



تحلیل کمی و کیفی مواد با استفاده از کتابخانه‌ی داده‌های PGNAA و بر اساس دو

روش شبکه عصبی و حداقل مربعات

پرویز، احمدی؛ نیما، قلعه‌آ؛ وحید، دوست‌محمدی^۲

۱- دانشگاه دامغان، دانشکده فیزیک

۲- سازمان انرژی اتمی ایران، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای

چکیده:

در این پژوهش با استفاده از سامانه آشکارسازی گامای آنی فعالسازی نوترونی (PGNAA)، نمونه‌های حاوی مقادیر مختلف NaCl محلول در آب، مورد مطالعه قرار گرفته است. چشمه نوترون مورد استفاده از نوع Am-Be بوده است و پرتوی گامای حاصل با دو آشکارساز از نوع سوسوزن NaI و BGO ثبت شده‌اند. چیدمان آزمایش، چشمه‌ی نوترون و آشکارسازهای بکاررفته با کد مونت‌کارلوی MCNPX شبیه‌سازی شده و طیف‌های حاصل از داده‌های تجربی و شبیه‌سازی به عنوان کتابخانه‌های ورودی دو برنامه مجزا که بر پایه شبکه عصبی و کمترین مربعات نوشته شده در نظر گرفته شده‌اند. درصد بدست آمده از عنصر موردنظر در نمونه‌ی مورد مطالعه و مقادیر واقعی، همخوانی قابل قبولی را نشان می‌دهد.

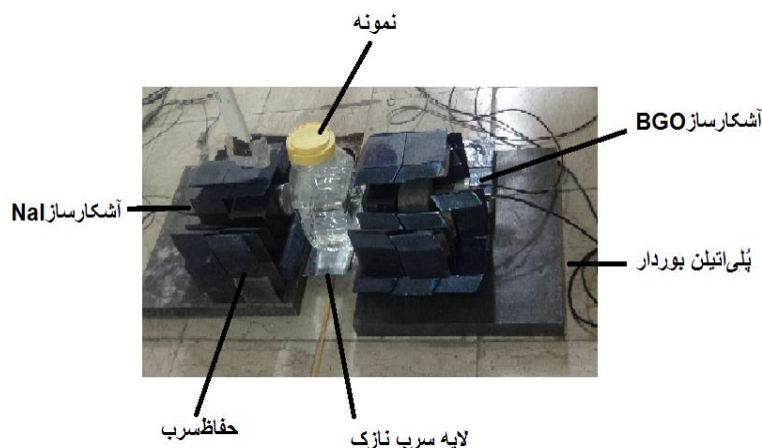
کلمات کلیدی: PGNAA، MCNP، شبکه عصبی، حداقل مربعات

۱. مقدمه

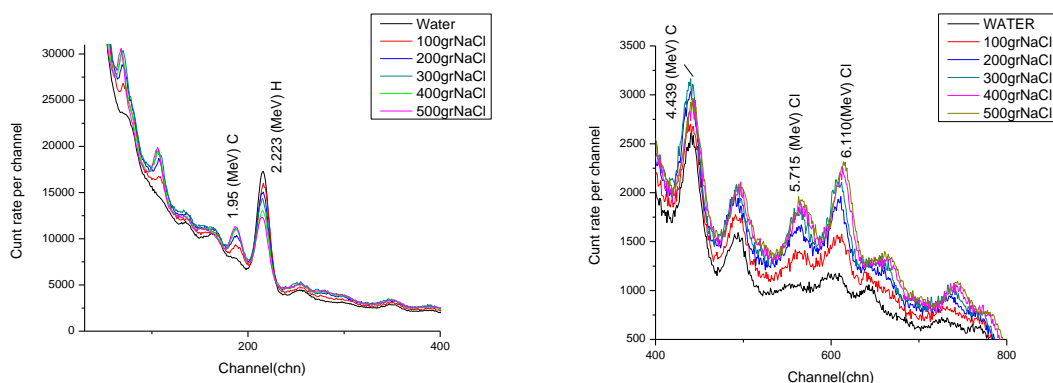
آنالیز به روش NAA روشی کارا در آنالیز انواع نمونه بصورت کمی و کیفی می‌باشد. در این روش، در صورتی که فعالسازی با استفاده از نوترون‌های حرارتی اتفاق بیفتد، نوترون با انرژی خیلی کم به یک هسته برخورد می‌کند و یک هسته مرکب برانگیخته را تشکیل می‌دهد و نهایتاً هسته‌ی برانگیخته به حالت پایه آمده گاما گسیل می‌کند. آشکارسازی گاماها‌ی آنی گسیل شده (PGNAA)، اطلاعات فواصل ترازهای هسته‌ای عناصر تشکیل‌دهنده‌ی نمونه مجهول را در اختیار قرار می‌دهد [۱ و ۲].

در این پژوهش، مطابق هندسه شکل (۱)، از یک چشمه نوترون Am-Be که در کف آزمایشگاه قرار گرفته برای فعالسازی نوترونی استفاده شده است. به منظور حذف گاماها‌ی ۴/۴۳۸ MeV چشمه از یک لایه سرب به ضخامت ۲ میلی‌متر استفاده شده است. همچنین به منظور ممانعت از ورود نوترونهای چشمه به آشکارساز از دو لایه پلی‌اتیلن با ۵ درصد بور و به ابعاد ۵×۵×۵ سانتی‌متر استفاده شده و نهایتاً در حدفصل پلی‌اتیلن بوردار و آشکارساز از یک لایه سرب به ابعاد ۳۰×۳۲×۵ سانتی‌متر قرار گرفته است. مطابق شکل، آشکارساز سوسوزن BGO (با ابعاد ۳ اینچ در ۳ اینچ) در سمت راست و سوسوزن NaI (با ابعاد ۳ اینچ در ۳ اینچ) در سمت چپ نمونه قرار دارد. فضای اطراف هر دو آشکارساز نیز به منظور حذف گاماها‌ی زمینه با دیواره سربی به ضخامت ۵ سانتی‌متر پوشانده شده است. آشکارسازها برای زمان زنده ۱۸۰۰ ثانیه گاماها‌ی آنی نمونه را ثبت می‌کنند. آزمایش برای میزان نمک از ۵۰ گرم تا ۵۰۰ گرم در ۳/۵ لیتر آب، تکرار

می شود و با احتساب نمونه آب خالص، ۵۲ طیف ثبت می شود. طیف های مربوط به آشکارساز BGO برای چند درصد مختلف از نمک محلول در آب در شکل (۲) نشان داده شده است.



شکل (۱): هندسه مورد استفاده در آنالیز محلول NaCl در آب با استفاده از روش PGNAA

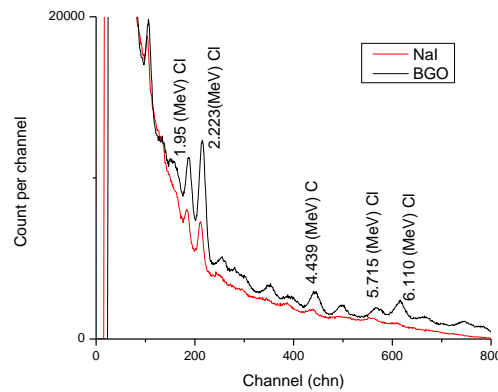


شکل (۲): مقایسه ی طیف اندازه گیری شده آشکارساز BGO برای مقادیر مختلف NaCl محلول در ۳/۵ لیتر آب: چپ: محدوده انرژی ۰ MeV تا ۴ MeV و راست: محدوده انرژی ۴ MeV تا ۸ MeV.

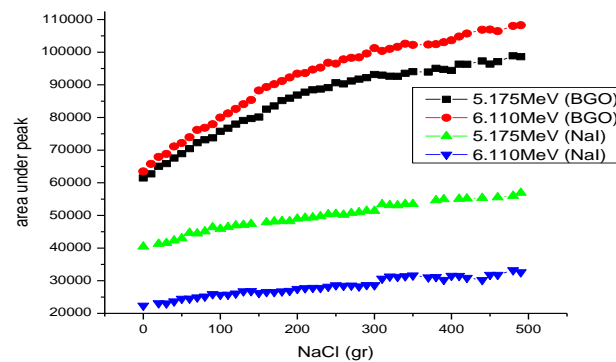
شکل (۳)، طیف های حاصل از ۵۰۰ گرم نمک محلول در ۳/۵ لیتر آب که توسط دو آشکارساز سوسوزن BGO و NaI اندازه گیری شده با هم مقایسه شده اند. چنانچه مشاهده می شود، نمایش قله ها و تفکیک آنها توسط سوسوزن BGO به مراتب بهتر از سوسوزن NaI انجام می شود.

در شکل (۴)، سطح زیر فوتوپیک پرتوی گامای کلر در انرژی های ۶/۱۱۰ MeV و ۵/۷۵۱ MeV به صورت تابعی از مقادیر مختلف NaCl محلول در آب برای دو آشکارساز BGO و NaI نمایش داده شده است. سطح زیر فوتوپیک پرتو گامای مربوط به آشکارساز BGO مقادیر بیشتری را نشان می دهد.

دلیل مشاهده این رفتار را می توان به بهره ی بالای آشکارسازی سوسوزن BGO نسبت به NaI مربوط دانست [۳]. به همین منظور در مطالعات آتی ارائه شده این مقاله صرفاً از سوسوزن BGO استفاده شده است.



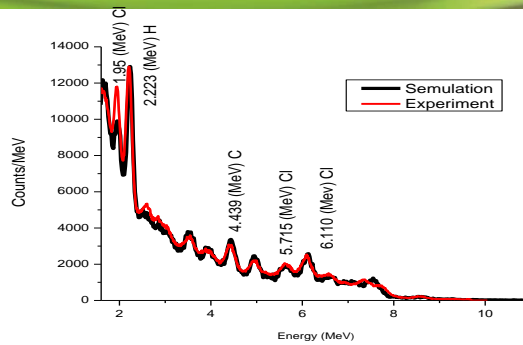
شکل (۳): مقایسه‌ی طیف اندازه‌گیری شده دو آشکارساز BGO و NaI برای نمونه حاوی ۵۰۰ گرم NaCl محلول در ۳/۵ لیتر آب.



شکل (۴): مقایسه سطح زیر فوتوپیک مربوط به گاماهاى کلر با انرژی‌های ۵/۷۱۵ MeV و ۶/۱۱۰ MeV که با استفاده از دو آشکارساز BGO و NaI اندازه‌گیری شده است.

۲. مطالعات شبیه‌سازی

چیدمان اندازه‌گیری شکل (۱) با استفاده از کُد مونت کارلوی MCNPX در وضعیت Mode n p شبیه‌سازی شده و طیف گامای آنی نمونه حاوی ۵۰۰ گرم نمک محلول در آب و ثبت شده در آشکارساز BGO با استفاده از تالی FA محاسبه می‌شود (شکل (۵)). علت اختلاف بین طیف شبیه‌سازی و تجربی را می‌توان به گامای چشمه نوترون Am-Be و نیز گاماهاى زمینه و نوفه الکترونیک نسبت داد. عدم اطلاع کافی از عناصر و درصد بکاررفته در اجزاء چیدمان آزمایش (مانند سیمان کف و پلی اتیلن بکار رفته) نیز می‌تواند منشاء دیگری برای اختلاف باشد.



شکل (۵): مقایسه طیف تجربی و شبیه‌سازی آشکارساز BGO برای نمونه حاوی ۵۰۰ گرم نمک در آب.

۳. تعیین درصد نمک در نمونه

۳.۱. روش شبکه عصبی

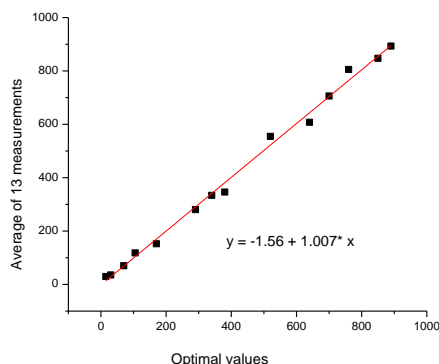
با این فرض که طیف بدست آمده از مطالعه شبیه‌سازی بخش قبل، رفتار سامانه آنالیز به روش PGNAA را بدرستی شبیه‌سازی می‌کند، می‌توان طیفهای متعددی مربوط به مقادیر مختلف نمک محلول در آب را تهیه و به عنوان داده‌های کتابخانه‌ای در محاسبات شبکه عصبی و در بخش آموزش آن استفاده کرد [۴]. به همین منظور از ۱۰۲ طیف (حاصل از شبیه‌سازی MCNPX پاسخ آشکارساز BGO) استفاده می‌شود که ۸۶ عدد از این طیف‌ها برای آموزش شبکه و ۱۴ طیف دیگر برای کنترل پاسخ‌های شبکه در نظر گرفته می‌شود.

سپس با استفاده از سیستم شبکه عصبی که در نرم‌افزار MATLAB تعبیه شده است [۵]، مقدار مجهول از NaCl با استفاده از یک شبکه چند لایه (که شامل یک لایه ورودی، یک لایه پنهان و یک لایه خروجی است) بدست می‌آید. همچنین از تابع آموزش traingdx برای آموزش شبکه استفاده شده و در لایه پنهان نیز از تابع انتقال tansig استفاده می‌شود. در لایه خروجی از تابع انتقال خطی یا Purelin استفاده شده است. ورودی شامل ۱۰۲۴ نورون (در یک ورودی متناظر با طیف در هر انرژی یا کانال)، لایه پنهان از ۱۵ نورون و همچنین در لایه خروجی از یک نورون استفاده شده است. نمودار مقادیر میانگین بدست آمده از خروجی‌های شبکه عصبی بر حسب خروجی مطلوب و انتظاری در شکل (۶) نمایش داده شده است. چنانچه ملاحظه می‌شود، یک رفتار خطی بین مقادیر میانگین بدست آمده از شبکه عصبی و مقادیر انتظاری دیده می‌شود. محورها، مقادیر نمک محلول در آب را برای دو وضعیت انتظاری و بدست آمده از شبکه عصبی را نشان می‌دهند.

۳.۲. روش کمترین مربعات

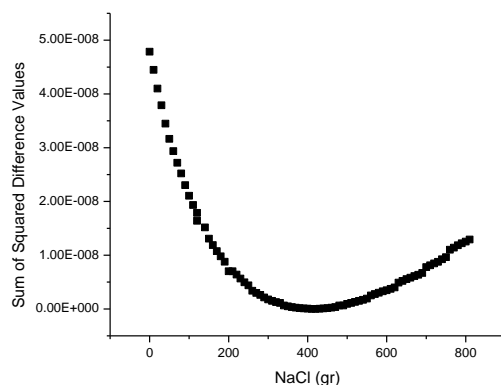
در این روش، ابتدا با استفاده از کُد MCNPX، ۸۲ طیف کتابخانه‌ای نمونه متناظر با مقادیر مختلف NaCl محلول در ۳/۵ لیتر آب (از صفر تا ۸۱۰ گرم) تهیه می‌شود. این طیفها مطابق با هندسه شکل (۱) و مربوط به آشکارساز BGO است. به منظور استفاده از روش کمترین مربعات لازم است برنامه‌ی کامپیوتری نوشته شود تا طیف مجهول را در ورودی دریافت کرده و کانال به کانال مقادیر طیف مجهول را از مقادیر طیفهای کتابخانه‌ای

کم کرده و مجموع مربعات این تفاضل‌ها به تعداد طیف‌های کتابخانه‌ای ذخیره شوند. مقدار نمک محلول در آب برابر با مقدار نمک محلول در آب طیف کتابخانه‌ای خواهد بود که کمترین تفاضل را می‌دهد.



شکل (۶): میانگین مقادیر بدست آمده از ۱۳ بار اندازه‌گیری در شبکه عصبی برحسب مقادیر مطلوب.

برای امتحان این روش، طیف بدست آمده برای ۴۱۵ گرم از NaCl محلول در آب به عنوان طیف مجهول در ورودی برنامه قرار داده می‌شود. شکل (۷)، مجموع مربع تفاضلهای طیف مجهول با طیف‌های کتابخانه‌ای را نشان می‌دهد. داده‌های نمودار شکل (۷) کمینه‌ی تفاضل‌ها را بین دو مقدار ۴۱۰ و ۴۲۰ گرم نشان می‌دهد. برای تعیین مقدار دقیق موجودی نمک نمونه مجهول، فرض می‌شود p مقدار از نمونه ۴۱۰ گرمی و q مقدار از نمونه ۴۲۰ گرمی در نمونه مجهول وجود دارد. این ضرایب در خروجی برنامه به ترتیب ۰/۵۷۴۹۹۶۲ و ۰/۴۲۵۰۰۳۸ بدست می‌آیند که این مقادیر، موجودی نمک نمونه مجهول را برابر ۴۱۴/۲۵ گرم تعیین می‌کنند که درصد خطای حدوداً ۰/۱۸۵ را می‌دهد.



شکل (۷): مقادیر مجموع مربعات تفاضلهای (بین طیف‌های کتابخانه‌ای و طیف اصطلاحاً مجهول با ۴۱۵ گرم موجودی نمک).

۴. بحث و نتیجه‌گیری

در این پژوهش، با استفاده از نتایج بدست آمده از طیف‌های تجربی و شبیه‌سازیدر کُد MCNP ملاحظه می‌شود که به سبب بازدهی بیشتر آشکارساز BGO نسبت به آشکارساز NaI در آشکارسازی پرتوهای گامای PGNA،



گزینه مناسب آشکارساز BGO است. همچنین با استفاده از طیف‌های کتابخانه‌ای حاصل از شبیه‌سازی با کد MCNPX و بهره‌گیری از دو روش شبکه عصبی و حداقل مربعات، مقدار NaCl مجهول در نمونه بدست می‌آید. مقایسه نشان می‌دهد روش حداقل مربعات خطای کمتری نسبت به روش شبکه عصبی دارد (خطای داده خروجی شبکه عصبی ۳/۳۸٪ و خطای روش حداقل مربعات ۰/۱۸٪ است).

مراجع

- [۱] Han, Xiaogang, , Development of Monte Carlo code for Coincidence Prompt Gamma-ray Neutron Activation Analysis, North Carolina State University, PhD Thesis, 2005
- [۲] پرویز قربانی، داریوش سرداری، وحید دوست محمدی، اسمعیل بیات، افزایش شار نوترون گرمایی در نمونه با استفاده از بازتابنده های نوترون جهت بهبود آنالیز PGNAA، مقاله نامه کنفرانس فیزیک ایران، ۱۳۹۰.
- [۳] R. Proctor, S. Yusuf, J. Miller, C. Scott , Detectors for on-line prompt gamma neutron activation analysis. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A. Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 422(1), 933-937.(1999)
- [۴] V. Doostmohammadi ,D. Sardari ,A. M. Nasrabadi. ,Combined application of Monte Carlo method and neural networks to simulate qualitative prompt gamma neutron activation analysis, *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry* 283.2 (2010): 403-407.
- [۵] Matlab, Version ۷,۶,۰,۳۲۴, Mathwork Inc., Help Files; 2008