Áp dụng thuật toán giải cuộn Gold để tách các đỉnh chập trong phổ gam-ma

- Trương Thị Hồng Loan
- Cao Phục Long Hòa
- Đặng Nguyên Phương
- Đặng Thị Thảo My Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, ĐHQG-HCM
- Ngô Quang Huy
 Trường Đại học Công nghiệp TP. HCM

(Bài nhận ngày 01 tháng 12 năm 2015, nhận đăng ngày 06 tháng 05 năm 2016)

TÓM TẮT

Trong công trình này chúng tôi bước đầu nghiên cứu áp dụng thuật toán giải cuộn Gold để khử miền liên tục và tách đỉnh phổ chập trong phổ của hệ phổ kế gam-ma phông thấp HPGe. **Từ khóa:** giải cuộn, hàm đáp ứng, MCNP, HPGe

MỞ ĐẦU

Trong phân tích định lượng hay định tính bằng hệ phổ kế gam-ma, khi xử lý số liệu thu được từ việc ghi nhận phổ người ta đặc biệt quan tâm đến các đỉnh năng lượng toàn phần gây nên bởi hiện tượng quang điện. Tuy nhiên, ngoài hiệu ứng quang điện, khi bức xạ gamma tương tác với vật chất thì còn có hai hiệu ứng khác là tạo cặp và tán xạ Compton, trong đó, tín hiệu tạo ra bởi tán xạ Compton đóng một vai trò đáng kể trong việc gây nền phông cao và dễ tạo ra các đỉnh chập trong phổ bức xạ gam-ma. Sự có mặt của nền tán xa Compton làm cho việc tính toán hoat đô của nguồn ít nhiều bị sai lệch khi đỉnh năng lượng thấp trên nền Compton cao hoặc khi các đỉnh năng lượng quan tâm nằm gần nhau trong pham vi nhỏ hơn khả năng phân giải của hệ phổ kế (sự chập đỉnh). Để tăng độ chính xác cho quá trình phân tích, người ta đưa ra nhiều phương pháp để loại bỏ vùng tín hiệu do tán xạ Compton gây ra như phổ kế trùng phùng triệt Compton hoặc sử dụng các phương pháp xử lý số liệu. Công trình

Kết quả nghiên cứu có thể là cơ sở cho việc áp dụng tách đỉnh chập trong phổ gam-ma có hoạt độ thấp của mẫu môi trường.

này trình bày việc soạn thảo một chương trình giải cuộn phổ dùng thuật toán Gold, và áp dụng nó để khử miền liên tục cũng như tách đỉnh chập của phổ gam-ma.

PHƯƠNG PHÁP

Thuật toán giải cuộn Gold

Thuật toán Gold được thiết lập dựa trên phương trình tích phân [1]:

$$Y(\mu) = \left| A(\nu,\mu)X(\nu)d\nu \right|$$
(1)

Trong đó, X(v) là phân bố bức xạ ở mức năng lượng v, Y(μ) là số bức xạ ghi nhận được ở mức năng lượng μ của thiết bị ghi, A(ν , μ) là hàm đáp ứng của đề-têc-tơ (detector). Hàm X(ν) cho biết xác suất mà một bức xạ mang năng lượng ν sẽ được ghi nhận ở vị trí năng lượng μ của hệ đo.

Ở phương trình (1), μ và v là các biến liên tục nằm trên miền giá trị năng lượng cần khảo sát. Tuy nhiên, trên thực tế, thiết kế của các đề-têc-tơ không cho phép chúng hiển thị các tín hiệu liên tục mà chỉ cho phép phân bố tín hiệu vào các kênh rời rạc, do đó, phương trình (1) được chuyển thành dạng:

$$Y = A.X \tag{2}$$

Trong đó, Y là véc-tơ phố đo, còn gọi là véctơ đầu ra, chứa các giá trị rời rạc tương ứng với số đếm từng kênh của đề-têc-tơ; X là véc tơ phổ đầu vào, đại diện cho phân bố năng lượng của nguồn; A là ma trận đáp ứng của đề-têc-tơ, phản ánh cách mà phổ bức xạ gốc được ghi nhận trong đề-têc-tơ.

Như vậy, phần tử y_i của véc tơ Y sẽ được xác định bởi:

$$\mathbf{y}_{i} = \sum_{j=1}^{n} a_{j,i} \mathbf{x}_{j} \qquad (3)$$

Với x_j là phần tử của véc tơ X, $a_{j,i}$ là phần tử của ma trận đáp ứng A; n là cấp của ma trận đáp ứng A.

Phương trình (2) có thể được giải bằng cách nhân trái hai vế của phương trình cho ma trận A⁻ ¹. Tuy nhiên, khi xây dựng một ma trận đáp ứng để giải bài toán trong điều kiện thực tế, Gold sử dụng phương pháp lặp để tìm ra nghiệm gần đúng của phương trình (2) như sau:

$$x_{i}^{(k+1)} = \frac{x_{i}^{(k)}y_{i}}{\sum_{j=1}^{n} a_{i,j}x_{j}^{(k)}}$$
(4)

Chương trình giải cuộn phổ gamma bằng thuật toán Gold

Việc xây dựng chương trình giải cuộn gồm 2 bước chính: thứ nhất là xây dựng ma trận đáp ứng, thứ hai là tạo vòng lặp sử dụng thuật toán Gold để tìm phổ gốc từ nguồn. Để xây dựng ma trận đáp ứng, các vector hàm đáp ứng A_i cần phải được xác định. Hàm đáp ứng $P_i(E_j)$ là một hàm số cho biết xác suất mà một bức xạ có năng lượng E_i được ghi nhận trên từng kênh của một đề-têc-tơ nhất định. Trong tính toán, hàm đáp ứng $P_i(E_j)$ được đại diện bởi véc-tơ A_i .

Trên lý thuyết, một hàm đáp ứng có thể thu được bằng cách sử dụng một nguồn phát gam-ma đơn năng đã biết trước hoat đô, ghi nhân số đếm của nguồn này bằng đề-têc-tơ đang khảo sát, sau đó tính xác suất mà bức xa được ghi nhân trên từng kênh của hệ phân tích phổ. Tuy nhiên, vì hệ phân tích phổ bức xạ gam-ma trong thực tế có số kênh rất lớn nên việc sử dụng các nguồn phóng xa đơn năng thật để xây dựng các hàm đáp ứng là không khả thi. Để có thể xây dựng một lượng lớn hàm đáp ứng như vậy, người ta sử dụng các chương trình mô phỏng bằng máy tính. Trong bài báo này, hàm đáp ứng được mô phỏng bằng chương trình MCNP5 [3]. Việc mô phỏng các hàm đáp ứng tuy được thực hiện trên máy tính nhưng cũng tốn rất nhiều thời gian. Để rút ngắn thời gian quá trình mô phỏng không tiến hành cho từng kênh năng lượng một, mà thực hiện cách khoảng. Việc lựa chọn khoảng m giữa các hàm đáp ứng một cách hợp lý sẽ làm giảm thời gian mô phỏng mà vẫn đảm bảo một mức sai số chấp nhận được. Để xác định các hàm đáp ứng nằm giữa hai hàm đáp ứng mô phỏng, chúng tôi xây dựng chương trình nội suy hàm đáp ứng IPRES dựa trên cơ sở thuật toán nội suy bởi M. Jandel [1].

Sau khi đã có được một ma trận đáp ứng, một chương trình để giải cuộn theo công thức lặp (4) được thiết lập. Hình 1 trình bày sơ đồ khối các bước thực hiện việc giải cuộn phổ gamma.

Trang 72



Hình 1. Sơ đồ khối các bước thực hiện việc giải cuộn phổ gam-ma

KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Nghiên cứu khả năng tách đỉnh của thuật toán giải cuộn được xây dựng

Khả năng tách đỉnh của thuật toán giải cuộn tùy thuộc vào cấp của ma trận đáp ứng. Trường hợp tốt nhất tương ứng với khi độ chia nhỏ nhất của ma trận đáp ứng bằng độ chia kênh nhỏ nhất của hệ phổ kế. Ở đây hệ phổ kế được khảo sát có tối đa là 8192 kênh trong miền năng lượng từ 6,7 keV đến 1942,2 keV. Vì vậy khoảng cách trung bình giữa hai kênh là 0,24 keV. Để thực hiện phép kiểm tra mức độ tách đỉnh, một phổ thử nghiệm X gồm hai đỉnh với một đỉnh làm chuẩn C được cố định ở kênh 5000, có diện tích là 10⁸ số đếm được tạo ra. Đỉnh sử dụng để kiểm tra K có diện tích 10⁷, lần lượt được phân bố ở các kênh 5002, 5004 và 5006. Tổng diện tích của phổ X là 110000000 số đếm.

Hình 2, 3, 4 trình bày các phổ đầu ra của đỉnh K, đỉnh C và đỉnh chồng chập giữa C và K lần lượt tại sáu vị trí của K.



Hình 2. Đỉnh C, đỉnh K và đỉnh chồng chập khi K ở kênh 5002.



Hình 3. Đỉnh C, đỉnh K và đỉnh chồng chập khi K ở kênh 5004



Hình 4. Đỉnh C, đỉnh K và đỉnh chồng chập khi K ở kênh 5006

Sau khi thu được các phổ đầu ra, việc giải cuộn cho ba phổ này đã được tiến hành và thu được các kết quả sau:

Trường hợp K nằm ở kênh 5002 (Hình 5), chương trình cho thấy phân biệt được hai đỉnh nhưng chưa tách được hai đỉnh K và C. Trường hợp K nằm ở các kênh 5004 và 5006 (Hình 6 và Hình 7), chương trình cho phép phân biệt hai đỉnh K và C. Mức độ chồng chập đỉnh được cho ở bảng 1.

Khi khoảng cách giữa K và C là từ 4 kênh trở lên (Hình 6 và 7), thuật toán giải cuộn hoàn toàn tách được hai đỉnh này.

Trang 74



Hình 5. Đỉnh C và K trước và sau giải cuộn (K ở kênh 5002)



Hình 6. Đỉnh C và K trước và sau giải cuộn (K ở kênh 5004)



Hình 7. Đỉnh C và K trước và sau giải cuộn (K ở kênh 5006)

Thử nghiệm trên cho thấy thuật toán Gold phân biệt hầu như mọi trường hợp các đỉnh phổ nằm cách nhau từ hai kênh trở lên và có khả năng tách biệt hoàn toàn hai đỉnh khi khoảng cách giữa chúng là trên bốn kênh (tương ứng với 0,96 keV).

Vị trí đỉnh K	Diện tích phần phổ xảy ra chông chập	Số kênh chồng chập	Tỉ lệ diện tích phần phổ chồng chập so với diện tích đỉnh K (%)
5002	1080042090	3	1080,04
5004	1401027	1	1,40
5006	0	0	0,00

Bảng 1. Độ chồng chập đỉnh C và K sau khi giải cuộn.

Áp dụng giải cuộn phổ gam-ma mẫu chuẩn môi trường

Dưới đây trình bày minh họa áp dụng chương trình tách đỉnh bằng thuật toán giải cuộn đã xây dựng trong phân tích phổ gam-ma của mẫu môi trường. Các mẫu chuẩn đất RGU1 và RGTh1 được chuẩn bị trong hộp đựng mẫu Marinelli và được đo trên hệ gam-ma HPGe. Chuẩn RGU1 chủ yếu chứa ²³⁸U, chuẩn RGTh1 chủ yếu chứa ²³²Th. Các thành phần đồng vị phóng xạ có trong mẫu có thể được tham khảo trong catalog của mẫu chuẩn.

Giải cuộn phổ mẫu chuẩn RGU1

Hình 8 trình bày một số đỉnh đặc trưng trong phổ gam-ma của mẫu chuẩn RGU1 trước và sau giải cuộn.



Hình 8. Một số đỉnh đặc trưng trong phổ gam-ma của mẫu chuẩn RGU1 trước và sau giải cuộn.

Hình 9 chụp từ màn hình của Genie – 2K [4] cho thấy khi ROI để xác định diện tích đỉnh 768,4 keV (²¹⁴Bi) nhận thấy chân trái đỉnh có bướu hơi nhô cao, dự đoán có khả năng bị chập bởi đỉnh 766,7 keV (134 I) nên chân đỉnh rộng hơn bình thường, tạo thành một đỉnh phổ có tổng diện tích là 81736 số đếm.



Hình 9. Đinh phố 768,4 keV (214Bi) bị chập bởi đỉnh 766,7 keV (134I) nên chân đỉnh rộng hơn bình thường

Sau khi thực hiện giải cuộn, Hình 10 cho thấy đinh này được tách rời thành hai đinh có diện tích là 456325 (768,4 keV) và 42299 (766,7 keV).



Hình 10. Đỉnh 766,7 keV và đỉnh 768,4 keV trước và sau giải cuộn

Giải cuộn phổ mẫu chuẩn RGTh1

Hình 11 mô tả chi tiết dạng phổ gam-ma đo từ mẫu chuẩn RGTh1 trước và sau khi giải cuộn trong khoảng năng lượng từ 250 keV đến 330 keV.



Hình 11. Một số đỉnh năng lượng của phổ gam-ma RGTh1 trước và sau giải cuộn

Hình 12 chụp từ màn hình của Genie – 2K [4] cho thấy khi ROI để xác định diện tích đỉnh 90,0 keV (²³⁵U) bằng chương trình Genie-2000 (đinh ở giữa màu đỏ), nhận thấy có sự chồng chập ở dưới chân đỉnh phổ của các đỉnh 87,2 keV (²¹²Pb) và 93,3 keV (²²⁸Ac) gây sai số lớn. Sau khi thực hiện giải cuộn, các đỉnh này hoàn toàn được tách rời (Hình 13).



Hình 12. Sự chồng chập của các đỉnh khi xử lý bằng chương trình Genie 2000

Trang 77



Hình 13. Đỉnh 87,2 keV (212Pb), 90,0 keV (235U) và 93,3 keV (228Ac) trước và sau giải cuộn

KÉT LUÂN

Kết quả cho thấy chương trình giải cuộn xây dựng được dựa trên thuật toán Gold của nhóm tác giả xây dựng phân biệt hầu như mọi trường hợp các đỉnh phổ nằm cách nhau từ hai kênh trở lên và có khả năng tách biệt hoàn toàn hai đỉnh khi khoảng cách giữa chúng là trên bốn kênh (tương ứng với 0,96 keV). Các đỉnh phổ thu được từ phép giải cuộn bằng thuật toán Gold khá hẹp, tỉ số giữa bề rộng trung bình của một phổ giải cuộn so với bề rộng trung bình của phổ thực nghiệm chỉ nằm trong khoảng 40% đến 50%, nhờ đó nâng cao khả năng phân tách các đỉnh chồng chập của phổ đo. Ở phổ mẫu chuẩn môi trường RGU1, thuật toán Gold đã tách được hai đỉnh cách nhau bảy kênh năng lượng (tương ứng với 1,7 keV) cho thấy khả năng áp dụng để tách đỉnh trong mẫu môi trường.

Study on analyzing overlaped peaks using the Gold algorithm of unfolding

- Truong Thi Hong Loan
- Cao Phuc Long Hoa
- Dang Nguyen Phuong
- Dang Thi Thao My University of Science, VNU-HCM
 Ngo Quang Huy
- Industrial University of Ho Chi Minh City

ABSTRACT

In this work, we initially applied the Gold unfolding algorithm to deconvolute continuum region in the gamma spectra and to analyze its overlaped peaks for the gamma spectrometry using HPGe detector. The results could be used to analyse overlaped peaks of low level gamma spectrum for environmental samples.

Key words: unfolding, response function, MCNP, HPGe

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. M. Jandel, M. Morháčc, J. Kliman, L'. Krupa, V. Matousek, J.H. Hamiltonc, A.V. Ramayyac, Decomposition of continuum gray spectra using synthesized response matrix, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, 516 172–183 (2004).
- [2]. R. Gold, An iterative unfolding method for response matrices, Argonne National Laboratory, Argonne, Illinois (1964).
- [3]. X-5 Monte Carlo Team, MCNP A general Monte Carlo N-particle Transport Code, Version 5, Los Alamos National Laboratory (2003).
- [4]. Canberra Industries, Inc., Gennie 2000 soft ware, Canberra Industries, Inc., USA, (2004).