



بیت و پنجمین کنفرانس هسته‌ای ایران

۱ و ۲ اسفندماه ۱۳۹۷ - دانشگاه آزاد اسلامی (واحد بوشهر)



طراحی و نگارش نرم افزار GAS جهت آنالیز طیف گامای آشکارساز HPGe

، روشن محسن^۳، علیپور زهرا^۴*، جمیلی سعید^۱، بیات اسمعیل^۲

^۱ دانشگاه فنی شهید شمس‌پور، دانشکده الکترونیک

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

^۳ دانشگاه شهید بهشتی، دانشکده مهندسی هسته‌ای، گروه پرتوپزشکی

^۴ دانشگاه زنجان، دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک

چکیده:

در کشور ما همواره از نرم افزارهای شرکت های ORTEC و CANBERRA جهت آنالیز طیف های گامای آشکارساز HPGe استفاده شده است که باعث محدودیتهایی بخصوص با کاربری خاص می شود. نرم افزار GAS جهت آنالیز طیف گامای حاصل از چشمه های رادیوایزوتوپی و طیف گامای حاصل از فعالسازی نوترون (PGNAA و DGNAA) نگارش شده است. این نرم افزار به زبان C# و با استفاده از برخی الگوریتم های ابتکاری نوشته شده و آزمون های مقایسه ای با دیگر نرم افزارها و آزمون آنالیز کمی و کیفی طیف حاصل از پرتو دهی نمونه توسط نوترون را بخوبی پاسخ داده است.

کلمات کلیدی: نرم افزار آنالیز، طیف گاما، HPGe، PGNAA

Design and development a gamma analyzer software (GAS) for HPGe spectrum

Jamili, Saeid¹; Bayat, Esmaeil²*; Roshan, Mohsen³; Alipour, Zahra⁴

¹ Department of Electronic Engineering, Shahid Shamsipour Technical College, Tehran

² Nuclear Science and Technology Research Institute, Atomic Energy Organization of Iran

³ Department of Nuclear Engineering, University of Shahid Beheshti, Tehran

⁴ Department of Physics, University of Zanjan, Zanjan



Abstract:

In our country, software made by ORTEC and CANBERRA companies have been always used for analyzing gamma spectra recorded by HPGe detectors, which in some applications, causes restriction. GAS software has been developed for broad range of gamma energy, contain prompt and delay gamma spectrum analysis ability. This software has been written in C# using some innovative algorithms. Qualitative and quantitative analysis has been done for the sample spectrum Irradiated by ^{252}Cf neutron source. The results indicate that performance of software has good agreement with similar ones.

Keywords: Analysis software, Gamma spectrum, HPGe, PGNAA

مقدمه:

امروزه آنالیز مواد به روش PGNAA^1 دارای کاربرد گسترده‌ای در صنایع می‌باشد. با تحلیل طیف گامای حاصل از فعالسازی نوترون، به معنی تعیین دقیق انرژی گاما و میزان شمارش در آن انرژی، نوع عناصر موجود در نمونه و مقدار آن مشخص می‌شود. اما به دلیل گسیل گاماها با انرژی‌های مختلف و نزدیک به هم، اولاً قله‌های بسیاری در طیف ایجاد شده و ثانیاً به دلیل هم‌پوشانی بین این قله‌ها، مشکل تحلیل طیف از جهت تشخیص انرژی‌های گاما و شدت آنها وجود خواهد داشت. از طرفی شمارش ناکافی و ایجاد حالت شبیه نویز در طیف، قله‌یابی را دچار مشکل می‌کند. از این رو استفاده از الگوریتمی با دقت و کارایی مناسب برای حذف نویز، قله‌یابی و تعیین مشخصه آنها ضروری می‌باشد. نرم افزارهای آنالیز گامای فعالسازی مانند SPAN^2 که برای بررسی طیف‌های گاماها با تاخیری در راکتور مینیاتوری MNSR اصفهان مورد استفاده است، قیمت بالایی داشته و امکان گسترش کاربری آن وجود ندارد. نرم‌افزار Gamma vision که بطور رایج جهت آنالیز طیف گاما تا 3MeV استفاده می‌گردد، برای کاربردهای NAA یا PGNAA کاربر را با دشواری مواجه می‌کند. ویژگی مهم دیگری که با نرم افزارهای تجاری قابل تامین نیست، سازگاری نرم افزار با سخت افزار و ساخت سیستم‌های یکپارچه است. بنابراین نرم افزار $\text{GAS (Gamma Analyzer Software)}$ با هدف آنالیز کمی و کیفی طیف‌های گاما نگارش گردید. نرم افزار GAS با بهره‌گیری از کتابخانه بزرگ [۱،۲] و قابل ویرایش از جمله برای گاماها آنی و تاخیری ناشی از اندرکنش نوترون با عناصر، می‌تواند در آنالیز با کاربردهای مختلف مورد استفاده قرار گیرد. در این مقاله به ارایه و بررسی توانایی‌های آنالیز کیفی و کمی نرم افزار GAS پرداخته می‌شود.

1. Prompt gamma neutron activation analysis

2. Neutron activation analysis



روش کار:

در برنامه‌نویسی این نرم‌افزار سعی شد از پرداختن به الگوریتم‌های پیچیده پرهیز گردد و حتی‌المقدور از الگوریتم‌های ساده و ابتکاری استفاده شود. این نرم‌افزار به زبان C# بصورت شیء گرا نوشته شده و در بخش‌هایی از نرم‌افزار از کدهای HTML JavaScript و J quarry نیز استفاده شده است. نرم‌افزار GAS از قسمت‌های اصلی ذیل تشکیل شده است: ۱- دریافت طیف ۲- کالیبراسیون طیف ۳- جستجوی قله ۴- کتابخانه ۵- آنالیز کیفی ۶- آنالیز کمی ۷- گزارش دهی. در شکل ۱ بلوک دیاگرام نرم‌افزار آورده شده است. نرم‌افزار می‌تواند طیف را به فرمت CHN یا TXT دریافت نماید. با استفاده از منوی کالیبراسیون، انرژی و FWHM^۳ بر اساس قله‌های شناخته شده با حداقل دو مقدار از انرژی و FWHM کالیبره می‌شوند.



شکل ۱. بلوک دیاگرام نرم‌افزار GAS

. برازش کالیبراسیون به صورت انتخابی، خطی یا با معادله درجه دوم انجام می‌شود. بعد از انجام کالیبراسیون، بر روی طیف کالیبره شده قله‌یابی صورت می‌گیرد. در طیف‌نگاری گاما، شمارش ناکافی و نوسانات شبیه نویز، در بسیاری از موارد، تفکیک قله از زمینه را مشکل می‌سازد [۳]. روش متداول در قله‌یابی استفاده از روش مشتق‌گیری است که به روش ماریسکوئی مشهور است [۴]. در این روش طبق شکل ۱- الف، مشتق دوم محاسبه شده و سپس با شرط‌هایی صحت آن تایید می‌شود. در روش ماریسکوئی، قله‌های بسیار کوچک زیادی گزارش می‌شود که ممکن است باعث خطا در آنالیز شود. در نرم‌افزار GAS، برای قله‌یابی روش نوینی استفاده شده است. در این روش قله‌هایی با مشتق اول بدست می‌آید و سپس برازش گوسی با معادله گوسی (رابطه ۱) روی نقاط قله انجام می‌شود. در این

³. Full width at half maximum

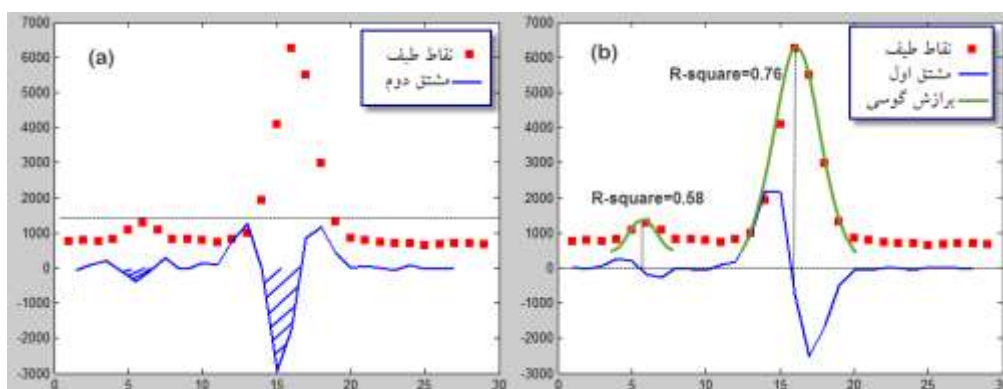


برازش با تغییر پارامترهای a ، b و c سعی می‌شود خطای برازش یعنی مجموع اختلاف هر نقطه با تابع موردنظر حداقل شود. برای محاسبه خطای برازش از ضریب R -Square (رابطه ۲) استفاده شده است. در رابطه SSE^4 ، جمع مربعات اختلاف نقاط ورودی با نقاط برازش شده و SSR^5 ، جمع مربعات خطای میان نقاط برازش شده با میانگین نقاط ورودی می‌باشد.

$$Y(x) = ae^{-\frac{(x-b)}{c}} \quad (1)$$

$$R - Square = \frac{SSR}{SSR + SSE} \quad (2)$$
$$, SSR = \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y}_i)^2 \quad SSE = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$$

با توجه به آنکه قله‌ها در طیف گاما شبه گوسی هستند می‌توان شرط میزان تطابق نقاط قله با گوسی برازش شده را تعریف نمود. بطوریکه قله‌هایی با میزان تطابق کم با گوسی برازش شده، با احتمال نويز حذف شوند. در طیف گاما به دلیل تداخل زیاد قله‌ها با یکدیگر ممکن است قله‌هایی با $FWHM$ بزرگ ایجاد شود که در واقع حاصل جمع چندین قله نزدیک به هم می‌باشد [۴]. به منظور شناسایی و تفکیک این قله‌ها محاسبه $FWHM$ قله و مقایسه آن با مقدار کالیبره شده مورد نیاز می‌باشد. در نرم افزار GAS این قله‌ها شناسایی و در پیغامی به کاربر گزارش می‌شود.



شکل ۲ الف: قله یابی به روش ماریسکوتی با استفاده از مشتق دوم [۴]

ب. قله یابی به روش مشتق اول و تطابق با گوسی

4. Sum of squares due to errors

5. Sum of square of the regression



برای تخمین مساحت زیر قله می‌توان از دو روش استفاده نمود. در روش اول، با استفاده از میانگین‌گیری از نقاط ابتدا و انتهای قله، خط زمینه تعیین می‌شود و مساحت قله با کسر کردن زمینه از مساحت حاصل از نقاط قله بدست می‌آید [۵]. در روش دوم، روش استفاده شده در نرم‌افزار GAS، از برازش گوسی استفاده می‌شود که به دلیل تداخل قله‌ها و نویز در طیف مناسب‌تر از روش اول می‌باشد [۶]. در این نرم‌افزار، برای محاسبه خط زمینه از روش هموارسازی حداقل مربعات نامتقارن استفاده شده است [۷].

پس از انجام قله‌یابی، نرم‌افزار GAS، در یک لیست، انرژی قله‌های یافت شده به همراه سطح زیر آنها را گزارش می‌نماید. برای شناسایی قله‌های یافت شده، از کتابخانه‌های قابل ویرایش موجود در نرم‌افزار استفاده می‌شود. در حال حاضر سه کتابخانه گامای رادیوایزوتوپی (0-3MeV)، کتابخانه PGNA (0-11MeV) و کتابخانه DGNA (0-4MeV) در آن وجود داشته و برای هر آنالیز قابل انتخاب است [۲۱]. نرم‌افزار با مقایسه لیست انرژی حاصل از قله‌یابی و کتابخانه، عناصر موجود در طیف را شناسایی و گزارش می‌نماید. برای بررسی آنالیز کمی، سطح زیر قله‌های مشخصه عنصر مورد بررسی توسط نرم‌افزار محاسبه می‌شود و بر اساس آن، مقدار هر عنصر در نمونه محاسبه می‌گردد. از دیگر ویژگی‌های نرم‌افزار می‌توان به کاهش نویز طیف توسط روش ویولت و میانگین‌گیری، محاسبه خط Baseline، انجام عملیات جبری روی چند طیف بطور همزمان، بزرگنمایی طیف و وجود منوال کاربری اشاره نمود.

جهت تست نرم‌افزار GAS، طیف گامای آنی حاصل از پرتو دهی نمونه کلروفرم توسط چشمه نوترونی ^{252}Cf با اکتیویته 10 mCi جهت آنالیز کیفی PGNA مورد بررسی قرار گرفت. همچنین نمونه کلروفرم به مدت ۲۴ ساعت توسط همین چشمه نوترون پرتو دهی شده و سپس با استفاده از آشکارساز HPGe در ۱۵۰۰ ثانیه طیف‌نگاری گردید. برای بررسی قابلیت آنالیز کمی نرم‌افزار و امکان مقایسه آن با دیگر نرم‌افزارها، سطح زیر قله بدست آمده طیف رادیونوکلئیدهای طبیعی موجود در خاک توسط نرم‌افزارهای GAS، GammaVision و Omnigam آنالیز و مقایسه شدند.

نتایج:

برای بررسی گاما‌های آنی عناصر، می‌توان طیف حاصل از پرتو دهی نمونه را از طیف حالت بدون نمونه (طیف مواد چیدمان) کم شود تا قله‌های مربوط به چیدمان آزمایش و زمینه از طیف اصلی نمونه حذف گردد. سپس کالیبراسیون و جستجوی قله‌ها بر روی طیف انجام شود (شکل ۳).

⁶. Delay gamma neutron activation analysis



شکل ۳. کم کردن طیف نمونه مورد نظر از طیف چیدمان و قله‌یابی طیف توسط نرم افزار

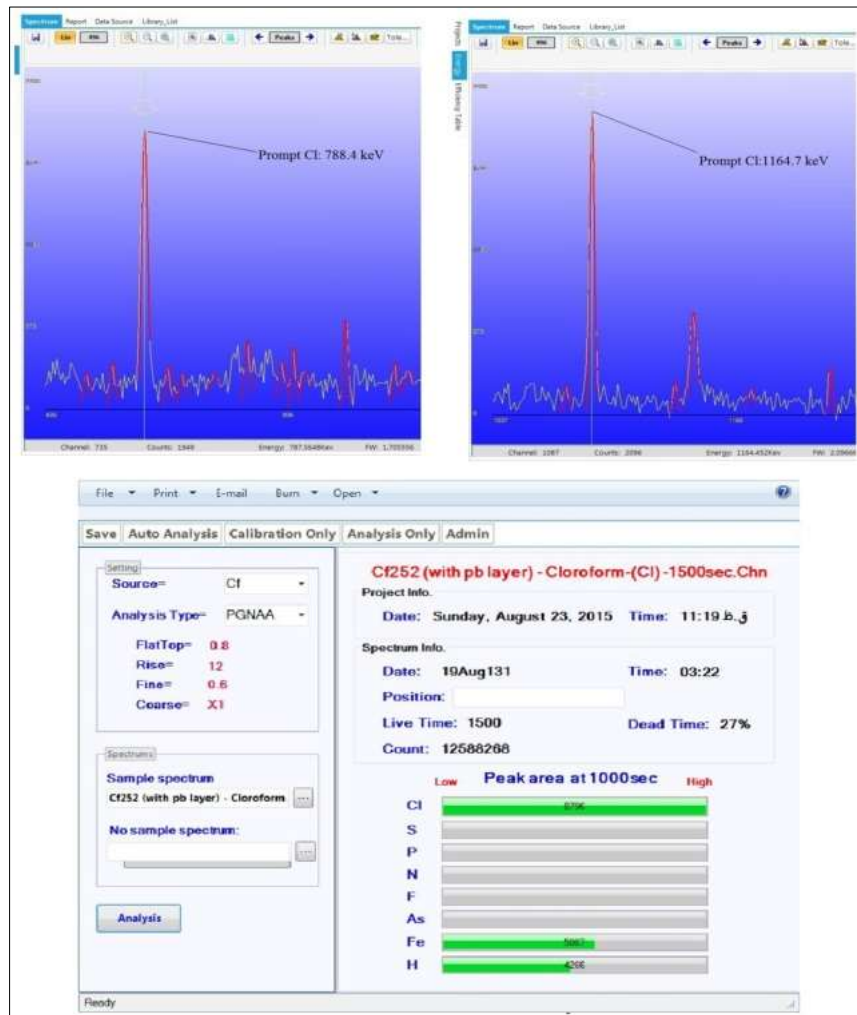
در شکل ۴- بالا طیف گامای آبی حاصل از پرتودهی کلروفرم و آنالیز آن توسط نرم افزار دیده می شود. همچنین نرم افزار با استفاده از فهرست قله های گامای موجود در کتابخانه خود، علاوه بر کلر، هیدروژن و همچنین آهن (مربوط به ظرف) در نمونه را گزارش نمود. همچنین طیف حاصل از گاماهاى تاخیری گسیل شده توسط نمونه پرتودهی شده، با استفاده از نرم افزار GAS مورد بررسی قرار گرفت و وجود کلر در طیف گزارش شده است (شکل ۴-پایین). نتایج آنالیز کمی نیز نشان دهنده تطابق خوب نرم افزار GAS و اختلاف کمتر از ۵٪ آن با نرم افزارهای GammaVision و Omnigam می باشد (شکل ۵ و جدول ۱). لازم به ذکر است دو نرم افزار GammaVision و Omnigam نیز حدود ۵٪ در سطح زیر قله با هم اختلاف دارند.



بیت و پنجمین کنفرانس هسته‌ای ایران



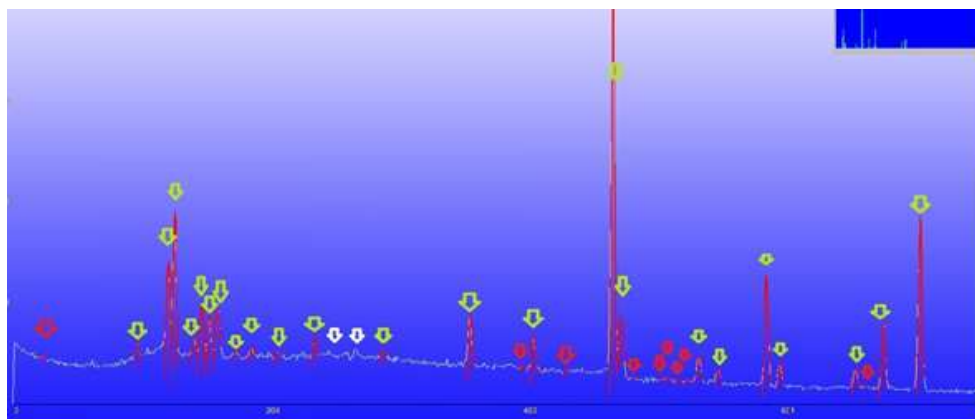
۲۰ اسفندماه ۱۳۹۷ - دانشگاه آزاد اسلامی (واحد بوشهر)



شکل ۴. شناسایی قله‌های گامای آنی عنصر کلر توسط قله یابی نرم افزار و گزارش وجود کلر در نمونه توسط نرم افزار



بیت و پنجمین کنفرانس هسته‌ای ایران
۲۰ اسفندماه ۱۳۹۷- دانشگاه آزاد اسلامی (واحد بوشهر)



شکل ۵. مقایسه بین قله‌های شناسایی شده توسط نرم افزار GAS و نرم افزار Omnigam. پیکان سبز به معنای گزارش قله توسط هر دو نرم افزار، پیکان قرمز به معنای گزارش قله تنها توسط GAS و پیکان سفید به معنای گزارش قله تنها توسط Omnigam می باشد.

جدول ۱. مقایسه سطح زیر قله برای چشمه های مختلف توسط GAS و Omnigam

source	Energy (keV)	CHANNEL	Omnigam		GAS		GAS Discrepancy to Omnigam %
			ENERGY	NET REA	ENERGY	NET AREA	
²⁴¹ Am	59.54	90	59.43	21656	60	21285	-1.71
	81	135	80.18	81758	81	77891	-4.73
	276.4	547	275.86	23680	276.1	22641	-4.39
	302.85	603	603.17	57249	302.7	55795	-2.54
	356.02	715	355.54	169966	355.76	163293	-3.93
	383.85	774	383.37	24232	383.7	23922	-1.28
¹⁰⁹ Cd	88.04	150	88.01	5712	88	5728	0.28
⁶⁰ Co	1173.24	2441	1172.94	51043	1172.36	48235	-5.5
	1332.50	2777	1332.36	46572	1332.13	44826	-3.75
⁵⁷ Co	122.06	221.44	121.99	46273	122	43848	-5.24
	136.47	252	136.41	6100	136.21	5981	-1.95
¹³⁷ Cs	661.657	1360	661.64	24319	660.83	23296	-4.21



بحث و نتیجه گیری:

طبق بررسی نتایج آنالیزها مشاهده می‌شود که نرم‌افزار GAS با بهره‌گیری از الگوریتم مناسب حذف نویز، قله‌یابی و کتابخانه‌های تخصصی قابل ویرایش، گزارشی با دقت بالا را ارائه می‌دهد. مقایسه قله‌یابی این نرم‌افزار با دیگر نرم‌افزارها نشان می‌دهد نتایج قله‌یابی و شناسایی عنصر نرم‌افزار GAS در حد مطلوبی می‌باشد. همچنین نرم‌افزار GAS قادر است با دقت خوبی سطح زیر قله‌های مشخصه هر عنصر را محاسبه کند.

مراجع:

- [1] Database of prompt gamma rays from slow neutron capture for elemental analysis, University of California, 2004.
- [2] Reference neutron activation library, IAEA, TECDOC No. 1285.
- [3] Gordon R. Gilmore, "Practical Gamma-ray Spectrometry", 2nd Edition., John Wiley & Sons, 2008,
- [4] Software for nuclear spectrometry, IAEA TECDOC No. 1049.
- [5] N. Reguigui, Gamma Ray Spectrometry- practical information, eBook, 2006.
- [6] L. Kokta, Determination of peak area, Nuclear Instruments and Methods, Volume 112, Issues 1–2, September–October 1973, Pages 245-251.
- [7] H. C. Eilers and F.M. Boelens, Baseline Correction with Asymmetric Least Squares Smoothing, Life Sci. 2005, 1, 5.