proporcional à dose absorvida [3]. Tal quantidade pode ser obtida por espectrometria de Ressonância Paramagnética Eletrônica (*Electron Paramagnétic Ressonance –* EPR) [5], sendo a técnica de interesse para a área de dosimetria das radiações.

Os espectrômetros produzem espectros brutos compostos de uma assinatura do material, relacionada à presença dos centros paramagnéticos, e de ruído, que advém de fontes diversas, como a eletrônica do equipamento e acoplamento do sistema formado por cavidade, tubo e amostra, e que pode ser eliminado por pós-processamento matemático. Neste trabalho, será desenvolvido um algoritmo para identificar automaticamente a frequência de corte e eliminar o ruído de alta frequência de sinais de EPR. Aplica-se um filtro passa-baixa na Transformada Discreta de Fourier (TDF) [1] do sinal amostrado, que em seguida é reconstruído por Transformada Inversa Discreta de Fourier (TIDF) [1]. O algoritmo será testado em sinais simulados com base em modelo teórico e em sinais experimentais obtidos com um espectrômetro Bruker modelo EMX operando na banda X.

Modelagem matemática e algoritmo

O espectro bruto é dado por

$$S(t) = w(t) + r(t), \tag{1}$$

em que w(t) representa a assinatura do material e r(t), o ruído. A Figura 1 ilustra todo o processo sobre um sinal simulado, que foi gerado considerando-se que w tem a forma de derivada de Gaussiana,

$$w(t) = \left(a \cdot e^{-\frac{(t-b)^2}{2c^2}}\right)' = -\frac{a(t-b)}{c^2} e^{-\frac{(t-b)^2}{2c^2}},$$
(2)

sendo *a*, *b*, $c \in \mathbb{R}$, com $a \cdot c \neq 0$.



Figura 1: esquema do algoritmo

Considerou-se que o ruído r é aditivo, com média nula e distribúido normalmente, com desvio-padrão $\frac{H}{4}$ e amplitude H. A diferença entre o máximo e o mínimo de w, que será denotada por A e denominada amplitude do sinal objetivo, é diretamente proporcional à dose absorvida, sendo, portanto, a variável de interesse para a área de dosimetria das radiações. O algoritmo obtém, a partir de S, uma estimativa \tilde{A} de A tal que o erro relativo seja de até 0,5%. A sequência de passos executados pelo algoritmo é:

- 1. Calcula $\hat{S}(\lambda)$ (Figura 1.b)
- 2. Calcula $\lambda_{max,S}$
- 3. Calcula $\lambda_{calc} = 3,5716 \cdot \lambda_{max,S}$ (resultado obtido teoricamente)
- 4. Exclui as frequências acima de λ_{calc} em \hat{S} (Figura 1.c)
- 5. Calcula a TIDF de \hat{S}
- 6. O sinal reconstruído $S_{reconstr}$ é a parte real da TIDF de \hat{S} (Figura 1.d)

Resultados e conclusão

Considerando-se $a = c\sqrt{e}$ e b = 0,5, simulações foram feitas para valores de *c* no intervalo [0,01;0,1] e amplitudes do ruído *H* no intervalo [0,02;0,4]. Para sinais simulados, os resultados foram muito bons. O erro relativo médio entre *A* e \tilde{A} , para 30 execuções do algoritmo, foi inferior a 0,5% para *c* em [0,04;0,1] e *H* em [0,02;0,1]. Como esperado, valores de *c* no intervalo [0,001;0,03] produzem erros relativos médios superiores a 0,5%.

Sinais experimentais produzidos pelo espectrômetro [5] a partir de uma amostra de hidroxiapatita natural irradiada, como mostra a Figura 2.a, com medidas efetuadas à temperatura ambiente, foram submetidos ao algoritmo. Nesses casos, a presença da linha de base, em geral uma componente do espectro que apresenta um período longo [2], compromete a estimativa de λ_{max} e faz com que λ_{calc} (Figura 2.b) seja inferior a λ_{ideal} . Com a intervenção do usuário na estimação de λ_{max} , por simples semelhança visual com uma TDF como a exibida na Figura 1.b, o ruído de alta frequência é adequadamente eliminado, como mostra a Figura 2.c, em que S_{oper} é o sinal reconstruído com a intervenção.

Conclui-se que o método é adequado para eliminar o ruído de alta frequência desde que não haja, simultaneamente, a linha de base. Isso motivou estudos adicionais sobre a remoção de rúido, em particular a linha de base [4], os quais estão em andamento.



Figura 2: algoritmo aplicado sobre o espectro bruto da hidroxiapatita natural irradiada

Referências

- [1] Damelin, S. B., Miller Jr., W., "The Mathematics of Signal Processing", Cambridge University Press, Cambridge, 2012.
- [2] Banwell, C. N., McCash, E. M., Fundamentals of Molecular Spectroscopy, McGraw-Hill, Berkshire, 1994
- [3] Desrosiers, M., Schauer, D.A., Electron paramagnetic resonance (EPR) biodosimetry, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, vol. 184, pp. 219-228, (2001).
- [4] Galloway, C. M., Le Ru, E. C., Etchegoin, P.G., An Iterative Algorithm for Background Removal in Spectroscopy by Wavelet Transforms, Applied Spectroscopy, Society for Applied Spectroscopy, vol. 63, núm. 12, pp 1370 – 1376, (2009).
- [5] Weil, J. A., "Electron paramagnetic resonance: elementary theory and practical applications", John Wiley & Sons, Hoboken, 2007.