Применение алгоритма коррекции на основе ME-LM метода для улучшения идентификации пиков в аппаратурном спектре сцинтилляционного гамма-радиометра

В статье рассматривается алгоритм коррекции аппаратурного спектра гамма-радиометра на основе NaI(Tl) детектора. В основе алгоритма лежит ME-LM метод (Maximum Likelihood Estimation Using Expectation Maximization), использующий матрицу отклика детектора, полученную при помощи Монте-Карло моделирования. Основным преимуществом алгоритма является процедура рескейлинга, позволяющая существенно сократить время обработки спектра.

Ключевые слова:

Монте-Карло моделирование, коррекция спектра, гамма-радиометр, Fluka.

А.А.Загороднюк^{1,2}, Д.И.Оболонский¹, Р.В.Лукашевич¹

¹ НПУП «АТОМТЕХ», г. Минск, Республика Беларусь

² Белорусский Государственный университет, г. Минск, Республика Беларусь

Как правило, гамма-радиометры предназначены для измерения удельной и объемной активности в продуктах питания, стройматериалах, воде, почве и промышленном сырье следующих радионуклидов: ⁴⁰K, ¹³¹I, ¹³⁴Cs, ¹³⁷Cs, ²²⁶Ra, ²³²Th. В основе типичного гамма-радиометра лежит блок детектирования со сцинтилляционным NaI(Tl) детектором, помещенным в свинцовую защиту заданной толщины для уменьшения внешнего излучения с целью измерения проб низкой активности.

Важной особенностью работы некоторых гамма-радиометров [1] является режим автоматического выбора радионуклидного состава измеряемого образца. Данный режим основан на периодической спектрометрической обработке измеряемого спектра и идентификации пиков полного поглощения с целью последующего выбора подходящей калибровки по эффективности для более точного определения удельной и объемной активности измеряемого образца.

Из-за ряда физических механизмов взаимодействия фотонного излучения с веществом сцинтиллятора, малого коэффициента конверсии поглощенной энергии в полезный оптический сигнал, а также из-за особенностей обработки этого сигнала, получаемый на выходе прибора аппаратурный спектр имеет сложно интерпретируемый вид. Как следствие, в аппаратурном спектре ширина фотопика и его высота относительно комптоновского рассеяния сильно зависят от энергии первичного фотонного излучения. Данное обстоятельство усложняет идентификацию пиков моноэнергетического излучения в выходном аппаратурном спектре. Это может привести к неверному выбору радионуклидного состава, а значит и к значительному искажению результата. Особенно сильно это проявляется при наличии в спектре линий ²²⁶Ra и ²³²Th. В настоящее время существует ряд математических методов обработки аппаратурного спектра прибора, которые позволяют улучшить идентификацию в нем фотопиков.

Целью данной работы является разработка алгоритма коррекции аппаратурного спектра гамма-радиометра для возможности повышения его рабочих характеристик (а именно, улучшения режима автоматического выбора радионуклидного состава измеряемого образца). В основе алгоритма лежит *ME-LM* метод коррекции спектра, базирующийся на построении матрицы отклика прибора. Основным преимуществом данного алгоритма является возможность его реализации в готовом приборе без каких-либо модификаций в аппаратной части. Внедрение алгоритма в процесс работы прибора может быть сделано путем обновления программного обеспечения.

Описание алгоритма коррекции на основе ME-LM метода

В статье рассматривается коррекция аппаратурного спектра, полученного при измерении объемных источников ионизирующего излучения на гамма-радиометре [1] в геометрии Маринелли (объем сосуда 1 литр). Основные характеристики прибора, используемого в данной статье для проверки алгоритма, приведены в табл.1.

В общем виде алгоритм коррекции спектра состоит из следующих шагов.

1. Построение Монте-Карло модели гамма-радиометра на основе NaI(Tl) детектора, которая совпадает по своим основным характеристикам с реальным прибором. В данный пункт включена верификация модели, позволяющая судить о ее соответствии реальному прибору.

2. Построение матрицы отклика детектора на основе набора аппаратурных энергетических спектров, полученных при помощи Монте-Карло модели. Детальное описание процедуры построения матрицы отклика описано в работе [2] для случая HPGe детектора. В случае с NaI(Tl) детектором процедура построения отличается лишь рассматриваемым энергетическим диапазоном и количеством шагов (количеством каналов) детектора.

Табл.1. Основные характеристики гамма-радиометр	a 1	1	Ι.
---	-----	---	----

Параметр	Значение
Детектор	NaI(Tl) Ø63×63 мм
Энергетический диапазон	0,05–3 МэВ
Количество каналов АЦП	1024
Измеряемые радионуклиды (минималь- ная измеряемая активность (МИА))	¹³¹ I – 3 Бк/кг; ¹³⁴ Cs – 3 Бк/кг; ¹³⁷ Cs – 3,7 Бк/кг; ⁴⁰ K – 50 Бк/кг; ²²⁶ Ra – 10 Бк/кг; ²³² Th – 10 Бк/кг

/ НАУЧНЫЕ СТАТЬИ /

3. Коррекция спектра при помощи ME-LM метода с использованием ранее построенной матрицы отклика. МЕ-LM метод [3,4,5] основан на предположении, что количество импульсов в каждом канале детектора не зависит от других каналов и подчиняется распределению Пуассона. По своей природе данный метод является итеративным - аппаратурный спектр, прошедший процедуру коррекции в предыдущей итерации, используется в качестве входных данных для следующей итерации. Последовательно проходя через определенное количество итераций, скорректированный спектр стремится по своей форме к реальному спектру поля гамма-излучения. Чем больше итераций используется при коррекции аппаратурного спектра, тем больше данный спектр становится похожим на изначальный. Для коррекции аппаратурного спектра используется следующая формула:

$$S_{k}^{new} = S_{k}^{old} \times \sum_{i=1}^{m} \frac{S_{i}^{*} R_{ik}}{\sum_{j=1}^{n} S_{j}^{old} R_{ij}}, \qquad (1)$$

где R_{ij} – элемент матрицы отклика прибора; S_i^* – элемент изначально измеренного спектра; S_k^{old} – элемент спектра предыдущей итерации; S_k^{new} – элемент спектра текущей итерации.

Основным преимуществом *ME-LM* метода является его применимость практически для любых измерений, вне зависимости от вырожденности матрицы отклика и качества входного аппаратурного спектра. Основным недостатком метода является его итеративный характер, который в общем виде не позволяет распараллелить вычисления с целью уменьшения времени расчета. Однако, как будет показано далее, в ряде случаев время расчета можно снизить до приемлемого уровня.

Построение и верификация модели прибора

Построение Монте-Карло модели гамма-радиометра происходило в компьютерной программе *Fluka* версии 4.0.1 [6]. Программа *Fluka* является Монте-Карло кодом общего назначения, который нашел широкое применение в таких областях, как физика высоких энергий, радиационная медицина, дозиметрия и защита от ионизирующего излучения [7]. Основным преимуществом данной программы является точность выполняемых расчетов (проверенная в ряде различных экспериментов), простой и интуитивный интерфейс, условно-бесплатная лицензия.

Создание и верификация компьютерной Монте-Карло модели гамма-радиометра происходили по стандартному алгоритму [2,8,9].

1. Реальный детектор последовательно облучается излучением ряда гамма-источников с заданным спектром излучения в заданной геометрии.

2. Исходя из анализа спектра излучения, поглощенного в активном объеме реального детектора, согласно формуле находятся константы *a*, *b*, *c*:

$$FWHM_i = a + b\sqrt{E_i + cE_i^2}, \qquad (2)$$

где *FWHM_i* – полная ширина на полувысоте *i*-го пика полного поглощения; *a, b, c* – константы, определяемые путем калибровки детектора; *E_i* – энергия центроиды фотопика.

3. В компьютерной программе *Fluka* строится модель детектора (рис.1), которая последовательно облучается гамма-излучением выбранных радионуклидов в той же геометрии, что была использована при облучении реального детектора.

4. Выходной спектр модели сворачивается с функцией Гаусса, описываемой формулой [10]:

$$F(E) = C \cdot e^{-\left(\frac{2\sqrt{Ln2}(E-E_0)}{a+b\sqrt{E+cE^2}}\right)^2},$$
 (3)

где *a*, *b*, *c* – константы, получаемые путем анализа измеренного спектра; E_0 – энергия центроиды пика полного поглощения; *E* – энергия (значение из заданного энергетического диапазона); *C* – нормировочная константа.



Рис.1. Монте-Карло модель гамма-радиометра [1]. а) геометрия модели с указанием конструкционных материалов; б) распределение поля фотонного излучения от объемного источника ¹³⁷Cs.



Рис.2. Сравнение измеренного и модельного спектра радионуклида ¹³⁴Сѕ в геометрии сосуда Маринелли 1л.



Рис.3. Сравнение измеренного и модельного спектра радионуклида ¹³⁷Сѕ в геометрии сосуда Маринелли 1л.

5. Путем сопоставления модельных спектров с аппаратурными спектрами, полученными на реальном гамма-радиометре, делается вывод об адекватности и применимости компьютерной модели.

Более детальное описание алгоритма построения Монте-Карло модели приведено в работе [2]. Результаты сравнения измеренных и модельных спектров, предварительно нормированных на максимальную величину фотопика, представлены на рис. 2, 3.

Исходя из сопоставления измеренных и модельных спектров, можно сделать вывод, что Монте-Карло модель соответствует реальному гамма-радиометру (геометрия Маринелли, объем сосуда 1 литр, для проб плотностью 1 г/см³). В результате данная модель может быть использована для построения матрицы отклика прибора.

Коррекция аппаратурного спектра

Для коррекции аппаратурного спектра на языке программирования *Python* была написана программа, реализующая *ME-LM* метод. Проверка алгоритма коррекции была проведена на следующих радионуклидах: ¹³⁴Cs, ¹³⁷Cs, ⁴⁰K, ²²⁶Ra, ²³²Th. Результаты коррекции спектра приведены на рис.4–8 (для возможности наглядного сравнения каждый спектр нормирован на максимальное значение количества импульсов в фотопике).



Рис.4. Аппаратурный спектр радионуклида ¹³⁴Cs до (черный цвет) и после (красный цвет) коррекции (количество итераций равно 100): а) без процедуры рескейлинга, количество каналов 1024, энергетический шаг 3 кэВ на канал; б) с процедурой рескейлинга, количество каналов 341, энергетический шаг 9 кэВ на канал; в) с процедурой рескейлинга, количество каналов 204, энергетический шаг 15 кэВ на канал; г) с процедурой рескейлинга, количество каналов 102, энергетический шаг 30 кэВ на канал.



Рис.5. Аппаратурный спектр радионуклида ¹³⁷Сѕ до (черный цвет) и после (красный цвет) коррекции (количество итераций равно 100): а) без процедуры рескейлинга, количество каналов 1024, энергетический шаг 3 кэВ на канал; б) с процедурой рескейлинга, количество каналов 341, энергетический шаг 9 кэВ на канал; в) с процедурой рескейлинга, количество каналов 204, энергетический шаг 15 кэВ на канал; г) с процедурой рескейлинга, количество каналов 102, энергетический шаг 30 кэВ на канал.

Экспериментальным путем было установлено, что количество итераций, равное 100, в большинстве случаев является достаточным для того, чтобы существенно улучшить спектр, при этом время коррекции остается в разумных пределах. Помимо количества итераций, время коррекции зависит от количества каналов детектора. Коррекция спектра во всем энергетическом диапазоне 0,05–3 МэВ, что соответствует 1024 каналам, для 100 итераций занимает примерно 10 часов. Одним из возможных способов уменьшения времени расчета является уменьшение количества каналов, в которых будет произведена коррекция. Так, для спектров ¹³⁴Cs, ¹³⁷Cs, ¹³¹I количество каналов, задействованных при коррекции, может быть уменьшено более чем в два раза по сравнению с начальным.

Уменьшение количества каналов при постоянном энергетическом шаге канала (отбрасывание правой части спектра относительно фотопика) применимо не всегда. Очень часто наперед неизвестно, какие радионуклиды содержит образец. Однако, исходя из анализа спектра радионуклидов, на обнаружение которых рассчитан гамма-радиометр, количество каналов можно уменьшить при помощи процедуры рескейлинга. Суть процедуры заключается в увеличении энергетического шага канала при постоянном энергетическом



Рис.6. Аппаратурный спектр радионуклида ⁴⁰К до (черный цвет) и после (красный цвет) коррекции (количество итераций равно 100): а) без процедуры рескейлинга, количество каналов 1024, энергетический шаг 3 кэВ на канал; б) с процедурой рескейлинга, количество каналов 341, энергетический шаг 9 кэВ на канал; в) с процедурой рескейлинга, количество каналов 204, энергетический шаг 15 кэВ на канал; г) с процедурой рескейлинга, количество каналов 204, энергетический шаг 15 кэВ на канал; г) с процедурой рескейлинга, количество каналов 102, энергетический шаг 30 кэВ на канал.

интервале измерения (в данной статье энергетический интервал измерения равен 0,05-3 МэВ). Для процедуры рескейлинга была написана дополнительная программа, которая меняет количество каналов в аппаратурном спектре и их энергетический шаг. Всего было рассмотрено три варианта рескейлинга энергетической шкалы: 341 канал с шагом 9 кэВ на канал, 204 канала с шагом 15 кэВ на канал, 102 канала с шагом 30 кэВ на канал. Для каждой

Табл.2.	Время	коррекции	спектра	npu	рескейлинге
	/	11 1			/

Радио- нуклид	Кол-во каналов	Шаг канала, кэВ	Время расчета, мин	Используемый диапазон, каналы
	1024	3	66	(0 - 600)
⁴⁰ K	341	9	7,9	(0 - 341)
	204	15	1,6	(0 - 204)
	102	30	0,21	(0 - 102)
	1024	3	7,0	(0 - 345)
124	341	9	7,8	(0 - 341)
¹³⁴ Cs	204	15	1,5	(0 - 204)
	102	30	0,22	(0 - 102)
	1024	3	7,0	(0 - 345)
¹³⁷ Cs	341	9	8,0	(0 - 341)
	204	15	1,6	(0 - 204)
	102	30	0,25	(0 - 102)

Радио- нуклид	Кол-во каналов	Шаг канала, кэВ	Время расчета, мин	Используемый диапазон, каналы
	1024	3	590	(0 - 1023)
2260-	341	9	8,1	(0 - 341)
²²⁰ Ra	204	15	1,6	(0 - 204)
	102	30	0,22	(0 - 102)
	1024	3	590	(0 - 1023)
232771	341	9	7,9	(0 - 341)
2021h	204	15	1,6	(0 - 204)
	102	30	0,22	(0 - 102)

Табл.2. Продолжение.

щим алгоритмом: при объединении нескольких каналов в один количество импульсов в данных каналах складывается.

Из рисунков видно, что алгоритм коррекции и процедура рескейлинга меняют внешний вид спектра, однако для выбранных радионуклидов основные фотопики, по которым происходит их

новой энергетической шкалы была построена своя матрица отклика. Процедура рескейлинга, которой были подвергнуты аппаратурные спектры, в общем виде описывается следуюидентификация, не теряют своей формы и не сливаются с соседними пиками. Существенным преимуществом процедуры рескейлинга является уменьшение времени, затрачиваемого



Рис.7. Аппаратурный спектр радионуклида ²²⁶Ra до (черный цвет) и после (красный цвет) коррекции (количество итераций равно 100): а) без процедуры рескейлинга, количество каналов 1024, энергетический шаг 3 кэВ на канал; б) с процедурой рескейлинга, количество каналов 341, энергетический шаг 9 кэВ на канал; в) с процедурой рескейлинга, количество каналов 204, энергетический шаг 15 кэВ на канал; г) с процедурой рескейлинга, количество каналов 102, энергетический шаг 30 кэВ на канал.

/ НАУЧНЫЕ СТАТЬИ /



Рис.8. Аппаратурный спектр радионуклида ²³²Th до (черный цвет) и после (красный цвет) коррекции (количество итераций равно 100): а) без процедуры рескейлинга, количество каналов 1024, энергетический шаг 3 кэВ на канал; б) с процедурой рескейлинга, количество каналов 341, энергетический шаг 9 кэВ на канал; в) с процедурой рескейлинга, количество каналов 204, энергетический шаг 15 кэВ на канал; г) с процедурой рескейлинга, количество каналов 102, энергетический шаг 30 кэВ на канал.

на алгоритм коррекции аппаратурного спектра (табл.2). Сама же коррекция спектра позволяет существенно увеличить высоту и улучшить форму пиков, что в теории позволит повысить точность механизма автоматического выбора набора радионуклидов за счет повышения вероятности их обнаружения.

Результаты коррекции аппаратурного спектра показывают, что алгоритм на основе *ME-LM* метода практически полностью убирает комптоновское рассеяние, при этом суммарное количество импульсов в спектре остается постоянным. Фотопики в скорректированном спектре имеют более выраженную и явную форму за счет увеличения высоты и уменьшения полной ширины на полувысоте (относительно пиков в исходном аппаратурном спектре), даже если в излучении измеряемого радионуклида квантовый выход линии мал по сравнению с остальными.

Выводы

Применение алгоритма коррекции на основе *ME-LM* метода позволяет существенно улучшить форму аппаратурного спектра, максимально приблизив его к реальному спектру излучения радионуклида. Однако из-за итеративного характера время, затрачиваемое на коррекцию спектра во всем энергетическом диапазоне, составляет несколько часов. Ввиду того, что при итеративном подходе выходные данные предыдущей итерации служат входными данными для последующей итерации, данный алгоритм практически не поддается распараллеливанию. Это обстоятельство не позволяет уменьшить время обработки посредством использования современных многопроцессорных систем.

Одним из вариантов уменьшения времени расчета является уменьшение количества каналов, задействованных в процедуре коррекции. Это можно сделать двумя путями: уменьшением количества каналов при постоянном энергетическом шаге (обрезать спектр справа), либо уменьшением количества каналов при постоянном энергетическом диапазоне (увеличить энергетический шаг канала) – рескейлинг. Первый случай не всегда применим на практике, хотя, как видно из табл.2, он позволяет существенно сократить время без потери информации в спектре.

Второй случай, ввиду изменения энергетического шага канала, уменьшает разрешающую способность детектора и искажает аппаратурный спектр. Однако исходя из условий работы гамма-радиометра: измерение определенных радионуклидов (в заданных энергетических окнах), основные фотопики которых расположены на значительном удалении друг от друга (что позволяет менять шаг энергетической шкалы без опасения слияния двух соседних пиков в один), уменьшение энергетического разрешения и изменение формы аппаратурного спектра рескейлингом практически не приводит к потере информации. Процедура рескейлинга позволяет существенно уменьшить время обработки спектра.

Алгоритм коррекции спектра является математическим по своей природе, поэтому не требует внесения изменений в аппаратную часть гамма-радиометра. В то же время он может быть легко встроен в существующие приборы путем обновления программного обеспечения.

Так как алгоритм коррекции на основе метода *ME-LM* меняет внешний вид аппаратурного спектра (максимально приближая его по форме к спектру излучения радионуклида), то прямое использование алгоритма для уменьшения порога минимально измеряемой активности без введения новой калибровки не представляется возможным. Поэтому в дальнейшем планируется разработка новой методики калибровки гамма-радиометра для возможности применения алгоритма коррекции с целью уменьшения МИА.

Помимо гамма-радиометров, в дальнейшем планируется применение алгоритма коррекции на основе *ME-LM* метода для переносных сцинтилляционных дозиметров, использующих спектрометрический метод дозиметрии с использованием функции радиационного отклика [11]. В данных приборах разрешающая способность не является критическим параметром, поэтому применение алгоритма в теории позволит существенно улучшить их точностные характеристики.

Литература

- Гамма-радиометры РКГ-АТ1320, РКГ-АТ1320А, РКГ-АТ1320В, РКГ-1320С. URL: https://atomtex. com/ru/gamma-radiometry-rkg-at1320-rkg-at1320a-rkg- at1320b-rkg-at1320s (accessed January 20, 2021).
- Загороднюк А.А, Лукашевич Р.В., Сеньковский К.Г., Новиченко А.В. Модифицированный метод коррекции аппаратурного спектра детектора на основе особо чистого германия / /АНРИ. 2020. N 4(103). С. 14-28.
- 3. Y. Vardi, Y. Vardi, I.A. Shepp, L. Kaufman, «A Statistical Model for Positron Emission Tomography», *Journal of the American Statistical Association*, vol. 80 (389), pp. 8-20, 1985.

/ НАУЧНЫЕ СТАТЬИ /

- 4. M. Sohelur, M. Sohelur, C. Gyseong, S. Kang, «Deconvolution of Gamma-Ray Spectra obtained with NaI(Tl) Detector in a Water Tank», *Radiation Protection Dosimetry*, vol. 135, pp. 203-210, 2009.
- 5. J. Meng, D. Ramsden, «An Inter-comparison of Three Spectral-Deconvolution Algorithms for Gammaray Spectrometry», *IEEE Transactions on Nuclear Scienc*, vol. 47, pp. 1329-1336, 2000.
- Fluka-4 Manual. URL: https://flukafiles.web.cern.ch/manual/fluka.html (accessed January 20, 2021).
- 7. B.J. Giuseppe, B.K. Till, C.A. Francesco, W.C. Pik, E.Q. Salvatore, F.O. Alberto, F.M. Alfredo, «Overview of the FLUKA code», *Annals of Nuclear Energy.*, vol. 82, no. 1, pp. 10-18, 2015.
- 8. C.M. Salgado, L.E. Brandroa, R. Schirrub, C.M. Pereira, C.C. Conti, «Validation of a NaI(Tl) detector's model developed with MCNP-X code», *Progr. Nucl. Energy*, vol. 59, pp. 19-25, 2012.
- Загороднюк А.А., Корнеев С.В. Моделирование спектров стандартных образцов урана U₃O₈ SRM-969, измеренных при помощи полупроводникового германиевого детектора / /Известия Национальной академии наук Беларуси. Серия физико-технических наук. 2017. N 3. C. 92-100.
- 10. MCNP A General Monte-Carlo N-Particle Transport Code. Technical Report LA-UR-03-1987. Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, 2005.
- 11. Лукашевич Р.В., Фоков Г.А. Применение спектрометрического метода расчета мощности дозы для создания высокочувствительных образцовых средств измерения на базе сцинтилляционных блоков детектирования / / Приборы и методы измерений. 2017. N 8. C. 246-253.

Application of the Correction Algorithm Based on the ME-LM Method for Improvement of Peak Identification in the Instrumental Spectrum of the Scintillation Gamma-Radiometer

^{1,2} Zaharadniuk Aliaksei, ¹Abalonski Dmitri, ¹ Lukashevich Raman

¹ Scientific Production Unitary Enterprise «ATOMTEX», Minsk, Belarus

² Belarusian State University, Minsk, Belarus

Abstract. The paper considers an algorithm for correcting the instrumental spectrum of the gamma-radiometer with a NaI(Tl) detector. The algorithm is based on the ME-LM method (Maximum Likelihood Estimation using Expectation Maximization), which uses a detector response matrix obtained by Monte Carlo simulation. The main advantage of the algorithm is the rescaling procedure, which significantly reduces the spectrum processing time.

Key words: Monte-Carlo modelling, spectrum correction, gamma-radiometer, Fluka.

А.А.Загороднюк ^{1,2} (инж.), Д.И.Оболонский ¹ (вед.инж.), Р.В. Лукашевич ¹ (нач.сект.). ¹ Научно-производственное унитарное предприятие «АТОМТЕХ», г.Минск, Республика Беларусь.

² Белорусский Государственный университет, г.Минск, Республика Беларусь.

Контакты: тел. +375 29 171-13-72; e-mail: fiz.zagorodnAA@gmail.com.