



بیست و یکمین کنفرانس هسته ای ایران

۶ و ۷ اسفند ماه ۱۳۹۳ دانشگاه اصفهان

پیاده سازی و مقایسه ی الگوریتم هموار سازی برای تحلیل طیف گاما در آنالیز مواد

رضا قلی پور پیوندی^۱، سجاد رحمن زاده توت کله^۱، سیده زهرا اسلامی راد^۲، مجتبی عسکری له داربنی^{۱*}

۱- سازمان انرژی اتمی، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای

۲- دانشگاه قم، دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک

چکیده:

استفاده از خاصیت طیف سنجی گامای تاخیری و آنی در روش فعال سازی نوترونی مواد مختلف سبب شده است تا بتوان به کمک راهکارهایی برخاسته از دانش نوین مواد رادیواکتیو، عناصر موجود در یک نمونه ی مشخص را براساس آنالیز طیف مواد در صنایع مختلف مورد سنجش قرار داد. با توجه به نزدیکی قله های مواد تشکیل دهنده در طیف سنجی مواد، استفاده از روش تعیین پنجره و شمارش کانت زیر آن خطای زیاد را ایجاد می نماید. برای همین منظور در این مقاله الگوریتمی توسعه داده می شود که در آن می توان درصد عناصر تشکیل دهنده مواد معدنی را با دقت بسیار بالایی محاسبه نمود. نتایج بدست آمده در این مقاله با روش شمارش مستقیم پنجره ها مقایسه و بهبود بیش از ۱۰۰٪ را نشان می دهد.

کلید واژه: طیف سنجی گاما - شمارش پیک - روش هموار سازی - کمترین مربع خطا

۱. مقدمه

استفاده از خاصیت طیف سنجی مواد سبب شده است تا امکان شناسایی عناصر تشکیل دهنده ی مواد مختلف مورد توجه قرار گیرد. در همین راستا روش ^۱PGNAA در بسیاری از صنایع برای پرتوزایی عناصر تشکیل دهنده ی مواد کاربرد دارد. در این روش ابتدا ماده ی نمونه به وسیله ی گسیل نوترون Cf-252 مورد تابش قرار می گیرد. این عمل سبب می شود تا عناصر موجود در نمونه از خود پرتوهای گامای آنی گسیل نمایند. سپس این پرتوها توسط آشکارسازهای پرتوی گاما دریافت می شود و طیف های دریافتی از طریق یک تحلیل گر چند کاناله مورد پردازش قرار می گیرد [3], [2], [1]. یکی از صنایعی که در آن تکنیک PGNAA برای شناسایی عناصر موجود در نمونه به کار می رود، صنایع تولید سیمان می باشد. استفاده از قابلیت آنالیز بودن روش PGNAA سبب شده است که این روش نسبت به روش های XRF و XRD که آنالیز عناصر مواد را به صورت غیر آنالیز و به صورت نمونه گیری انجام می دهند، برتری داشته باشد. یکی از روش هایی که در این زمینه توسعه داده شده است، تعیین پنجره های انرژی و شمارش مجموع کانت ها در این پنجره ها می باشد. آقای فولدیک [4] در کتاب خود به بررسی روش های تعیین درصد عناصر می پردازد و بیان می کند که در طیف هایی که قله های عناصر به یکدیگر نزدیک است، روش

^۱Prompt Gamma Neutron Activation Analysis



بیست و یکمین کنفرانس هشتای ایران

۶ و ۷ اسفند ماه ۱۳۹۳ دانشگاه اصفهان

پنجره از کارایی قابل قبولی برخوردار نیست. در این مقاله الگوریتمی پیاده سازی شده است که در آن بدون در نظر گرفتن نزدیکی یا عدم نزدیکی قله‌های طیف‌های عناصر مختلف، روشی مبنی بر کمترین خطا را در شناسایی عناصر تشکیل دهنده ماده اولیه توسعه می‌دهد.

۲. روش کار

در الگوریتم ارائه شده در این مقاله، سعی شده است تا براساس کمترین مربع خطا بهترین پارامترها برای تعیین درصد عناصر توسعه یابد. در واقع اساس الگوریتم بر این اساس استوار است که طیف نهایی دریافتی از ماده‌ی اولیه‌ی مجهول باید از ترکیبی از طیف عناصر موجود در آن تشکیل شده باشد. بنابراین باید درصد هر یک از نمونه‌های استاندارد به گونه‌ای محاسبه‌گردد که طیف نهایی کمترین خطا را از ترکیب خطی آنها داشته‌باشد. همانطور که در شکل ۱ مشخص است پس از دریافت طیف نمونه‌های استاندارد به کمک الگوریتم زیر می‌توان درصد عناصر را به دقت قابل قبولی بدست آورد. برای بیان الگوریتم ابتدا پارامترها و متغیرها به صورت زیر تعریف می‌شود.



شکل ۱. فرآیند تعیین درصد عناصر تشکیل دهنده

ρ_{ij} میزان درصد عنصر i در نمونه‌ی استاندارد $(j=1, \dots, J)$ $(i=1, \dots, I)$

X_j طیف دریافتی از نمونه‌ی استاندارد j $(j=1, \dots, J)$

a_i میزان درصد طیف X_j در طیف ماده‌ی مجهول $(i=1, \dots, I)$

Y طیف دریافتی از ماده‌ی اولیه‌ی مجهول

برای مثال فرض کنید که تعداد کانال‌ها ۱۰۲۴ عدد انتخاب شده باشد، بنابراین کمترین خطای مربعات به صورت زیر تعریف می‌گردد.

که در آن Y_i میزان کانت نمونه‌ی مجهول در کانال i و X_{ji} میزان کانت نمونه‌ی استاندارد j در کانال i می‌باشد. در معادله‌ی بالا مقدار a_j ها باید به گونه‌ای محاسبه‌گردد که مقدار مربع خطای اندازه‌گیری شده، کمینه‌گردد [5].



بیست و یکمین کنفرانس هشتای ایران

۷ و ۶ اسفند ماه ۱۳۹۳ دانشگاه اصفهان

بنابراین باید نسبت به پارامترهای a_j مشتق جزئی گرفته و آنها را مساوی صفر قرار دهیم.

بنابراین پس از مشتق جزئی نسبت به متغیرهای a_j ، معادله‌ی زیر که یک عبارت n معادله، n مجهول می‌باشد، بدست می‌آید.

پس از حل این معادله، متغیرهای a_j محاسبه می‌گردند. سپس درصد نهایی هر یک از I عنصر طبق معادله‌ی زیر قابل محاسبه خواهد بود.

۳. نتایج

در این آزمایش جهت تست و ارزیابی ابتدا الگوریتم هموارسازی که در ادامه به آن اشاره خواهد شد در محیط نرم برنامه نویسی C# پیاده سازی می‌گردد. برای این منظور ۴ رادیوایزوتوپ ^{137}Cs ، ^{60}Co ، ^{192}Ir و ^{235}U به عنوان نمونه‌های استاندارد کالیبره انتخاب شدند. ^{137}Cs دارای پیک شاخص 662keV با فراوانی ۹۰ درصد، ^{60}Co دارای دو پیک شاخص 1173keV و 1332keV با فراوانی ۱۰۰ درصد، ^{192}Ir با توجه به رزولوشن ۷ در صدی دتکتور $^{3''}\times^{3''}\text{BGO}$ انتخاب شده دارای سه پیک شاخص میانگیری شده 305keV با فراوانی ۱۴۵ درصد، 472keV با فراوانی ۷۰ درصد و 610keV با فراوانی ۲۰ درصد می‌باشند [6]. علت انتخاب اورانیوم طبیعی به عنوان رادیونوکلئید چهارم پیچیدگی، تنوع و گستره انواع طیف‌های گامای ناشی از دختران در حال تعادل با آن می‌باشد. این رادیوایزوتوپها در ابتدا بصورت تک تک در فاصله مشخص و موقعیت معلوم وثابتی نسبت به دتکتور قرار گرفته می‌شوند و در مدت زمان مشخص و یکسانی نسبت به سایرین قرائت و طیف حاصله ذخیره می‌گردد. در انتها پس از کالیبره شدن، هر چهار رادیوایزوتوپ همزمان و تواما در موقعیتهای اولیه خود قرار می‌گیرند و طیف حاصل ذخیره می‌گردد. علت این انتخاب این است که چون هر چهار ایزوتوپ چه در مرحله کالیبراسیون و چه در مرحله اندازه گیری تجمعی در یک موقعیت بوده اند لذا باید مقدار اعلام شده از هر نمونه در حالت ترکیبی ۱ باشد. بنابراین طبق تئوری باید حتی در روش شمارش خالص درون پنجره برای هر پیک شاخص چه در حالت کالیبره و چه در حالت تجمعی یکسان باشد که عملاً بعلت پراکندگی و پس پراکندگی فوتونها دستیابی به این نتیجه مقدور نیست.



بیست و یکمین کنفرانس هشتای ایران

۷ و ۶ اسفند ماه ۱۳۹۳ دانشگاه اصفهان

در آزمایش انجام شده، نتایج حاصله از این الگوریتم با روش تعیین پنجره و محاسبه‌ی کانت سطح زیر آن مقایسه می‌گردد. محاسبه شمارش خالص سطح زیر پیک بر اساس روابط [7] و نرم افزارهای پرکاربرد APTEC و Maestro و... به گونه ای است که اثرات پراکندگی فوتونهای ناشی از انرژیهای دیگر را لحاظ نمی کند و به عبارتی شمارش سطح زیر پیک را بدون لحاظ زمینه زیر پنجره انتخابی می شمارد. طبیعتاً چون مکان نمونه‌ها نسبت به حالت کالیبراسیون تغییر نکرده‌اند، پس طیف نهایی از نسبت مساوی از طیف‌های کالیبراسیون تشکیل می‌شود یعنی انتظار داریم:

$$Y \cong (X_1 + X_2 + X_3 + X_4)$$

که در آن X_1, X_2, X_3 و X_4 به ترتیب طیف‌های مربوط به ^{60}Co ، ^{137}Cs ، ^{192}Ir و ^{235}U می‌باشد. در جدول ۱ نتایج حاصله از روش پنجره نشان داده شده است.

همزمان همین آزمایش بوسیله‌ی الگوریتم پیاده سازی شده مورد بررسی قرار گرفت و تابع خطی زیر بدست آمد.

$$Y = (0.976 \times X_1 + 0.992 \times X_2 + 0.892 \times X_3 + 1.14 \times X_4)$$

در معادله‌ی بالا مقدار $a_1 = 0.976$ ، $a_2 = 0.992$ ، $a_3 = 0.892$ و $a_4 = 1.14$ تخمین زده شد که براساس روش کمترین خطای مربعات بدست آمد. برای مقایسه دو روش مجموع مربع خطای اندازه‌گیری شده‌ی آنها را با یکدیگر مقایسه می‌کنیم.

مجموع مربع خطای اندازه‌گیری شده در روش تعیین پنجره $SSE(1)$ و روش الگوریتم پیاده سازی شده $SSE(2)$ به صورت زیر است:

جدول ۱. نتایج آزمایش‌ها نشان می‌دهد که روش پنجره

درصد مواد در روش هموارسازی ^۱	نسبت شمارش ها در دو حالت ^۱	شمارش خالص سطح زیر پیک در حالت ترکیبی	شمارش خالص سطح زیر پیک در حالت انفرادی	رادیویزوتوپ
۰.۹۷۶	۱.۲۷۲	۳۱۸۷۵	۴۰۵۶۳	^{60}Co
۰.۹۹۲	۱.۰۶۵	۱۲۲۷۸	۱۳۰۸۶	^{137}Cs
۰.۸۹۲	۰.۷۲۷۳	۶۹۸۴	۵۰۷۹	^{192}Ir

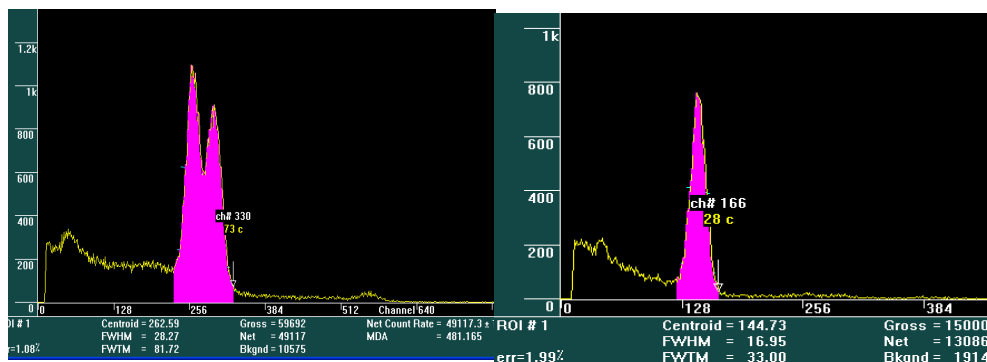


بیست و یکمین کنفرانس هشتای ایران

۶ و ۷ اسفند ماه ۱۳۹۳ دانشگاه اصفهان

۱.۱۴	۰.۸۳۹۷	۱۱۶۳۱	۹۷۶۷	U-Nat
------	--------	-------	------	-------

۱- این عدد از لحاظ تئوری و با توجه به شرایط آزمایش باید یک باشد. همانطور که مشاهده می‌گردد روش توسعه شده در این مقاله نسبت به روش پنجره از جواب‌های دقیقتری برخوردار بوده و در شرایطی که قله‌های طیف‌های نمونه‌های استاندارد نزدیک باشند از کارایی روش کاسته نمی‌شود. در شکل ۲ نتایج حاصله از آزمایش نشان داده می‌شود.

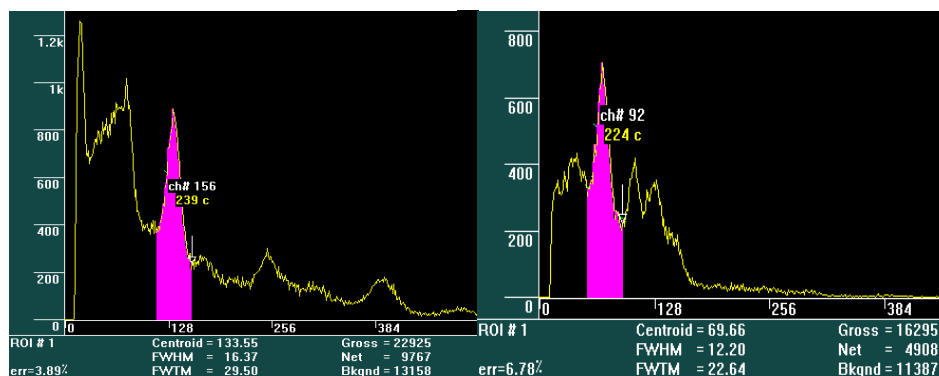


شکل ۲- ب. نمایش پنجره و طیف Co-60 در زمان کالیبراسیون

شکل ۲- الف. نمایش پنجره و طیف Cs-137 در زمان کالیبراسیون

شکل ۲- د. نمایش پنجره و طیف U-Nat در زمان کالیبراسیون

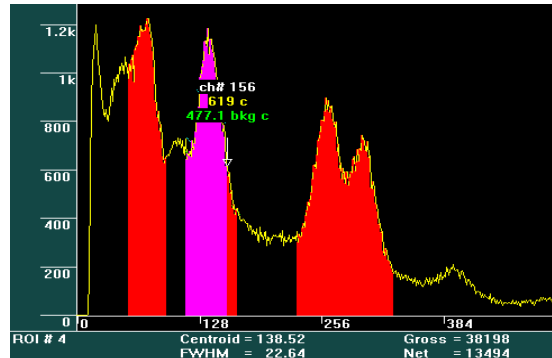
شکل ۲- ج. نمایش پنجره و طیف Ir-192 در زمان کالیبراسیون



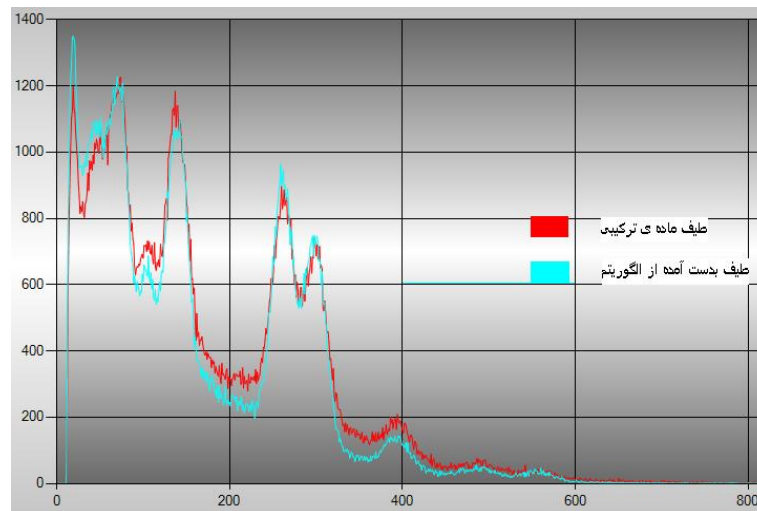


بیست و یکمین کنفرانس هشتای ایران

۶ و ۷ اسفند ماه ۱۳۹۳ دانشگاه اصفهان



شکل ۲-۵. نمایش پنجره‌ها و طیف ترکیبی عناصر



شکل ۲-۵. تخمین طیف ترکیبی عناصر به کمک الگوریتم

۴. بحث و نتیجه گیری

در این مقاله به پیاده سازی و مقایسه روش هموارسازی در مقایسه با روش خواندن شمارش خالص سطح زیر پیک در آنالیز طیفهای گاما اشاره شد. در عمل به علت نزدیکی طیفهای عناصر موجود طیف مانند طیفهای حاصل از گامای آبی مواد اولیه سیمان، روش تعیین پنجره از دقت قابل قبولی برخوردار نیست. بنابراین، در این مقاله الگوریتمی بر اساس کمترین مجموع مربع خطا توسعه داده شد که نتایج نشان داد که این روش حتی در شرایط نزدیکی قلههای طیفهای گاما تشکیل دهنده، درصد عناصر را با دقت بهتری تعیین می کند. قرائت میزان چهار رادیویزوتوپ ثابت در دو حالت کالیبره و ترکیب که قاعدتا باید مقدار ۱ را برای هر رادیویزوتوپ نشان می داد به ترتیب در دو روش پنجره ۰.۱۷۸ و روش هموارسازی ۰.۳۱. خطا را نشان داد که بهبود ۵ برابر را بیان می کند.

۵. مراجع



بیست و یکمین کنفرانس هسته‌ای ایران

۷ و ۸ اسفند ماه ۱۳۹۳ دانشگاه اصفهان

- V.V. Afrosimov, E.L. Berezovskii, I.P. Gladkovskii, A.I. Kislyakov, M.P. Petrov, [1]
V.A. Sadovnikov. Multichannel energy and mass analyzer for atomic
particles. *Sov. Phys. - Tech. Phys. (Engl. Transl.)*. v. 20, no. 1, pp. 33-37. 1975.
- W. Zeng. The Design of Digital Multi-channel Analyzer based on FPGA. *Energy* [2]
Procedia. v. 39, pp. 428-433. 2013.
- M. Kienle, E. Plies. An off-axis multi-channel analyzer for secondary [3]
electrons. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A:
Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*. v. 519, no. 1-2, pp.
325-330. 2004.
- G. Foldiak. Industrial Application of Radioisotopes (Studies in Physical and [4]
Theoretical Chemistry). Elsevier Science Ltd. 564 pages.
- A.V. Eye, C. Schuster. Regression analysis for social sciences (1st ed.). San Diego: [5]
Academic Press. 1998
- R.A. Faires , B.H. Parks. Radioisotope laboratory techniques. *Biochemical* [6]
Education. v. 1, no 3, pp. 58 .1973.
- A Likar^{1,2} and T Vidmar² , A peak-search method based on spectrum [7]
Convolution , *JOURNAL OF PHYSICS D: APPLIED PHYSICS* , 36 1903-1909, 16 July
2003