



ЛАБОРАТОРИЯ
СПЕКТРОМЕТРИИ
И РАДИОМЕТРИИ

**Программное обеспечение "Lsrn".
Алгоритмические основы - функции обработки
спектральной информации.**

Россия, 141570, Московская обл., Солнечногорский район, п. Менделеево,
Льяловское шоссе, д. 1а, ООО "ЛСРМ"
тел./факс: +7 (495) 660-16-14
<http://www.lsrn.ru> E-mail: lsrn@lsrn.ru

2007 г.

© Copyright. Все права защищены.

Данный документ содержит достоверные сведения, касающиеся программного продукта, и пользователь должен ему следовать. Внесения изменений в данный документ возможно без предварительного уведомления пользователя. Изменение, тиражирование и распространение пользователем данной документации в коммерческих целях без письменного уведомления ООО «ЛСРМ» является незаконным. Все материалы в данном документе, включая рисунки, схемы и текст, являются собственностью ООО «ЛСРМ».

Контактная информация:

141570, Московская обл., Солнечногорский р-н, п. Менделеево,

Льяловское шоссе, д. 1а, ООО «ЛСРМ»,

WWW: <http://www.lsrn.ru>

тел./факс: +7 (495) 660-16-14

E-mail: lsrn@lsrn.ru

В данном руководстве приняты следующие соглашения:

- **жирным шрифтом** выделяются названия меню, кнопок и других управляющих элементов,
- *курсивом* выделяются ссылки на другие документы, разделы, а также ключевые понятия и термины,
- **жирным курсивом** выделяются замечания и предупреждения,
- знаком * отмечены те управляющие элементы интерфейса, которые в настоящее время не используются.

Содержание

1	Введение	1-1
2	Разметка спектра – определение положений пиков	2-1
2.1	Автоматический поиск пиков	2-1
2.1.1	Быстрый поиск – «свертка»	2-1
2.1.2	Минимизация погрешности	2-1
2.2	Интерактивный режим	2-1
2.3	Линии из библиотеки	2-1
3	Локализация информативных участков спектра (разбиение на зоны)	3-1
3.1	Ограничение по Lz_{max} и Npz_{max}	3-1
3.2	Зона вокруг пика	3-1
4	Расчет параметров пиков путем аппроксимации информативных участков (подгонка)	4-1
4.1	Минимизация по полуширине	4-1
4.2	Учет соотношений интенсивности	4-1
4.3	Подгонка идентифицированных линий с одновременным расчетом активности	4-2
4.4	Подгонка с априорной информацией о значениях параметров	4-3
4.5	Подгонка нескольких участков одновременно	4-3
5	Идентификация радионуклидов	5-1
5.1	Фильтр по табличным значениям интенсивности	5-1
5.2	Фильтр по интенсивности зарегистрированного гамма-излучения	5-2
5.3	Проверка энергетического спектра нуклида	5-3
5.4	Фильтр по периоду полураспада	5-3
5.5	Проверка цепочек распада	5-4
5.6	Проверка нескольких линий в спектре	5-5
5.7	Поиск пиков одиночного, двойного вылета, пиков сумм	5-6
6	Расчет активности	6-8
6.1	Расчет активности при однозначной идентификации пиков	6-8
6.2	Расчет активности при наличии интерферирующих линий (Матричный метод)	6-8
6.3	Расчет активности на этапе подгонки	6-9
7	Сценарии расчета активности	7-9
7.1	Matrix	7-9
7.2	ZoneByZone	7-9
7.3	AllZones	7-9
7.4	AllZonesSew	7-9
8	Калибровка по энергии	8-1
8.1	Автокалибровка по энергии	8-1
8.2	Калибровка непрерывных бета-спектров	8-1
9	Калибровка по полуширине	9-1
10	Калибровка по форме линии. Пик-образ	10-1
10.1	Табличное задание	10-1
10.2	Параметрическое задание	10-1
10.3	Учет зависимости формы пика от энергии	10-2
10.4	Особенности описания формы гамма-линии. Комптоновская ступенька	10-3
11	Градуировка по эффективности регистрации	11-1
11.1	Аппроксимация «кривой» эффективности	11-1
11.2	Учет различия в плотности градуировочных источников и измеряемых проб	11-2
11.3	Особенности градуировки в LsrmCustoms	11-2
12	Учет фона спектрометра	12-1
12.1	Поканальное вычитание фона	12-1
12.2	Вычитание фоновых вкладов в пики	12-1
12.3	Случай неизвестного фона в LsrmCustoms	12-1
13	Расчет дозовых характеристик	13-1
14	Представление результатов расчета активности	14-1
15	Метод эталонных спектров	15-1
15.1	Алгоритм расчета значений активности и ее погрешности	15-1
15.2	Алгоритм расчета матрицы чувствительности	15-2
15.3	Совместные гамма-бета измерения	15-3

1 Введение

В настоящем документе описаны основные функции обработки спектральной информации, используемые в программном обеспечении LSRM.

Сложность процедур обработки и многообразие решаемых задач не позволяют создать полностью автоматизированную систему обработки на все случаи жизни. Зачастую правильность получаемых результатов зависит от квалификации оператора и его понимания процедур расчета, используемых при обработке спектра.

Документ рассчитан на квалифицированного пользователя, стремящегося оптимизировать работу программы для решения своей конкретной задачи и правильно интерпретировать полученные результаты.

Не все функции обработки, описанные здесь, используются в конкретных приложениях. Хотя спектрометрический анализ специфичен для различных видов излучения и используемых блоков детектирования, большинство функций обработки спектральной информации являются общими.

2 Разметка спектра – определение положений пиков

Под разметкой спектра понимается установление положений пиков, которые будут использоваться на последующих этапах обработки. Пики могут быть отмечены различными способами.

2.1 Автоматический поиск пиков

В этом режиме сканируется интересующий участок спектра, и на основе статистических критериев определяются положения пиков в спектре. Реализовано два способа сканирования, описанные ниже.

2.1.1 Быстрый поиск – «свертка»

В основе этой процедуры поиска пиков лежит анализ значения «свертки» спектра с фильтром, параметры которого определяются полушириной пика. Фильтр рассчитывается для каждого участка спектра, исходя из калибровки по полуширине. Результаты поиска будут правильными, если используемая калибровка по полуширине соответствует реальной.

Процедура поиска пиков ведется автоматически. Результатом поиска являются положения пиков, интенсивность которых превышает заданный *уровень обнаружения*.

Уровень обнаружения задается в файле конфигураций и может быть изменен администратором. При этом следует иметь в виду, что увеличение уровня обнаружения будет приводить к пропуску истинных пиков, с другой стороны уменьшение будет приводить к появлению ложных пиков, обусловленных статистическими флуктуациями в спектре. Рекомендуемое значение уровня обнаружения - 3.

2.1.2 Минимизация погрешности

В этом методе для каждого канала спектра рассчитывается величина $\frac{\Delta S}{S}$, где $S, \Delta S$ - значения площади и ее погрешности, найденные в предположении пика в этом канале. Оценки находятся в результате аппроксимации соответствующего участка спектра. Ищутся точки с локальным минимумом величины $\frac{\Delta S}{S}$. Вблизи минимума зависимость $\frac{\Delta S}{S}(N)$ аппроксимируют параболой и находят точное положение минимума N_m и, если $\frac{\Delta S}{S}(N_m)$ больше заданного *уровня обнаружения*, N_m сопоставляют с положением максимума пика. Затем проводят повторное сканирование с учетом найденных на первом проходе пиков. На этом этапе могут быть обнаружены пики, не найденные на первом этапе, если их положения были близки. Сканирование будет продолжаться до тех пор, пока после очередного прохода перестанут обнаруживаться новые пики.

Этот метод может быть использован лишь тогда, когда спектрометр откалиброван по форме пика. В случае неадекватной модели процедура может привести к обнаружению заведомо ложных пиков вблизи истинных.

Достоинством метода является высокая разрешающая способность при разделении мультиплетов.

2.2 Интерактивный режим

В этом режиме оператор отмечает пики вручную, пользуясь какими-то своими соображениями. Они могут быть установлены оператором с использованием опции «Вставить пики». Этот режим обычно используется, когда процедура поиска дает неверные результаты. Это происходит при первичной настройке системы, когда не проведены калибровки и параметры поиска не соответствуют реальным; при наличии у оператора априорной информации о наличии каких-то линий, например, не разрешенных процедурой поиска

2.3 Линии из библиотеки

В этом случае пики устанавливаются в соответствии с предполагаемым спектром данной пробы. Этот спектр задается выбранной пользователем библиотекой радионуклидов и перечнем радионуклидов из этой библиотеки. Такой режим обладает наибольшей чувствительностью и надежностью, т.к. позволяет выделить пики, не разделенные процедурой автоматического поиска. Кроме того, при расчете площадей пиков используется информация о соотношении

интенсивностей гамма - линий одного радионуклида. Очевидно, что в этом режиме обязательна правильная энергетическая градуировка.

Этот способ разметки может быть использован лишь при анализе проб определенного радионуклидного состава.

3 Локализация информативных участков спектра (разбиение на зоны)

После установления положений пиков производится локализация информативных участков. Под информативным участком спектра мы понимаем участок, содержащий один или несколько пиков, которые обрабатываются совместно. Т.к. фоновую подставку под пиками описывают, как правило, одним полиномом, соображения адекватности модели накладывают ограничение на максимальную длину участка Lz_{max} . Кроме того, накладывается ограничение на максимальное число пиков на участке Npz_{max} . В ранних версиях ПО эти ограничения устанавливались жестко, непосредственно в программном коде. В настоящее время Lz_{max} и Npz_{max} являются параметрами конфигурации и могут быть изменены пользователем.

Реализовано несколько процедур разбиения спектра на зоны.

3.1 Ограничение по Lz_{max} и Npz_{max}

Разбиение на информативные участки начинается с больших энергий. Границы информативного участка определяются как

$$\{P-P_L, P+P_R\},$$

где:

P - положение максимума линии;

P_L, P_R - левая и правая границы пиков в долях полуширины.

Значения P_L, P_R установлены в конфигурации, и могут быть изменены пользователем.

Характерные значения P_L, P_R для сцинтилляционных спектрометров составляют $\sim 1-2$ полуширин.

Если следующая линия находится ближе, чем P_L, P_R от предыдущей, то она включается в информативный участок, и он, соответственно, расширяется. Это происходит до тех пор, пока очередная линия не оказывается дальше, чем P_L, P_R от предыдущей, либо число линий на участке становится больше Np_{max} , либо длина участка оказывается слишком большой ($> Lz_{max}$).

3.2 Зона вокруг пика

В этом случае каждому (почти каждому) пику сопоставляется зона. При этом в обработку включаются пики, перекрывающиеся с этой зоной. Эти пики могут не полностью находиться внутри зоны.

4 Расчет параметров пиков путем аппроксимации информативных участков (подгонка)

Одним из распространенных методов обработки спектральной информации является аппроксимация спектра модельной функцией, которая представляется в виде суммы пиков и некоей т.н. фоновой подставки под ними, которая, как правило, описывается полиномом. Это естественным образом приводит к разбиению спектра на информативные участки, ограниченные по длине, так как на слишком больших участках трудно описать поведение фоновой подставки полиномом невысокой степени. При традиционном подходе χ^2 -функционал составляется для каждого участка отдельно и минимизация проводится последовательно для каждого участка.

$$\chi^2 = \sum_i \left[Y_i - \sum_K S_K \cdot \psi(i, \vec{p}_k) - F(i, \vec{f}) \right]^2 \cdot w_i \quad \text{Формула 4-1}$$

Здесь:

- Y_i - отсчет в i -ом канале;
- $\psi(i, \vec{p}_k)$ - модельная функция, описывающая k -ый пик с вектором параметров \vec{p}_k ;
- S_K - площадь K -ого пика;
- $F(i, \vec{f})$ - функция, описывающая фоновую подставку. \vec{f} - вектор коэффициентов
- w_i - весовые коэффициенты, как правило $\sim \frac{1}{(\Delta Y_i)^2}$;

В стандартном режиме расчет ведется по упрощенной модели, когда варьируемыми параметрами являются лишь площади пиков. При этом положения пиков берутся из результатов поиска, а значения полуширины (**FW**) рассчитываются из зависимости разрешения спектрометра от энергии, которая определяется при калибровке спектрометра по полуширине 9. Результаты обработки информативных участков спектра представляются на экране в виде графика, отображающего экспериментальный спектр совместно с результатами аппроксимации, так что оператор может визуально оценить качество подгонки. Кроме того, выводится и соответствующий количественный критерий - нормированное на число степеней свободы

значение величины χ^2 :

$$\chi_{norm}^2 = \frac{\chi^2}{n - n_p - n_f - 1}, \quad \text{Формула 4-2}$$

где

n – число точек на аппроксимируемом участке,

n_p – число пиков на участке,

n_f – степень фонового полинома.

При соответствии модели экспериментальным данным $\chi_{norm}^2 \approx 1$.

4.1 Минимизация по полуширине

Если установлен флаг «минимизации по полуширине», то при аппроксимации варьируемыми параметрами становятся также полуширины пиков.

В этом режиме полуширина модельной функции меняется с шагом *StFw-шаг при минимизации*, установленным в параметрах конфигурации. При каждом следующем шаге полуширины всех пиков на участке умножаются (или делятся) на **StFw**. Полуширина определяется из условия минимума величины χ^2 .

Как правило, этот режим используется при калибровке по полуширине.

4.2 Учет соотношений интенсивности

При выборе соответствующего флага в параметрах конфигурации аппроксимация может вестись с использованием соотношений интенсивностей между линиями одного радионуклида.

Учет соотношений интенсивностей основан на формуле, связывающей площади линий одного нуклида:

$$\frac{S_1}{S_2} \approx \frac{I_1 \cdot \varepsilon_1}{I_2 \cdot \varepsilon_2}, \quad \text{Формула 4-3}$$

Здесь

S, I, ε - площади, интенсивности и эффективности регистрации соответствующих линий.

Эта формула справедлива естественно с точностью до погрешностей, интенсивности и эффективности.

Чтобы учесть эту формулу при аппроксимации, χ^2 - функционал дополняется соответствующими членами, минимальными при выполнении соотношений интенсивностей.

Различаются два режима учета соотношений интенсивностей:

- учет соотношений интенсивностей внутри участка,
- учет соотношений интенсивностей по всему спектру.

В первом режиме учитываются соотношения интенсивностей только между пиками одного радионуклида, расположенными внутри одного информативного участка. Во втором режиме информация о площадях пиков уже обработанных участков спектра используется при обработке текущего участка.

В программе можно поменять значения коэффициентов, характеризующих влияние членов, ответственных за оба режима. Теоретически правильные значения этих коэффициентов равны единице. На практике зачастую из-за некорректных значений погрешностей интенсивностей или эффективности следует уменьшить влияние этих членов. Полностью отключить какой-то режим можно, установив значение соответствующего коэффициента равным нулю.

4.3 Подгонка идентифицированных линий с одновременным расчетом активности.

При наличии на участке идентифицированных линий одного или нескольких радионуклидов можно дополнить уравнение (4-1) дополнительным членом, введя в качестве параметра минимизации значения активности идентифицированных радионуклидов, и записать уравнение для χ^2 - функционала для обрабатываемого участка в виде:

$$\chi^2 = \sum_i \left[Y_i - \sum_K S_K \cdot \psi(i, \bar{p}_k) - F(i, \bar{f}) \right]^2 \cdot w_i + \sum_L \frac{\left[S_L - A_M \cdot I_L^M \cdot \varepsilon(E_L) \right]^2}{\left[\Delta I_L^M \cdot \varepsilon(E_L) + \Delta \varepsilon(E_L) \cdot I_L^M \right]^2 \cdot A_M^2} \quad \text{Формула 4-4}$$

Здесь

L – суммирование по линиям идентифицированных нуклидов ;

A_M - активность M-го радионуклида,

$I_L^M, \Delta I_L^M$ интенсивность и погрешность L-ой линии M-го радионуклида.

$\varepsilon(E_L)$ - эффективность регистрации при энергии E_L

В результате минимизации рассчитываются как параметры пиков, так и активности идентифицированных радионуклидов. При этом автоматически учитываются соотношения интенсивностей между линиями одного радионуклида.

4.4 Подгонка с априорной информацией о значениях параметров.

К таким параметрам относятся, как правило, значения активности и значения площади некоторых пиков.

Значения активности некоторых радионуклидов могут быть известны либо из других экспериментов, либо из результатов расчета других участков спектра.

Априорное знание площадей пиков чаще всего используется при обработке участков спектра, содержащих фоновые линии, если фон был предварительно измерен.

Априорная информация такого рода может быть учтена добавлением к χ^2 -функционалу соответствующих членов типа:

$$\sum_J \frac{(S_J - \hat{S}_J)^2}{\Delta \hat{S}_J^2} + \sum_I \frac{(A_I - \hat{A}_I)^2}{\Delta \hat{A}_I^2}, \quad \text{Формула 4-5}$$

где $\hat{S}_J, \Delta \hat{S}_J$ - априорные оценки площади и ее погрешности,

$\hat{A}_I, \Delta \hat{A}_I$ - априорные оценки активности и ее погрешности

4.5 Подгонка нескольких участков одновременно.

Если у нас имеется несколько информативных участков, на которых имеются линии одного и того же идентифицированного радионуклида, то возможно написать χ^2 -функционал для этих

участков в виде суммы членов типа (4-3). В частности, можно написать χ^2 -функционал для всего спектра в целом.

В этом случае в результате минимизации мы получим значения активности идентифицированных радионуклидов, рассчитанные по всему спектру.

В том случае, когда участки соприкасаются друг с другом, можно наложить условие на непрерывность значений фоновой подложки под пиком и ее первой производной на границах участков.

5 Идентификация радионуклидов

Первичная идентификация радионуклидов производится сравнением энергий пиков, обнаруженных в спектре, с табличными значениями энергий линий из списка радионуклидов. В качестве области поиска может использоваться как весь набор нуклидов из базы данных, так и его подмножество, то есть список нуклидов, задаваемый пользователем, или определенный на предыдущих этапах идентификации.

Поиск проводится в пределах некоторого энергетического интервала, называемого обычно «**окном идентификации**». Этот параметр устанавливается в параметрах конфигурации и может изменяться пользователем. Значение окна идентификации ΔE может быть как фиксированным, так и изменяющимся от энергии. Значение его зависит от погрешности определения энергии и различно для разных спектрометров. Характерное значение $\Delta E \sim 1$ кэВ для ППД-спектрометров и $\sim 10-20$ кэВ для сцинтилляционных.

Окно идентификации связано с энергией линии E следующим соотношением:

$$\Delta E = \frac{\Delta_0 E}{\sqrt{661}} \times \sqrt{E}; \quad \text{Формула 5-1}$$

Здесь:

$\Delta_0 E$ - значение окна идентификации для линии ^{137}Cs с энергией 661 кэВ, которое является параметром конфигурации и может быть изменено пользователем. Характерное значение $\Delta_0 E$ для сцинтилляционных спектрометров составляет ~ 10 кэВ.

Решающими факторами успешности процедуры идентификации являются правильность градуировочной характеристики спектрометра по энергии и полнота библиотеки радионуклидов.

Очевидно, что чем меньше перечень радионуклидов, тем надежнее процедура идентификации и точнее расчет активности. Если есть какая-то информация, позволяющая уменьшить число анализируемых радионуклидов, ее желательно использовать. Например, можно ограничить область поиска только нуклидами, обнаруженными на предыдущих этапах идентификации, или любым другим списком нуклидов.

Тем не менее, на практике мы чаще всего сталкиваемся с неоднозначной идентификацией, когда две или более линий попадают в одно окно идентификации. Радионуклиды, линии которых претендуют на один и тот же пик в спектре, мы будем называть *интерферирующими*. Расчет активности при наличии интерферирующих нуклидов производится по специальной процедуре, описанной в 6.2.

Чтобы сократить число случаев неоднозначной идентификации, используются дополнительные критерии, такие как фильтр по значениям интенсивности (табличным или зарегистрированным), проверка энергетического спектра нуклида, фильтр по периоду полураспада и т.д.

5.1 Фильтр по табличным значениям интенсивности

Фильтрация линий по **табличным интенсивностям** позволяет исключить из результатов идентификации слабые линии, интенсивность которых меньше задаваемого числа процентов от интенсивности самой сильной линии нуклида. В этой процедуре используются табличные, не пересчитанные значения интенсивности из базы данных нуклидов. На рисунке в качестве примера приведены результаты идентификации линии 665.447 кэВ в спектре ^{226}Ra без фильтра по интенсивности (слева) и с фильтром в 1% (справа).

Идентификация нуклидов

E	Нуклид / П...	A	A / Нуклид	T
665.45	Bi-214 ...	2601.97 ± 260		
665.453 ...	Bi-214 ...	2601.97 ± 260		
665.21 ± ...	Nd-151 ...			
665.3 ± 0...	Tb-153 ...			
665.3 ± 0.1	Tb-153 ...			
665.4 ± 0.2	Bi-196 ...	1249.55 ± 180		
665.72 ± ...	Kr-89 ...	38.46 ± 4		
665.424 ...	Eu-146 ...	525.42 ± 50		
665.6 ± 0.1	Ce-135 ...	15797.70 ± ...		
665.33 ± ...	Nd-153 ...	5637.82 ± 1...		
665.0 ± 1.0	Sm-155 ...	38.46 ± 4		
665.8 ± 0.3	Ag-121 ...	3511.13 ± 500		
665.0 ± 1.0	Tb-163 ...	44.19 ± 5		
665.8 ± 0.3	Eu-156 ...	3369.37 ± 900		
665.8 ± 0.3	Tb-148 ...	4746.0 ± 1800		
665.42 ± ...	Hg-195 ...	248.16 ± 27		
665.2 ± 0.5	Tm-161 ...	1519.71 ± 160		
665.7 ± 0.1	Ag-100 ...	1784.5 ± 600		
665.0 ± 0.3	Ta-170 ...	1070.68 ± 240		
665.8 ± 0.2	Br-80 1 ...	1689.3 ± 800		
665.8 ± 0.4	Ho-148 ...	5693.9 ± 2300		
665.45 ± ...	Sr-100 ...	2540.29 ± 300		
665.7 ± 0.1	Tc-107 ...	2540.29 ± 300		
665.7 ± 0.1	Ag-100 ...	292.34 ± 70		
665.1 ± 0.2	Ag-117 ...	283.75 ± 60		
665.4 ± 0.7	Ge-77 ...			
665.7 ± 0.5	Ho-160 ...			
665.0 ± 0.8	Tm-160 ...			
665.0 ± 0.3	Ac-232 ...			
665.7 ± 0.4	Sr-76 ...			
665.54 ± ...	Ar-34 ...			
665.0 ± 1.0	As-76 ...			
665.34 ± ...	As-76 ...			
665.9 ± 0.3	Ge-81 ...			
665.9 ± 0.3	Ge-81 ...			
665.9 ± 0.3	Ge-81M ...			
		703.049		
		742.513		
		806.16		
		839.016		
		865.361		
		934.021		
		1001.017		
		1051.456		
		1070.07		
		1103.73		
		1155.148		
		1207.542		
		1280.844		
		1350.017		
		1385.216		
		1401.389		
		1543.32		

По базе данных: Показывать ПОВ Показывать ПДВ Показывать пики сумм Показывать данные из БД

Окно идентификации (кэВ): 0.2

Фиксир. Зав. от энергии

Значности энергий названо нуклидом: 1.0E+0 %
1.0E-2 %

Исключить линии в спектре

Результаты для:

Период полураспада:

- 13.54 (ye)
- 68.9 (ye)
- 1.4E+10 (ye)
- 453.0 (ds)
- 1608.0 (y)
- 114.43 (c)
- 63.0 (ye)
- 119.0 (se)
- 2.01 (min)
- 2.24 (min)
- 72.8 (sek)
- 5.34 (sek)
- 0.78 (sek)
- 0.84 (sek)
- 26.24 (hc)
- 5.13 (min)
- 19.9 (min)
- 17.68 (mi)

Рисунок 5-1. Фильтр по табличной интенсивности.

5.2 Фильтр по интенсивности зарегистрированного гамма-излучения

Фильтр по интенсивности зарегистрированного гамма-излучения I_γ отличается от фильтра по табличным значениям интенсивности тем, что в процедуре используются интенсивности, нормированные на эффективность регистрации:

$$I_\gamma = I * \varepsilon(E) \quad \text{Формула 5-2.}$$

Таким образом можно исключать слабые линии с учетом, например, ослабления в материале образца или защитного контейнера.

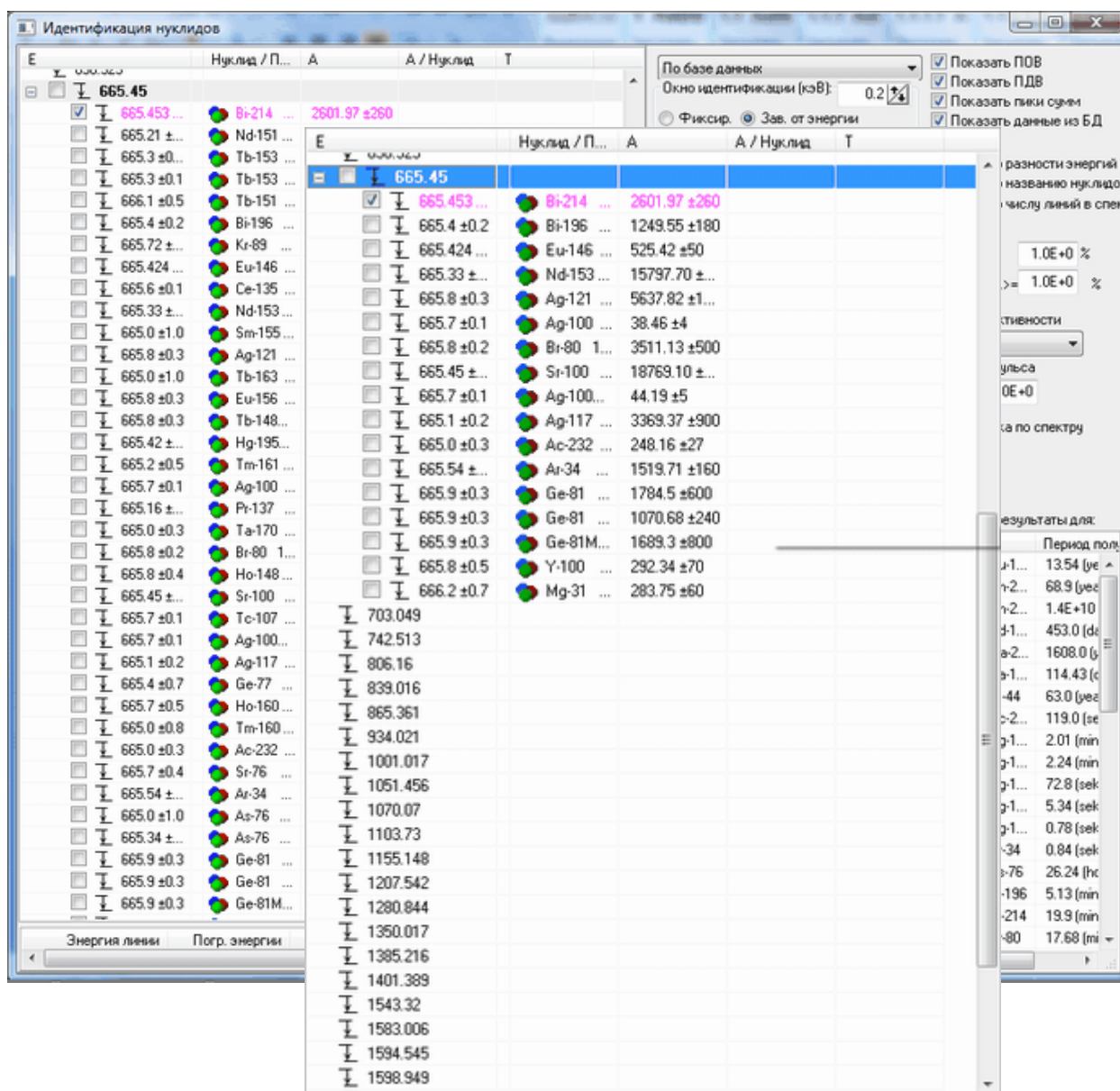


Рисунок 5-2. Фильтр по интенсивности с учетом эффективности регистрации.

5.3 Проверка энергетического спектра нуклида

Проверка **энергетического спектра** позволяет учитывать соотношения интенсивностей всех линий нуклида. Смысл проверки заключается в том, что если нуклид идентифицирован по какой-то линии, и в то же время не найдены другие, сильные линии, он исключается из списка идентифицированных нуклидов.

Реализация алгоритма состоит в следующем. Для каждой линии анализируемого радионуклида из данных спектра находится оценка площади и ее погрешности S_i , dS_i и рассчитывается нижний предел измеряемой активности

$$A_{min} = \min \left(\frac{|S_i| + dS_i}{I_i \varepsilon(E_i)} \right) \quad \text{Формула 5-3}$$

Если для линии, соответствующей A_{min} , в спектре существует пик, т.е. $S_{min} > dS_{min}$, то нуклид считается потенциально обнаруженным в спектре.

5.4 Фильтр по периоду полураспада

Если нуклид N был идентифицирован по какой-то линии, то фильтр по периоду полураспада позволяет определить, может ли в результате распада цепочки образоваться нуклид с активностью A_N , которая определяется по найденной линии. Это позволяет убрать из анализа

короткоживущие нуклиды, которые должны были распасться ко времени измерения. Проверка проводится для двух возможных периодов времени T_{Min} и T_{Max} , прошедших с момента аттестации до момента измерения. Предполагается, что если активность радионуклида на оба эти времени аттестации $A_N(T_{\text{Min}})$ и $A_N(T_{\text{Max}})$ больше A_{Max} , то нуклид N не может образоваться в результате распада такой цепочки.

Такая проверка учитывает только распадные процессы и не учитывает активационные. При рассмотрении распадных процессов всегда можно считать, что активность любого нуклида ограничена некоторым предельным значением A_{Max} , который зависит от области происхождения радиоактивного источника (естественный, техногенный и т.д.).

На рисунке в качестве примера приведены результаты идентификации линии 665.447 кэВ в спектре ^{226}Ra без этого фильтра (окно слева) и с этим фильтром (справа). Как известно, эта линия является линией ^{214}Bi , образующегося в результате распада ^{226}Ra или ^{230}Th , и использование этой информации позволяет значительно сократить список потенциально обнаруженных нуклидов.

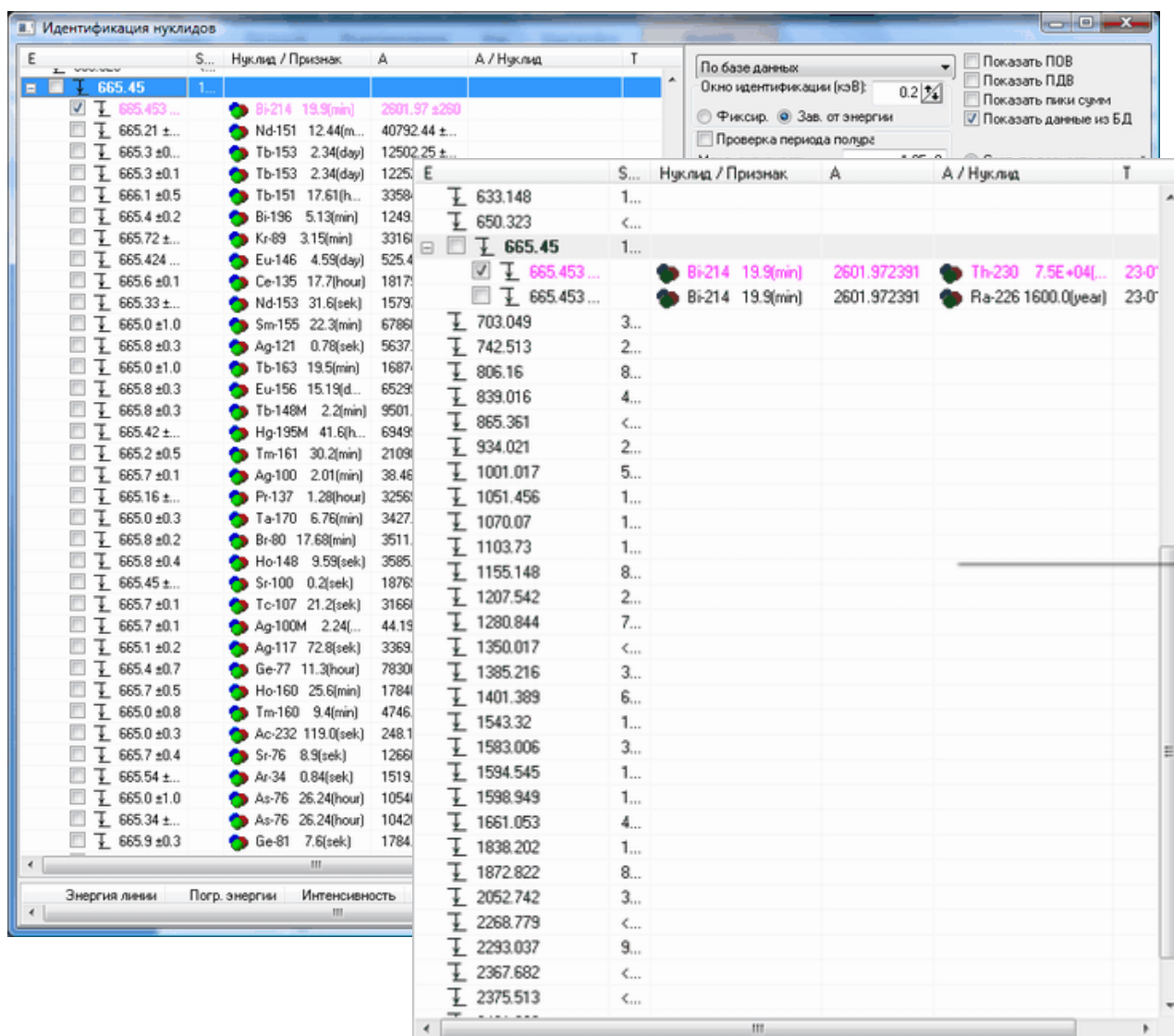


Рисунок 5-3. Фильтр по периоду полураспада.

5.5 Проверка цепочек распада

В зависимости от области поиска (по списку нуклидов или по всей базе данных) используются разные алгоритмы проверки цепочек.

В первом случае для каждого нуклида N_i из списка рассчитывается цепочка распада (с использованием всей базы данных). Далее проверяется, является ли идентифицированный нуклид N дочерним для N_i .

При идентификации по всей базе данных для каждого нуклида N из списка потенциально обнаруженных рассчитывается цепочка родительских нуклидов (также с использованием всей

базы). Для каждого нуклида N_i из этой цепочки рассчитывается цепочка дочерних нуклидов. Далее проверяется, является ли идентифицированный нуклид N дочерним для N_i .

На рисунке в качестве примера приведены результаты этой процедуры для линии 665.447 кэВ в спектре ^{226}Ra . Эта линия является линией ^{214}Bi , образующегося в результате распада ^{226}Ra .

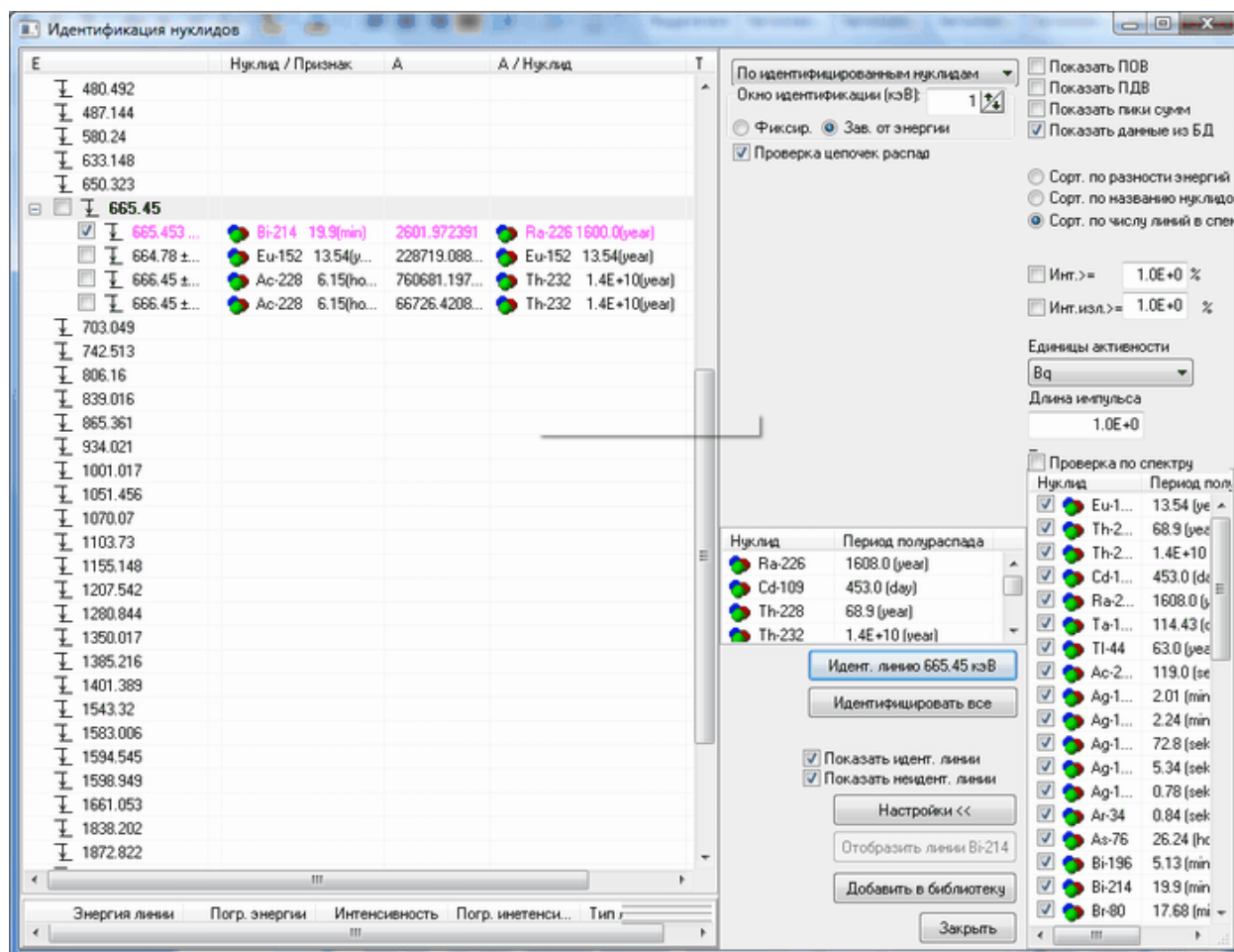


Рисунок 5-4. Проверка цепочек.

5.6 Проверка нескольких линий в спектре

Если предполагается, что две или более линий могут принадлежать одному нуклиду, можно использовать проверку нескольких линий одновременно или проверку любого подмножества из заданного списка линий. Если при этом проверяется период полураспада, то активность нуклида рассчитывается по каждой проверяемой линии. Радионуклид считается потенциально обнаруженным, каждое полученное значение активности не превосходит максимальную.

На рисунке представлены результаты одновременной идентификации линий 665.45, 806.16 и 1385.216 кэВ в спектре ^{226}Ra с учетом цепочек распада. Эти линии являются линиями ^{214}Bi , образующегося в результате распада ^{214}Pb , который в свою очередь является дочерним продуктом ^{226}Ra .

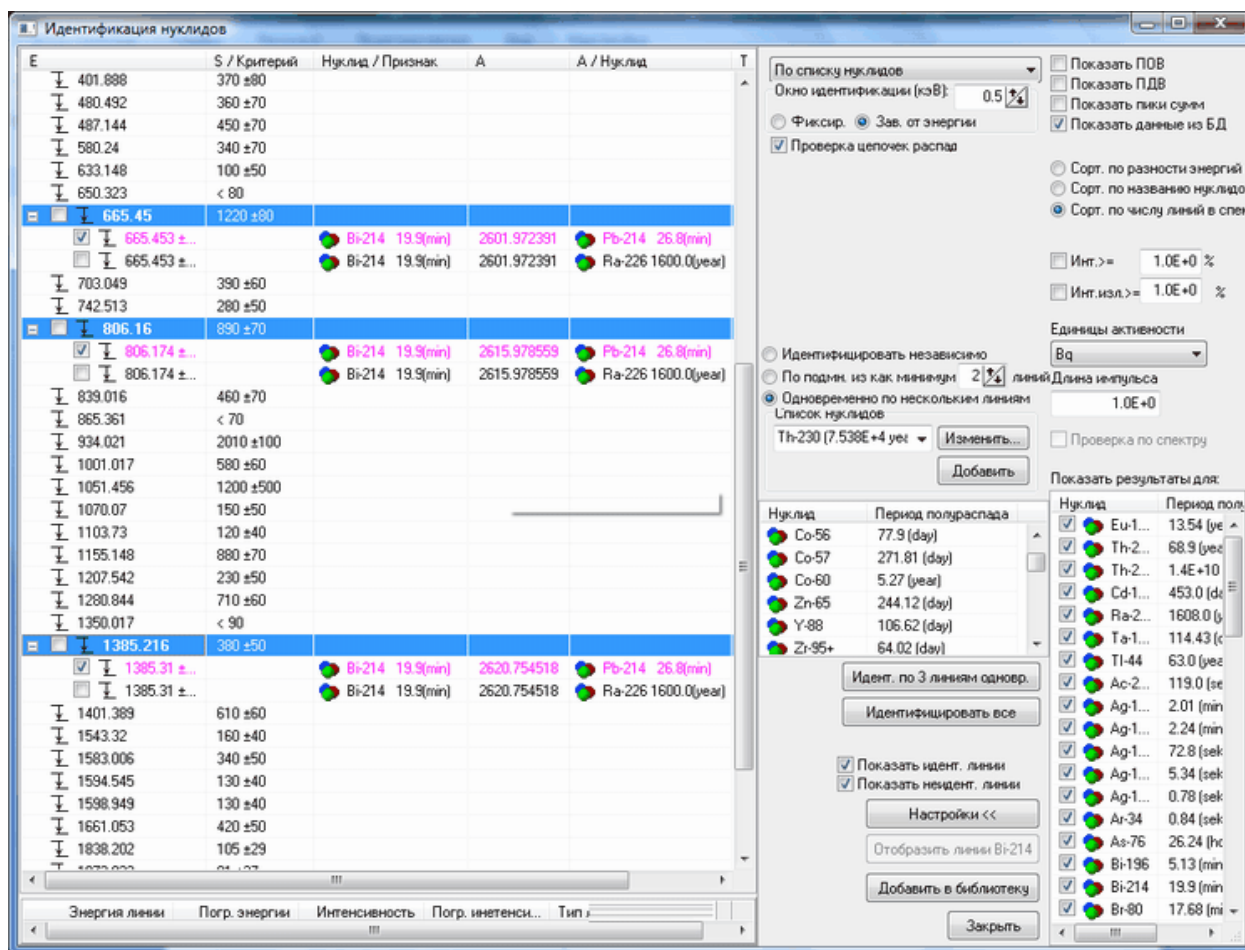


Рисунок 5-5. Результаты одновременной идентификации линий 665.45, 806.16 и 1385.216 кэВ в спектре ^{226}Ra .

5.7 Поиск пиков одиночного, двойного вылета, пиков сумм

Кроме пиков полного поглощения, энергия которых равна энергии линии, в спектре могут присутствовать пики случайного и истинного суммирования, пики вылета и т.д. Точная количественная оценка вклада этих процессов в спектр достаточно трудоемка. Результаты идентификации в данном случае можно рассматривать лишь как указание на возможность образования пиков вследствие вышеуказанных процессов.

Идентифицируемая линия с энергией E может являться

- **пиком одиночного или двойного вылета** для другого пика в спектре, энергия которого (E_{SE} или E_{DSE} соответственно) связана с энергией E соотношением $E_{SE} = E - 511$ или $E_{DSE} = E - 1022$. Формула 5-4.

- **пиком случайного суммирования** для двух других пиков в спектре, энергии E_1 и E_2 которых связаны с энергией E соотношением,

$$E = E_1 + E_2$$

Формула 5-5,

а площади S в единицу времени удовлетворяют соотношению

$$S_E \sim S_{E_1} * S_{E_2} * L > \Delta S_E,$$

Формула 5-6,

где L – длина импульса, т.е. вероятность регистрации гамма-кванта с энергией E пропорциональна вероятности одновременной регистрации в интервале времени L гамма-квантов с энергиями E_1 и E_2 .

- **пиком сумм**, образующимся в результате **истинного суммирования** двух гамма-квантов с энергиями E_1 и E_2 , испускаемых в результате распада одного нуклида и связанных с энергией E соотношением

$$E = E_1 + E_2$$

Формула 5-7.

При этом площади всех трех линий должны удовлетворять соотношению:

$$S_U \sim \text{Min}(S_1 * \varepsilon_2, S_2 * \varepsilon_1) > \Delta S_E$$

Формула 5-8,

которое позволяет определить, дают ли линии с энергиями E_1 и E_2 существенный вклад в пик сумм. Выполнение условий (1-7) и (1-8) не может гарантировать, что линия с энергией E

обязательно является пиком сумм, образующимся в результате истинного суммирования, т.к. не проводится анализа схемы распада нуклида.

Все перечисленные выше проверки по энергии проводятся с учетом окна идентификации.

На рисунке в качестве примера приведены результаты этой процедуры для спектра ^{226}Ra . Так, линия 839.015 кэВ может потенциально являться пиком одиночного вылета для линии 1350.092 кэВ, или пиком сумм, образующимся в результате случайного суммирования линий 351.922 и 487.162 кэВ, линия 742.513 кэВ – пиком двойного вылета для линии 1764.551 кэВ, а линия 480.487 кэВ - пиком сумм, образующимся в результате истинного суммирования линий 185.97 и 295.221 кэВ.

Э	S / Критерий	Нуклид / Признак	A	A / H ₂
386.88	420 ±80			
388.941	660 ±90			
401.888	370 ±80			
480.492	360 ±70			
480.602	184.298	СУМ 241+238		
480.602	286.268	СУМ 241+238		
481.191	143452.206	СУМ 185+295		
481.191	287.807	ИСТ 185+295		
480.034	131.964	СУМ 205+274		
481.261	183.681	СУМ 79+401		
487.144	450 ±70			
580.24	340 ±70			
633.148	100 ±50			
650.323	< 80			
665.45	1220 ±80			
703.049	390 ±60			
742.513	280 ±50			
1764.551	6490 ±160	ПДВ		
742.56	5274.888	СУМ 77+665		
743.382	80.266	СУМ 256+487		
743.02	80.498	СУМ 92+650		
742.56	1221.37	СУМ 665+77		
806.16	890 ±70			
839.016	460 ±70			
839.869	311.243	СУМ 764+74		
839.71	311.243	СУМ 764+74		
838.435	414.09	СУМ 768+70		
839.066	6988.052	СУМ 351+487		
838.642	1670.454	СУМ 609+229		
839.869	77.87	СУМ 74+764		
839.71	660.345	СУМ 74+764		
839.063	110.766	СУМ 258+580		
1350.017	< 90	ПОВ		
865.361	< 70			
934.021	2010 ±100			

Рисунок 5-6. Результаты поиска пиков одиночного, двойного вылета, пиков сумм в спектре ^{226}Ra .

6 Расчет активности

Реализовано несколько способов расчета активности, используемых в зависимости от степени идентификации пиков в спектре.

6.1 Расчет активности при однозначной идентификации пиков.

В этом случае каждому пику соответствует вполне определенная линия какого-то радионуклида и активность i -го нуклида по j -ой линии оценивается по формуле:

$$A_{ij} = \frac{S_j}{Y_{ij}}, \quad \text{Формула 6-1}$$

где

S_j - нормированная на время площадь j -ой линии;

$Y_{ij} = I_{ij} \cdot \varepsilon(E_{ij})$ - интенсивность (с учетом эффективности регистрации) j -ой линии i -го нуклида.

Погрешность оценивается по формуле:

$$\Delta A_{ij}^2 = (\Delta S_j \cdot I_{ij} \cdot \varepsilon)^2 + (\Delta I_{ij} \cdot S_j \cdot \varepsilon)^2 + (\Delta \varepsilon \cdot S_j \cdot I_{ij})^2. \quad \text{Формула 6-2}$$

Активность рассчитывается по всем представительным линиям предполагаемо присутствующих радионуклидов. Представительные линии отмечены в библиотеке признаком «Y».

Результирующее значение активности какого-то нуклида рассчитывается как средневзвешенное от значений активности рассчитанных по всем линиям.

В качестве погрешности принимается максимальное значение из погрешности разброса и средневзвешенного.

6.2 Расчет активности при наличии интерферирующих линий (Матричный метод).

Эта процедура используется, когда вклад в площадь пика обусловлена несколькими линиями.

$$\tilde{S}_i = A_1 \cdot Y_{1i} + A_2 \cdot Y_{2i} + \dots + A_m \cdot Y_{mi}. \quad \text{Формула 6-3}$$

Такая ситуация возникает после поиска пиков и их неоднозначной идентификации. Оценка активности в этом случае производится одновременно по всем потенциально обнаруженным радионуклидам и по всем линиям спектра, исходя из минимума χ^2 -функционала

$$\chi^2(\bar{A}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (S_i - \sum_{j=1}^m A_j \cdot Y_{ji})^2 \cdot W_i; \quad \text{Формула 6-4}$$

где: n – количество пиков, участвующих в расчете;

m – количество идентифицированных радионуклидов

A_j – активность j -го радионуклида;

$Y_{ij} = I_{ij} \cdot \varepsilon(E_{ij})$ - интенсивность (с учетом эффективности регистрации) линии j -го

радионуклида, которая попадает в i -ый пик (Y_{ji} равны 0 для несовпадающих с пиком линий);

W_i – веса, учитывающие погрешности площади пика и выходов линий:

$$W_i = (\Delta S_i)^2 + \sum_j (\tilde{A}_j \cdot \Delta Y_{ij})^2. \quad \text{Формула 6-5}$$

Минимизация этого функционала сводится к решению системы линейных уравнений:

$$\hat{P} \cdot \bar{A} = \bar{Q}. \quad \text{Формула 6-6}$$

$$\text{Здесь } P_{ij} = \sum_{k=1}^n Y_{ik} \cdot Y_{kj} \cdot W_k,$$

Формула 6-7

$$Q_i = \sum_{k=1}^n Y_{ik} \cdot S_k \cdot W_k.$$

Решение этой системы, использующее обращение матрицы \hat{P} , осуществляется методом Холецкого, где производится треугольное разложение матрицы \hat{P} .

Обращение матрицы \hat{P} позволяет вычислить погрешности значений активностей.

6.3 Расчет активности на этапе подгонки.

В этом случае при подгонке информативного участка в число параметров подгонки включаются значения активности идентифицированных радионуклидов, см. разделы 4.3, 4.4, 4.5

7 Сценарии расчета активности

Расчету активности предшествуют операции поиска пиков, разметки спектра, и подгонки. Входными параметрами для расчета являются, как правило, значения площадей пиков, их энергии, библиотека радионуклидов, эффективность регистрации.

Непосредственно расчет активности идет в несколько этапов зачастую с переразметкой и переподгонкой спектра. Общая схема расчета – идентификация радионуклидов, предварительная оценка активности, выставление необнаруженных пиков идентифицированных радионуклидов, переподгонка спектра с учетом выставленных и окончательная оценка активности.

Реализовано несколько сценариев такого расчета активности.

7.1 Matrix

Проводится процедура идентификации предварительно обнаруженных пиков. Если установлен флаг вычитания фона, то производится вычитание фоновых вкладов в пики (12.2). Матричным методом (6.2) проводится предварительный расчет активности.

Выставляются в спектр необнаруженные поиском линии идентифицированных нуклидов, МДА которых ниже значений активности, рассчитанных на предыдущем этапе. Производится переразметка и переподгонка спектра с учетом выставленных линий, вычитается фон. Матричным методом проводится окончательный расчет активности.

7.2 ZoneByZone

Проводится процедура идентификации предварительно обнаруженных пиков. Если установлен флаг вычитания фона, то выставляются фоновые линии. Производится последовательная подгонка зон с одновременным расчетом активности радионуклидов (см.4.3) и с использованием априорной информации об активности от предыдущих, уже обработанных зон и площадях фоновых линий (из фонового спектра), см. 4.4.

После первого прохода на основе оценки значений активности выставляются те линии идентифицированных радионуклидов, МДА, которых для данного спектра не превышает рассчитанного на первом этапе значения активности соответствующего радионуклида. Подгонка проводится с учетом всех линий спектра, аналогично первому этапу, начиная с зон с высокими энергиями. Сначала обрабатываются те зоны, для которых достаточно информации для определения значений параметров. В процессе расчета от зоны к зоне используется накопленная информация, значения активности и погрешность уточняются, и погрешность становится минимальной к концу расчета, когда обработаны все зоны.

Результатом расчета являются значения активности, полученные после обработки всех зон. Т.к. определяются значения площадей всех пиков, то рассчитывается значение активности по каждой линии. Эта информация является справочной и приводится для анализа корректности результатов расчета.

7.3 AllZones

Сценарий аналогичен ZoneByZone, единственное отличие заключается в одновременной подгонке по всем зонам (см.4.5).

7.4 AllZonesSew

Расчет производится аналогично AllZones. При подгонке накладывается условие на непрерывность значений фоновой подложки под пиком и ее первой производной на границах участков (см. 4.5).

8 Калибровка по энергии

Энергетическая градуировочная характеристика описывается полиномом вида

$$E(p) = \sum_{i=0}^k a_i \cdot P^i ; \quad \text{Формула 8-1}$$

где: P – положение пика в каналах
 a_i - градуировочные коэффициенты.
 $k \leq 3$ – степень полинома,

Для нахождения градуировочных коэффициентов a_i используются положения пиков с известными энергиями.

Как правило, при достаточном числе реперов ≥ 4 используется полином третьей степени.

Задачей оператора является установление правильного соответствия между положениями пиков и их истинными энергиями, что требует определенной квалификации, а именно знания спектра калибровочного источника.

В LsrnCustoms имеется возможность описания градуировочной характеристики двумя полиномами. В этом случае весь энергетический диапазон разбивается на два интервала. В каждом интервале характеристика описывается своим полиномом. Полиномы сшиваются на границе интервалов, исходя из условия непрерывности градуировочной характеристики и ее производной.

8.1 Автокалибровка по энергии

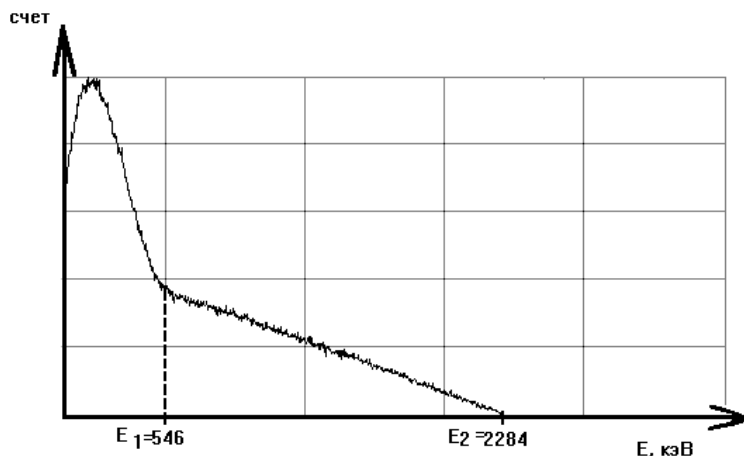
Если градуировка была ранее проведена, то существует возможность автоматической подстройки градуировочной характеристики при небольшом временном дрейфе спектрометра. При этом должен использоваться вполне определенный калибровочный источник(источники), реперные энергии которого заданы в конфигурации. Реализован режим, когда реперные энергии берутся из списка линий нуклидов, выбираемых пользователем.

В отличие от обычной градуировки в режиме автокалибровки соответствие между положениями и энергиями реперов устанавливается автоматически. Для каждого репера ищется соответствующий пик, энергия которого, рассчитанная по предыдущей калибровке, отличается от энергии репера не больше, чем на некоторую величину δE , заданную в конфигурации.

Для точной калибровки по энергии в диапазоне 50-3000 кэВ реперов в одном калибровочном источнике, как правило, не хватает. В LsrnCustoms реализована процедура последовательных измерений нескольких источников и построение градуировочной характеристики по всем реперам.

8.2 Калибровка непрерывных бета-спектров.

Для градуировки бета-спектрометра по энергии используется тонкий источник на основе радионуклидов, испускающих бета-излучение с граничными энергиями в начале и конце интересующего энергетического диапазона. Наиболее удобным для этих целей является источник на основе $^{90}\text{Sr}+^{90}\text{Y}$ с граничными энергиями бета-излучения **546 кэВ** (^{90}Sr) и **2284 кэВ** (^{90}Y), см. рис.1.

Рис.1 Аппаратурный спектр $^{90}\text{Sr} + ^{90}\text{Y}$

Для метода эталонных спектров, который используется в бета-спектрометрии, не нужна точная калибровка по энергии. Зато важна воспроизводимость калибровки от момента измерения эталонных спектров до измерения спектров проб. В связи с этим при первичной калибровке границы бета-спектров определяются визуально и отмечаются с использованием опции «вставить пики». Затем стандартным образом проводится линейная калибровка. Спектр калибровочного источника сохраняется под стандартным именем Calibr.spe.

Когда необходимо уточнить калибровку, изменившуюся вследствие временной нестабильности, измеряется спектр того же источника. Из сравнения спектров Calibr.spe и вновь измеренного спектра получают текущую калибровку.

Идея метода состоит в том, что спектры одного и того же источника, измеренные в разные моменты времени должны совпадать, если их представить в энергетическом масштабе.

Пусть в некотором измерении спектра, который мы будем называть калибровочным, коэффициенты были \mathbf{a}_0 и \mathbf{b}_0 .

Нас будут интересовать коэффициенты ГХЭ \mathbf{a}_x , \mathbf{b}_x в другом измерении спектра того же самого источника.

Разобьем интересующий энергетический диапазон на m интервалов (окон). Тогда можно рассчитать счет в каждом i -ом энергетическом окне S_i^0 калибровочного спектра. Коэффициенты \mathbf{a}_x , \mathbf{b}_x могут быть найдены из условия минимума функционала:

$$\sum_{i=1}^m \frac{\left\{ S_i^0 - (t_0/t) \cdot S_i(a_x, b_x) \right\}^2}{S_i^0 + (t_0/t) \cdot S_i(a_x, b_x)} = \min, \quad \text{Формула 8-2}$$

где t_0 и t - времена набора калибровочного и калибруемого спектров.

Минимум находится итерационным путем варьированием коэффициентов \mathbf{a}_x , \mathbf{b}_x .

9 Калибровка по полуширине

Зависимость полуширины от энергии описывается формулой:

$$FW(E) = R \cdot \sqrt{\sum_{i=0}^k f_i \cdot R^i}, \quad \text{Формула 9-1}$$

где: $R = \sqrt{E}$,

f_i - постоянные коэффициенты, являющиеся параметрами конфигурации,

$k \leq 4$ - степень аппроксимирующего полинома.

При первичной, грубой, калибровке зависимость $FW(E)$ может быть получена заданием полуширины для двух энергий. Для более точной калибровки существует специальная процедура «калибровка по полуширине». В этой процедуре проводится подгонка предварительно размеченного спектра с установленным флагом «минимизация по полуширине». Коэффициенты f_i определяют методом наименьших квадратов, аппроксимируя найденные в результате подгонки значения полуширин. Степень аппроксимирующего полинома выбирается на основе χ^2 -критерия.

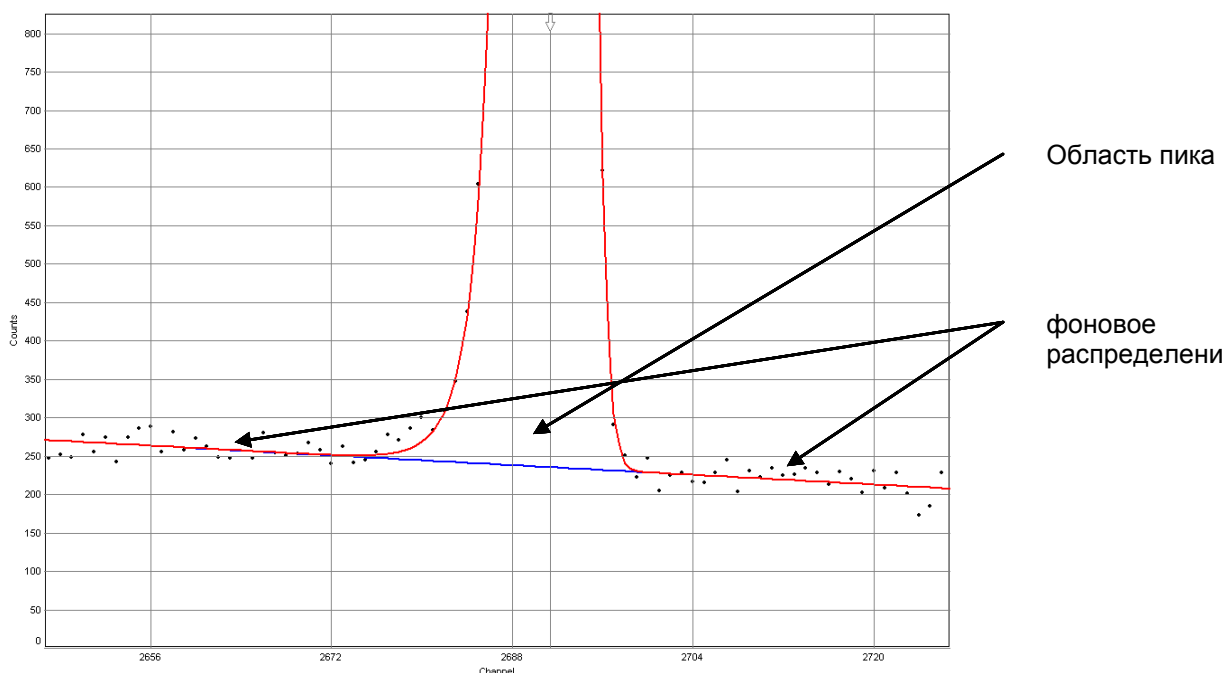
10 Калибровка по форме линии. Пик-образ

В качестве модельной функции $\psi(i, \bar{p}_k)$, аппроксимирующей пик, используется т.н. **пик-образ**. Используется два способа описания формы пика: табличное и параметрическое задание

10.1 Табличное задание

Модельная функция задается в виде ее значений в некоторых узлах, и существует процедура, позволяющая рассчитать ее значение в каждом канале для любых пиков спектра.

В этом случае в качестве пик-образа используется реальная аппаратная функция спектрометра. Процедура калибровки заключается в выделении области построения пик-образа, вычитании фоновой подложки под пиком, последующем сглаживании экспериментальных точек и сохранении значений сглаженного распределения в некоторых узлах.



Выделение области построения осуществляется в интерактивном режиме. Область должна состоять из двух участков: значимой области пика и двух областей фонового распределения слева и справа от пика.

Границы области пика задаются в долях полуширины $FWHM$ и в случае гауссовского распределения составляют $\sim 3 FWHM$ слева и справа от пика.

Границы фонового распределения должны быть достаточно большими, чтобы по ним можно было описать фоновую подставку под пиком, но не слишком большими, чтобы в этих границах выполнялось предположение о фоновом распределении. Области фонового распределения аппроксимируют полиномом заданной степени, который вычитают из спектра по всей области построения пик-образа. Эта процедура по сути является определением пик-образа – то, что остается после вычитания фоновой подложки мы и называем пик-образом.

Сглаживание полученного распределения осуществляется сплайнами. Степень сплайна и число точек сглаживания зависят от ширины распределения и могут изменяться пользователем.

Полученному распределению приписываются положение максимума и полуширина, которые определяются непосредственно из этого распределения.

Разработана процедура, которая позволяет из полученного распределения получить распределение такой же формы с другими положением и полушириной. Эта процедура используется при получении пик-образа для других пиков спектра.

10.2 Параметрическое задание.

В этом случае форму пика описывают аналитической функцией зависящей от некоторых параметров. Параметры находятся в результате подгонки конкретного участка спектра. Одно из представлений формы пика в виде гауссовской функции $\psi(i, p, \sigma) = \sigma \cdot \sqrt{2 \cdot \pi} \cdot \exp \frac{-(i - P)^2}{2 \cdot \sigma^2}$,

Формула 10-1

где P сопоставляется с положением пика, а $\sigma = \frac{Fw}{2 \cdot \sqrt{2 \cdot \ln 2}}$ с полушириной Fw пика.

Параметр Fw , как правило, является функцией энергии пика. Он может быть рассчитан предварительно по каким-то линиям спектра, см. 9 т.е. получена функция $Fw(E)$. В дальнейшем при аппроксимации конкретного участка спектра этот параметр не будет варьироваться, а рассчитываться из $Fw(E)$.

Одним из примеров использования параметрического задания функции является модельная функция для обработки альфа – спектров. Спектр каждой энергетической линии альфа - излучающего изотопа описывается функцией, представляющей сочетание асимметричного распределения Гаусса, экспоненты и гиперболы, связанных между собой условием непрерывности самой функции и её производной:

$$G(i, E) = H \begin{cases} e^{-\frac{(i-\mu)^2}{2\sigma_{right}^2}}, & \mu < i \\ e^{-\frac{(i-\mu)^2}{2\sigma_{left}^2}}, & \mu - d_1 < i < \mu \\ e^{\frac{d_1(2i-2\mu+d_1)}{2\sigma_{left}^2}}, & \mu - d_2 < i < \mu - d_1 \\ e^{-\frac{d_1(2d_2-d_1)}{2\sigma_{left}^2} \left(\frac{a}{b-i}\right)^r}, & i < \mu - d_2 \end{cases}$$

$$\text{где } a = r\sigma_{left}^2 / d_1, \quad b = \mu + a - d_2$$

Параметры модельной функции (σ_{right} , σ_{left} , d_1 , d_2 , r) определяют качество измеряемого источника. Например, для «тонкого» (хорошего) источника величины σ_{right} , σ_{left} , r будут меньше, чем для «толстого», а d_1 , d_2 – больше. Настройка параметров заключается в определении диапазона их возможных изменений.

Могут быть использованы более сложные модели с большим количеством параметров. По ряду параметров может быть проведена предварительная калибровка, и в дальнейшем эти параметры могут быть рассчитаны для конкретной линии спектра. Это уменьшает число варьируемых параметров и повышает быстродействие и надежность подгонки, особенно на сложных участках спектра.

Сохранена функция может быть также в табличном виде.

10.3 Учет зависимости формы пика от энергии

Если форма линии зависит от энергии, проводится калибровка по нескольким пикам, принадлежащим разным энергетическим диапазонам. При построении пик-образа для какой-то линии с энергией E берется суперпозиция пик-образов, построенных по ближайшим калибровочным линиям:

$$\Psi(E) = \varpi \cdot \Psi_1(E) + (1 - \varpi) \cdot \Psi_2(E). \quad \text{Формула 10-2}$$

Здесь:

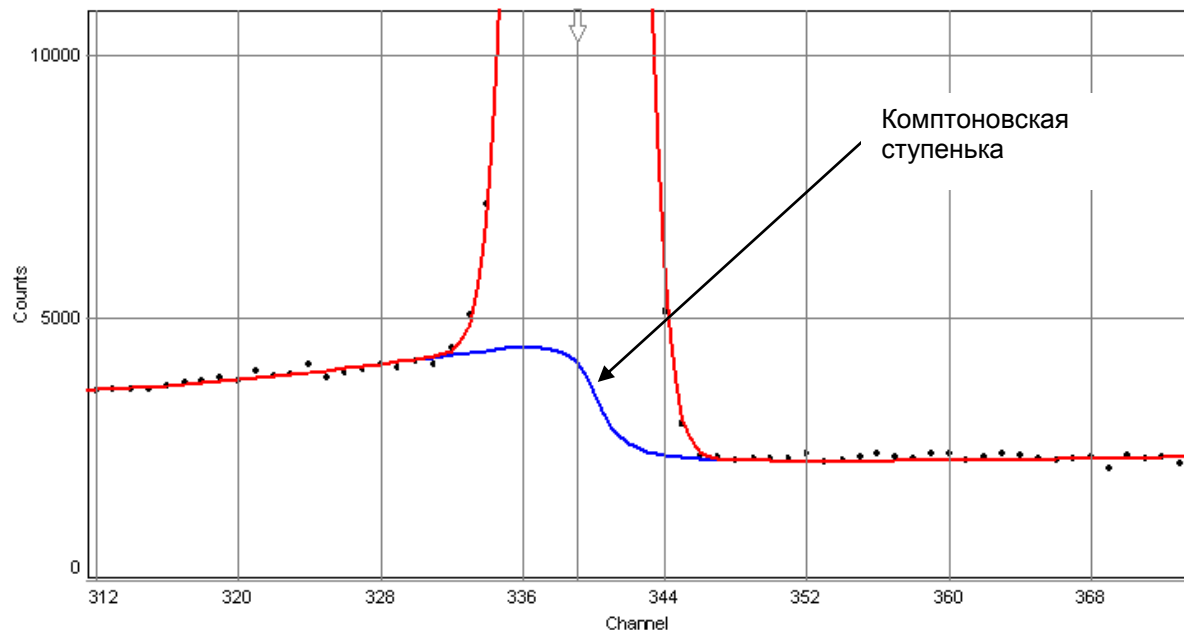
$\Psi_1(E)$, $\Psi_2(E)$ - пик-образы для линии с энергией E , построенные с использованием калибровочных линий с энергиями E_1 и E_2 , соответственно;

$$\varpi = \frac{\ln(E) - \ln(E_1)}{\ln(E_1) + \ln(E_2)}, \text{ веса, учитывающие близость интересующей линии к калибровочным,}$$

$$E_1 \leq E \leq E_2.$$

10.4 Особенности описания формы гамма-линии. Комптоновская ступенька.

Особенностью формы аппаратной функции гамма-спектрометров является наличие т.н. комптоновской ступеньки. Ступенька расположена слева от пика и обусловлена регистрацией гамма-квантов, рассеянных на малые углы вне чувствительной области детектора.



Ступенька хорошо аппроксимируется вблизи пика полиномом. При высоких энергиях - это константа, при низких желательно использовать более высокую степень. При построении пик-образа ступенька рассчитывается одновременно с фоновой подставкой. Область фонового распределения аппроксимируют функцией

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{k=0} F_k \cdot i^k \quad - \text{справа от пика} \\ \sum_{k=0} F_k \cdot i^k + \sum_{L=0} C_L \cdot i^L \quad - \text{слева от пика,} \end{array} \right. \quad \text{Формула 10-3}$$

где

F_k, C_L - коэффициенты полинома, описывающие фоновую подставку и ступеньку, соответственно,
 i - номер канала.

Коэффициенты полинома, нормированные на площадь пика $C'_L = \frac{C_L}{S}$, сохраняются в пик-образе и в дальнейшем используются при построении формы других линий.

Если включен режим минимизации по ступеньке, то при подгонке аппроксимация фоновой подставки ведется по Формула 10-3 и ступенька рассчитывается для каждого информативного участка.

11 Градуировка по эффективности регистрации

В программе предусмотрена возможность измерения активности в разных геометриях. Под геометрией измерения понимается геометрические размеры (форма) образца, масса (плотность) и положение образца относительно детектора. Для каждой геометрии предварительно должна быть проведена градуировка по эффективности, т.е. построена зависимость эффективности регистрации от энергии. Исключение составляет плотность образца. Из эффективности, определенной для одной плотности образца, может быть рассчитана эффективность для другой плотности, см. ниже 11.1.

Эффективность регистрации измеряется с помощью эталонных источников, аттестованных по активности, в нужной геометрии. Эффективность для данной энергии E_i рассчитывается по формуле:

$$\varepsilon(E_i) = \frac{S_i}{A \cdot I_i \cdot t} \quad \text{Формула 11-1,}$$

где

- A - активность эталонного источника,
- I_i - интенсивность линии с энергией E_i ,
- S_i - площадь соответствующего пика,
- t - время измерения.

Для получения зависимости эффективности регистрации от энергии полученные значения $\varepsilon(E_i)$ аппроксимируют какой-либо зависимостью. Таким образом, для построения эффективности регистрации необходимо:

- создать файл паспортов эталонных источников
- измерить спектры эталонных источников
- рассчитать площади реперных линий S_i в измеренных спектрах, используя процедуру «подгонка» 4
- рассчитать эффективности регистрации для каждой линии
- аппроксимировать значения эффективности.

11.1 Аппроксимация «кривой» эффективности.

«Кривую» эффективности регистрации представляют в виде:

$$\lg(\varepsilon) = \sum_{i=0}^k \alpha_i \cdot X^i \quad \text{Формула 11-2}$$

где $X = \lg(E)$;

α_i - коэффициенты, найденные в результате аппроксимации;

k - степень аппроксимирующего полинома, выбираемая на основе χ^2 - критерия.

В программе реализована процедура аппроксимации с использованием ортогональных полиномов. В представлении ортогональных полиномов $Q_{I,J}$, которые сохраняются в результате калибровки в файле *.pol эффективность рассчитывается по формуле

$$\lg(\varepsilon) = \sum_{I=0}^K P_I \sum_{j=0}^I Q_{I,j} \cdot X^j; \quad \text{Формула 11-3}$$

Здесь $P_I, Q_{I,j}$ - постоянные коэффициенты, которые находятся в результате аппроксимации значений эффективности.

В представлении ортогональных полиномов легко рассчитывается погрешность эффективности:

$$\delta\varepsilon = 230 \cdot D \cdot \sqrt{\sum_{I=0}^K \left(\sum_{j=0}^I Q_{I,j} \cdot X^j \right)^2}, \% \quad \text{Формула 11-4}$$

где D - параметр, который определяется в результате аппроксимации, характеризующий разброс экспериментальных точек относительно аппроксимирующей кривой.

Существует отдельная утилита для аппроксимации эффективности –Neff(rus), которая обладает большими возможностями по сравнению с опцией «аппроксимация» в основной программе

В Neff(rus) зависимость эффективности регистрации от энергии представляется набором полиномов различной степени, описывающих "кривую" эффективности в различных энергетических диапазонах. На границах диапазонов полиномы сшиваются, обеспечивая непрерывность кривой эффективности и ее первой производной. Использование модели нескольких полиномов позволяет достаточно тщательно аппроксимировать кривую эффективности и в то же время избежать высокой степени полинома, которая неизбежно возникает при попытке описать кривую одним полиномом в широком энергетическом диапазоне.

Существует возможность построения зависимости эффективности регистрации с использованием информации о соотношениях интенсивностей между гамма-переходами одного радионуклида. Этот режим позволяет использовать для построения эффективности наряду с источниками аттестованными по активности, не аттестованные источники. Подробнее об этом см. [1].

В том случае, когда материал и плотность калибровочных источников и измеряемых проб различаются, вводится поправка на различие в самопоглощении в этих источниках, см. ниже.

11.2 Учет различия в плотности градуировочных источников и измеряемых проб.

Пусть плотность объемного источника, с помощью которого была получена градуировочная характеристика по эффективности регистрации, была ρ_0 (г/см³), а плотность измеряемой в той же геометрии пробы ρ . Тогда эффективность регистрации $\varepsilon_p(E)$ при расчете активности должна быть скорректирована следующим образом:

$$\varepsilon_p(E) = \varepsilon_{\rho_0}(E) \cdot e^{(\rho \cdot \mu(E) - \rho_0 \cdot \mu_0(E)) d_{\text{эфф}}}, \quad \text{Формула 11-5}$$

где

$\mu(E)$ - массовый коэффициент поглощения гамма-квантов с энергией E , см²/г;

$d_{\text{эфф}}$ - эффективная толщина измеряемой пробы.

Таблица 1. Параметры измерительных кювет, используемых при измерениях на гамма-спектрометрах.

№	Измерительная кювета	Номинальный объем, л.	Внешние габариты, мм.	$d_{\text{эфф}}$, эффективная толщина, мм.
1.	<i>Сосуд типа Маринелли</i>	0.5	Ø125 H=100	8(2)
2.	<i>Сосуд типа Маринелли</i>	1.0	Ø150 H=110	17(2)
3.	<i>Сосуд типа Маринелли</i>	3.0	Ø180 H=200	30(5)
4.	<i>Геологический пробоотборник</i>	0,88	Ø 150 H=50	30(2)
5.	<i>Пластмассовая кювета типа "Дента"</i>	0,12	Ø 75 H=35	18(2)

11.3 Особенности градуировки в LsrnCustoms.

В программе различаются четыре типа геометрии

- Точечный – открытый точечный источник на произвольном расстоянии от детектора
- Контейнер – точечный источник в контейнере
- Протяженный – т.н. 2π -геометрия
- Уран – измерения в стандартных контейнерах

Расчет эффективности во всех геометриях основан на перерасчете из эффективности «точечного» источника, измеренной на определенном расстоянии r_0 .

- Точечный – производится коррекция на расстояние источник-детектор

$$\varepsilon(E, r_1) = \varepsilon(E, r_0) \cdot \frac{(r_0 + d(E))^2}{(r_1 + d(E))^2}$$

где $d(E)$ - расстояние от поверхности детектора до эффективного центра для интересующей энергии;

- Контейнер - производится коррекция на расстояние источник-детектор и на поглощение в стенках контейнера;
- Протяженный – рассчитывается т.н. удельная эффективность

$$\varepsilon_{уд}(E) = \frac{2\pi \cdot \varepsilon(r_0, E) \cdot (r_0 + d(E))^2}{\mu(E)},$$

где $\mu(E)$ - массовый коэффициент поглощения;

- Уран – численное интегрирование по «видимому» объему образца.

12 Учет фона спектрометра

В практических измерениях возникают две ситуации:

- Фон неизменен и может быть измерен предварительно. В этом случае фоновый спектр может быть вычтен из спектра образца
- Фон неизвестен

В LsrnCustoms предусмотрена процедура учета неизвестного фона, см. 12.3.

В базовой версии предполагается только вариант неизменного фона. Реализованы две процедуры вычитания фона. Естественно, что фон должен быть предварительно измерен и сохранен.

12.1 Поканальное вычитание фона.

Процедура заключается в коррекции отсчетов спектра пробы в каждом канале:

$$N'_i = N_i - N_i^f \cdot (t/t^f)$$

где

N_i - отсчеты в i -ом канале,

N'_i - скорректированные отсчеты,

N_i^f - отсчеты в фоновом спектре, пересчитанном на энергетическую градуировку пробы, т.е.

предусматривается учет отличия градуировочных коэффициентов по энергии в фоновом спектре и спектре измеряемого образца,

t, t^f - времена набора спектра пробы и фонового спектра, соответственно.

Одновременно рассчитывается погрешность скорректированных отсчетов

$$(\Delta N'_i)^2 = \sqrt{N_i + N_i^f \cdot (t/t^f)}, \text{ необходимая для корректной дальнейшей обработки спектра}$$

образца.

12.2 Вычитание фоновых вкладов в пики.

В этом случае проводится обработка фонового спектра. Результаты обработки, т.е. энергии фоновых линий, их площади и погрешности, сохраняются.

При расчете активности площади пиков измеряемой пробы, энергии которых совпадают в пределах *окна идентификации* с какими-то пиками фонового спектра, корректируются по формуле:

$$S'_i = S_i - S_i^f \cdot (t/t^f),$$

где:

S_i - площадь пика,

S'_i - скорректированная площадь пика,

S_i^f - площадь соответствующего пика в фоновом спектре,

t, t^f - времена набора спектра пробы и фонового спектра, соответственно.

Аналогично корректируются их погрешности

$$\Delta S'_i = \sqrt{(\Delta S_i)^2 + (\Delta S_i^f)^2 \cdot (t/t^f)^2}.$$

Эта процедура используется только в ППД-спектрометрии и только в этом случае в качестве фонового спектра используется файл с расширением *.fon. В сцинтилляционных спектрах учет фона осуществляется поканальным вычитанием.

12.3 Случай неизвестного фона в LsrnCustoms.

Зачастую возникают проблемы с разделением фонового спектра и спектра интересующего объекта. В то же время, как правило, известны факторы, определяющие фон, в том числе и радионуклидный состав. В программе существует опция, позволяющая в обязательном порядке включать в обработку какие-то радионуклиды, даже если они не найдены процедурой поиска.

При этом можно учесть тот факт, что соотношение интенсивностей линий спектра в фоновых радионуклидах будет отлично от соотношения интенсивностей в образце. Чаще всего это естественные радионуклиды и соотношение интенсивностей их за счет самопоглощения в стенах, почве и т.д. ближе к геометрии «протяженный». Такие радионуклиды в библиотеке выделяются признаком «Ф», например Th-232Ф. При обработке эти радионуклиды будут рассчитываться в

геометрии «протяженный объект» и результаты расчета должны интерпретироваться как удельная активность.

Основная цель этой процедуры не получить значения активности фоновых нуклидов, которые в какой-то степени являются условными, а не исказить результаты по активности образца.

13 Расчет дозовых характеристик

Опция «Доза» позволяет рассчитать дозу в месте расположения блока детектирования в соответствие с методикой [2]. Энергетический спектр гамма-излучения рассчитывается из аппаратного спектра с помощью энергетической матрицы чувствительности, которая создается с помощью специальной утилиты в соответствии с той же методикой.

14 Представление результатов расчета активности

Если значение относительной погрешности определения активности по какому-то нуклиду превышает *порог значимости*, устанавливаемый в файле конфигурации (рекомендуется 50%), отображаются не значения активности с погрешностью, а верхний предел измеряемой активности $A + \Delta A$. Такие радионуклиды мы называем незначимыми.

$$\mathbf{D}_{11}\mathbf{A}_1 + \dots + \mathbf{D}_{1n}\mathbf{A}_n = \mathbf{b}_1$$

$$\dots$$

$$\mathbf{D}_{n1}\mathbf{A}_1 + \dots + \mathbf{D}_{nn}\mathbf{A}_n = \mathbf{b}_n,$$

Формула 14.3

где:

$$D_{ik} = t \cdot \sum_{i=1}^m r_{i1} \cdot r_{ik} \cdot w_i$$

Формула 14.4

$$b_1 = t \cdot \sum_{i=1}^m S_i^f \cdot r_{i1} \cdot w_i$$

Формула 14.5

Случайная составляющая погрешность активности определяется через диагональные элементы матрицы обратной \mathbf{D} :

$$\sigma(\mathbf{A}_k) = \sqrt{\{\mathbf{D}^{-1}\}_{kk}} \quad \text{Формула 14.6}$$

Анализируется величина χ^2 с использованием рассчитанных значений активности. Если

$$\chi^2 > m - n, \quad \text{Формула 14.7}$$

то значение погрешности увеличивают в $\sqrt{\chi^2 / (m - n)}$ раз.

Полная погрешность измерения активности рассчитывается по формуле:

$$\Delta A = \frac{1.96 \cdot \sigma(\tilde{A}) + 1.1 \cdot \Theta_\Sigma}{\sigma(\tilde{A}) + \frac{\Theta_\Sigma}{\sqrt{3}}} \cdot \sqrt{\frac{\Theta_\Sigma^2}{3} + \sigma^2(\tilde{A})}, \quad \text{Формула 14.8}$$

где $\sigma(\tilde{A})$ - случайная составляющая погрешности измерения активности, рассчитываемая по формуле (14.6);

$$\Theta_\Sigma = \sqrt{\Theta_p^2 + \Theta_\rho^2 + \Theta_m^2} - \text{квадратичная сумма неисключенных составляющих}$$

систематической погрешности:

$\Theta_p = \delta_p \cdot A / 100$, $\delta_p, \%$ - относительная погрешность аттестации соответствующего эталонного источника, использованного при градуировке по чувствительности;

$\Theta_\rho = k \cdot (\rho - \rho_0) \cdot A$, здесь $\rho - \rho_0$ - различие в плотности пробы и эталонного источника, г/см³,

$k = 0.1 \text{ см}^3/\text{г}$ - численный коэффициент, установленный эмпирически;

$\Theta_m = \delta_m \cdot A / 100$, $\delta_m, \%$ - относительная погрешность измерения массы пробы (не более 1).

15.2 Алгоритм расчета матрицы чувствительности

Процедура градуировки по чувствительности заключается в измерении эталонных источников каждого из k-го радионуклидов одной и той же массы и расчете матрицы чувствительности R, элементы которой определяются по формуле:

$$r_{ik} = \left(S_{ik} - f_i \cdot t_k / t_f \right) / (t \cdot A_k) \quad \text{Формула 14.9}$$

S_{ik} - счет в i-ом энергетическом окне спектра эталонного источника на основе k-го радионуклида;

f_i - счет в i-ом энергетическом окне фонового спектра;

t_k и t_f - времена набора спектров эталонного источника на основе k-го радионуклида и фона, соответственно;

A_k - удельная активность образцового источника на основе k-го радионуклида.

Случайная составляющая погрешности элементов матрицы чувствительности определяется

формулой:

$$\sigma^2 r_{ik} = \left(S_{ik} + f_i \cdot t_k / t_f \right) / \left(t \cdot A_k \right)^2,$$

Формула 14.10

где:

δA_k - относительная погрешность аттестации эталонных источников по удельной активности в % для доверительной вероятности $p=0.95$.

В практической бета - спектрометрии зачастую требуется измерение проб произвольной массы (в пределах емкости кюветы). В этом случае проводится измерение зависимости r_{ik} от массы образца. С этой целью измеряются спектры эталонных источников различной массы m_j каждого радионуклида. Полученные в результате этого значения $r_{ik}(m_j)$ аппроксимируют зависимостью $r_{ik}(m)$.

15.3 Совместные гамма-бета измерения

В ряде задач, связанных с определением активности бета - излучающих нуклидов, как правило, измерения одной и той же пробы проводят как на гамма-, так и на бета - спектрометрах. При этом ряд радионуклидов измеряется как, гамма-, так и бета - спектрометрическими методами. Используя результаты измерения на одном тракте, можно повысить точность и достоверность измерений на другом тракте. В случае метода «окон» χ^2 - функционал модифицируется следующим образом:

$$\chi^2 = \sum_i^m \left[S_i^f - \sum_k^n A_k \cdot t \cdot r_{ik}(\mu) \right] \cdot w_i + \sum_k^n \left[\frac{(A_k - \tilde{A}_k)^2}{(\Delta \tilde{A}_k)^2} \right] = \min \quad \text{Формула 14.11}$$

Здесь \tilde{A}_k , $\Delta \tilde{A}_k$ – оценки активности нуклидов, полученные из измерений на другом тракте. В принципе это могут быть любые другие альтернативные, независимые оценки значений активности. Условие минимума χ^2 - функционала приводит к системе линейных уравнений относительно A_k .

Наибольшую практическую пользу этот подход принес при сертификационных измерениях ^{90}Sr , на фоне ^{137}Cs и ^{40}K . Измерения активности радионуклидов ^{137}Cs и ^{40}K на гамма - спектрометре позволяют повысить чувствительность измерения ^{90}Sr почти в два раза.

Приложение I Ссылки

[1] Руководство пользователя –Neff.exe - Lsrn-Neff(rus).pdf

[2] Мощность дозы. Методика расчета из спектра гамма-излучения.

Приложение II Служба сопровождения и поддержки

141570, Московская обл., Солнечногорский р-н, п. Менделеево,
Льяловское шоссе, д. 1а, ООО «ЛСРМ»,

WWW: <http://www.lsrn.ru>

- Даниленко Владимир Николаевич, E-mail danilenko@lsrn.ru
- Ковальский Евгений Анатольевич, E-mail kovalsky@lsrn.ru
- Федоровский Сергей Юрьевич, E-mail tadik@lsrn.ru
- Юферов Алексей Юрьевич.

тел./факс: +7 (495) 660-16-14

E-mail: lsrn@lsrn.ru