

18. Vyhodnotenie spektier žiarenia gama pomocou metódy operátora odozvy

1. Všeobecná časť

Experimentálna kvantifikácia spektrometrického merania v určitom energetickom rozsahu (a, b) je daná parametrami $\{\Delta K, c\}$, kde ΔK je šírka spektrálneho kanálu a c je celkový počet kanálov v spektre. Keď použijeme maticovú interpretáciu spektier [1], môžeme výsledok spektrometrického merania zapísať vo forme stĺpcového vektora o dĺžke c , zložky ktorého sú početnosti impulzov namerané v jednotlivých kanáloch spektrometra. Takýto vektor reprezentuje fyzikálne (experimentálne, prístrojové) spektrum.

Označme experimentálne spektrum od vzorky merané za čas t_D a prepočítané za 1 sekundu ako stĺpcový vektor \mathbf{d} . Podobne označme kalibračné spektrum od štandardu merané po dobu t_S ako stĺpcový vektor \mathbf{s} a spektrum pozadia merané za čas t_B ako stĺpcový vektor \mathbf{b} .

Model operátora odozvy, lepšie známy v scintilačnej ako polovodičovej spektrometrii žiarenia gama, je založený na určení funkcií odozvy v transformačnom operátore, ktorý charakterizuje vplyv meracieho zariadenia na spektrometrické meranie [1, 2]. V dôsledku vektorovej reprezentácie spektier môžeme tento operátor kvantifikovať pomocou vhodnej matice. Potom vektorový model spektrometrického merania žiarenia gama možno vyjadriť v maticovom tvare:

$$\mathbf{d} - \mathbf{b} = \mathbf{K} \mathbf{a} \quad (18.1)$$

kde vektory \mathbf{d} a \mathbf{b} reprezentujú fyzikálne spektrá od vzorky a pozadia, vektor \mathbf{a} s dĺžkou n obsahuje komponentové aktivity (emisné príkony prepočítané na jednotkovú výťažnosť fotónov pre každú z n energetických komponent vzorky) a $c \times n$ matica \mathbf{K} je matica účinnosti, ktorá charakterizuje daný operátor odozvy.

Matica účinnosti \mathbf{K} môže byť v niektorých prípadoch určená na základe priamej kalibrácie pomocou s štandardných zdrojov odpovedajúcich rovnakej geometrii detekcie ako pri meraní vzorky a zahrňujúcich tie isté hlavné komponenty spektra ako sú prítomné vo vzorke. Vtedy matica \mathbf{K} obsahuje len n známych hlavných komponent vo vzorke. Táto kvantitatívna analýza je dobre známa pod názvom analýza hlavných komponent (PCA – Principal Component Analysis) [3]. V tomto prípade je výhodné použiť na riešenie maticovej rovnice

(18.1) metódu pseudoinverzie. Neznámy vektor je potom daný ako $\mathbf{a} = \mathbf{K}^{-1}(\mathbf{d} - \mathbf{b})$, kde pseudoinverzia matice \mathbf{K} je definovaná s využitím Younga-Eckartovej vety [1] nasledovne:

$$\mathbf{K}^{-1} = \mathbf{S}_0(\mathbf{S} - \mathbf{B}_s)^{-1} = \mathbf{S}_0 \mathbf{V}_h \Gamma_h^{-1} \mathbf{U}_h^T \quad (18.2)$$

kde \mathbf{S} a \mathbf{B}_s sú $c \times s$ matice, ktoré majú v stĺpcoch experimentálne štandardné a požadové spektrá (prepočítané za 1 sekundu), \mathbf{S}_0 je $n \times s$ matica štandardných komponentových aktivít (emisné príkony) zodpovedajúcich n hlavným komponentám, ktoré sú spoločné pre spektrá ako od vzorky tak aj od štandardov, \mathbf{V}_h a \mathbf{U}_h sú $s \times h$ matica a $c \times h$ matica, ktoré majú v riadkoch ortogonálne vlastné vektory, ktoré zodpovedajú h najväčším jednoduchým hodnotám matice $(\mathbf{S} - \mathbf{B}_s)$ uložených v diagonále matice Γ_h . Riešenie (18.1) pomocou pseudoinverzie (18.2) je možné len za podmienky $s \geq n$ a hodnosť matice $(\mathbf{S} - \mathbf{B}_s)$ je limitovaná vzťahom $s \geq h(\mathbf{S} - \mathbf{B}_s) \geq n$. Navyše je potrebné vopred poznať kvalitatívne zloženie vzorky a mať k dispozícii vhodné štandardy odpovedajúce tomuto komponentovému zloženiu. PCA umožňuje teda len kvantitatívnu analýzu zmesi známeho zloženia.

Pre úplnú komplexnú Q^2 (kvalitatívnu a kvantitatívnu) analýzu je potrebné aplikovať nový štruktúrálnejší model operátora odozvy (matica účinnosti). Model využíva modernú techniku faktorovej analýzy tzv. SCFA (Scaling Confirmatory Factor Analysis). Latentná štruktúra matice účinnosti môže byť schematicky vyjadrená ako:

$$\mathbf{K} = \mathbf{H}\mathbf{B} = [\mathbf{F} | \mathbf{C}] \mathbf{B} \quad (18.3)$$

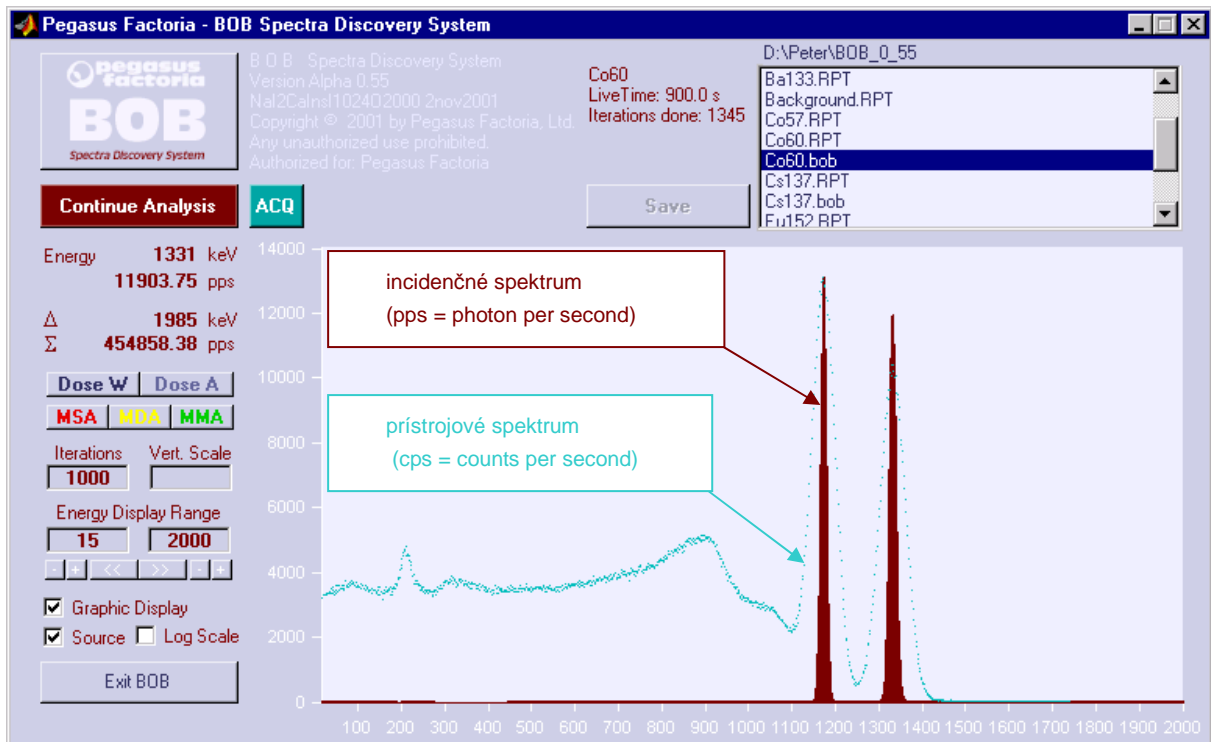
kde \mathbf{F} je $c \times m \times p$ matica spoločných faktorov, \mathbf{C} je $m \times p \times n$ matica škalovacích koeficientov, \mathbf{B} je $m \times n$ matica faktorových záťaží, \mathbf{H} je $c \times m \times n$ matica hlavných komponent, $m \times p$ je počet spoločných faktorov a výraz v hranatých zátvorkách označuje škalovanie faktorov (škaloovací súčin).

Rozklad (18.3) môžeme uskutočniť pomocou tzv. SCFA algoritmu, ktorý je podrobnejšie opísaný v [2]. SCFA transformuje súbor funkcií odozvy v \mathbf{K} , ktoré zodpovedajú n komponentovým energiám pre s štandardných spektier v \mathbf{S} , do súboru spoločných faktorov nezávislých na energii fotónov. Tento rozklad umožňuje následne rozšíriť štandardnú maticu účinnosti \mathbf{K} pre celý energetický rozsah $\langle a, b \rangle$ pomocou interpolácie latentných maticových koeficientov v n -rozmerných riadkoch matic \mathbf{C} a \mathbf{B} pre každý kanál spektra. Označme novú kompletnú $m \times c$ maticu faktorových záťaží ako \mathbf{B}_c a novú kompletnú $m \times p \times c$ maticu faktorových škalovacích koeficientov ako \mathbf{C}_c . Potom nová kompletná matica účinnosti $\mathbf{K}_c(\mathbf{B}_c, \mathbf{C}_c, \mathbf{F})$ môže byť zostrojená na základe vzťahu (18.3) dosadením kompletných matic \mathbf{B}_c a \mathbf{C}_c namiesto nekompletných štandardných matic \mathbf{B} a \mathbf{C} .

Komplexná Q^2 analýza sa potom dá vyjadriť nahradením štandardnej maticovej rovnice (18.1) kompletnou maticovou rovnicou:

$$\mathbf{d} - \mathbf{b} = \mathbf{K}_c \mathbf{a}_c \quad (18.4)$$

kde \mathbf{K}_c je $c \times c$ kompletný operátor odozvy a \mathbf{a}_c je neznáme incidenčné spektrum fotónov emitovaných zo vzorky za 1 sekundu. Dĺžka incidenčného spektra v tomto prípade odpovedá fyzikálnemu spektru c , ale rovnaká kvantifikácia fyzikálnych a incidenčných spektier nie je podmienkou.



Obr. 18.1: Prístrojové a incidenčné spektrum od zdroja ^{60}Co získané meraním pomocou scintilačného spektrometra NaI(Tl) o rozmeroch 2"x 2". Incidenčné spektrum (photon per second) bolo získané použitím kompletného operátora odozvy prostredníctvom softwarového produktu BOB Spectrum Discovery System.

Na riešenie kompletnej rovnice (18.4) nie je možné aplikovať priamu metódu pomocou inverzie matice \mathbf{K}_c . V tomto prípade sa aplikujú nepriame iteratívne postupy, ktoré sú opísané napr. v [4]. Na obr. 18.1 je znázornené prístrojové (fyzikálne) a incidenčné spektrum získané meraním zdroja ^{60}Co . V tomto prípade iteračná technika bola založená na metóde maximálneho poklesu (gradientová metóda) v zmysle maximálnej vierohodnosti.

2. Zadanie a postup merania

Cieľom úlohy je aplikovať celospektrálne postupy vyhodnocovania spektier žiarenia gama na vybrané reálne namerané spektrá. Celospektrálne spracovanie (WSP – Whole Spectrum Processing) aplikujte v prvom rade na úrovni komponentovej analýzy (PCA) s využitím pseudoinverzie (18.2). Pri výbere štandardných spektier treba venovať pozornosť dodržaniu podmienok, za ktorých je možné použiť metódu PCA. Pri samotných výpočtoch je veľmi výhodné použiť prostredie maticového procesora MatLab.

V druhom rade analyzujte vybrané namerané spektrá pomocou komplexnej Q^2 analýzy, pri ktorej použijete kompletný operátor odozvy pre daný spektrometer. Pre riešenie maticovej rovnice (18.4) použijete prostredie MatLab, alebo priamo produkt BOB pre celospektrálne spracovanie spektier.

Riešenie úlohy zahŕňa nasledovné postupy:

- 1) Meranie spektier štandardných zdrojov žiarenia gama
- 2) Meranie spektra pozadia
- 3) Meranie spektra zmesi vybraných zdrojov žiarenia
- 4) Výpočet pseudoinverzie (18.2) a určenie komponentových aktivít pre zmes (3)
- 5) Aplikácia komplexnej analýzy na vyhodnotenie spektra od neznámej zmesi (3)
- 6) Porovnajte výsledky získané oboma postupmi (4) a (5) so skutočnými hodnotami aktivít použitých zdrojov

3. Literatúra

- [1] Shafroth, S. M.: Scintillation Spectroscopy of Gamma-Radiation. (Gordon and Breach Science Publishers, New York) (1967).
- [2] Krnáč, Š. and Povinec, P.: Semiconductor Gamma-Ray Spectrometry with Whole-Spectrum Processing. Nucl. Instr. and Meth. A (submitted).
- [3] Malinowski, E.R. and Howery, D.G.: Factor Analysis in Chemistry. (Wiley and Sons, New York) (1980).
- [4] BOB Spectra Discovery System (Firemný materiál, Pegasus Factoria, Bratislava) (2001).
- [5] Krnáč, Š. and Ragan, P.: HPGe Spectrometer as a Gamma-ray Dosemeter in situ. Radiat. Prot. Dosim. **58**(3), 217-228 (1995).