

Ошибки традиционного подхода к обработке гамма спектров

Дрёмин Геннадий Иванович, инженер

Разбираются некорректные положения и представления, используемые при обработке гамма спектров одним из распространённых методов.

Гамма спектрометрия, обработка гамма спектров

Распространённый подход при обработке гамма спектров – поиск пиков, оценка параметров пиков и оценка присутствия нуклида и его активности по параметрам пиков. Самый распространённый подход при обработке хорошо разрешённых гамма спектров (спектров, полученных на спектрометрах с охлаждаемыми ППД детекторами). Ряд фирм производителей гамма спектрометров и разработчиков программного обеспечения для спектрометров пытаются использовать этот подход и при обработке сцинтилляционных спектров. Метод настолько широко распространён, что можно назвать его традиционным.

В чём здесь ошибки?

1. Площадь пика определяет активность нуклида. Нет — активность нуклида связана с площадью модели пика для нуклида, вписанной в пик, а точнее спектра моделей пиков нуклида вписанной в мультиплеты спектра. Один пик или мультиплет могут формировать десятки (а иногда и сотни) линий разных нуклидов (это верно для ППД спектров, для сцинтилляционных тем более). Для решения проблемы интерференции линий нам нужно формировать общую систему уравнений для всего диапазона обработки спектра. Вот пример интерференции линий в ППД спектре (рис. 1)

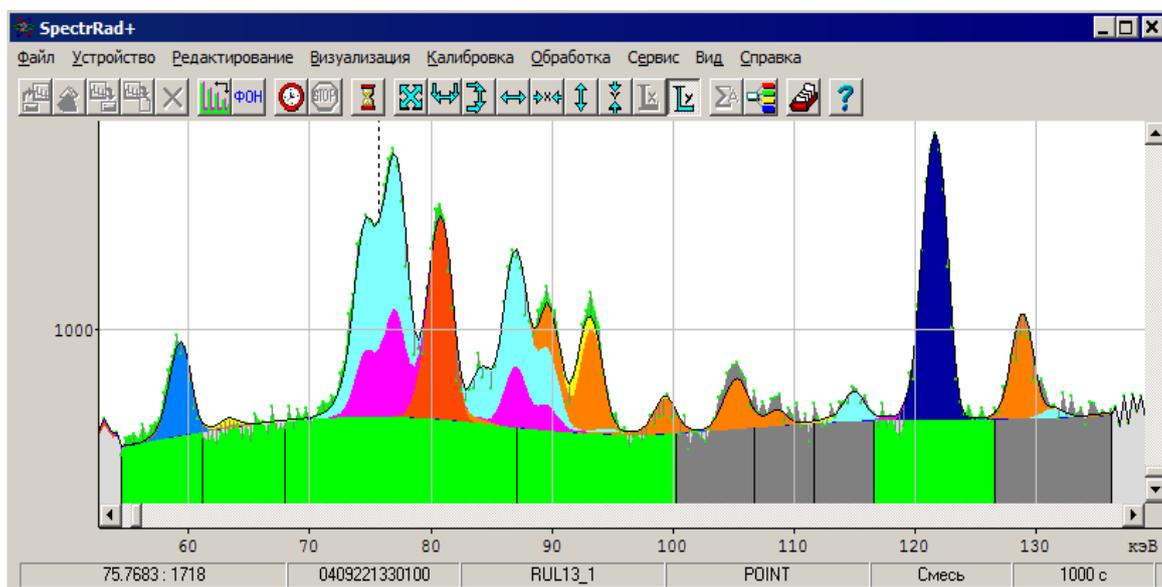


Рис. 1 Спектр смеси нуклидов.

Далеко не самый сложный спектр (всего девять нуклидов). Спектры нуклидов представлены разными цветами. Линий и, соответственно, пиков много больше. Спектр измерен на HPGe детекторе с хорошим разрешением:

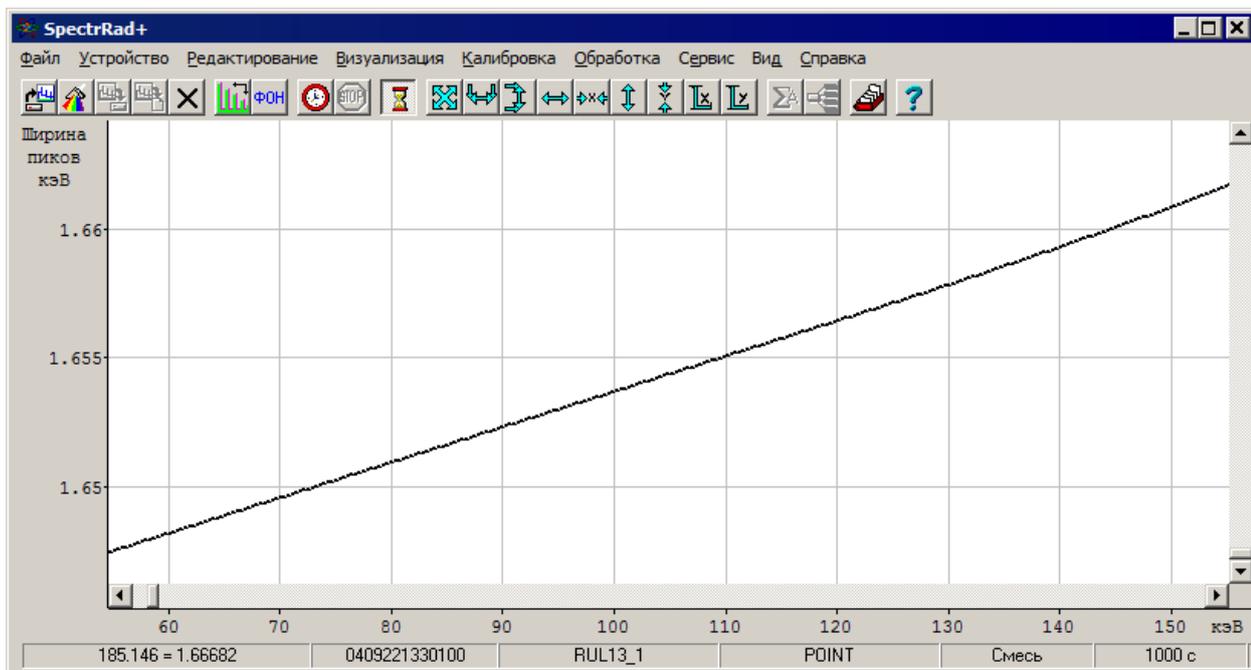


Рис. 2 График функции ширины пиков для данного диапазона спектра.

Это мягкая область спектра, где много линий. В жёсткой области линий и интерференции линий меньше, но в этом спектре, например, программа «СпектрРад» находит только один пик формируемый одной линией – пик формируемый линией 2614.5 кэВ Тl-208. И нередко мы не можем отказаться от анализа низкоэнергетической области.

2. В спектре надо искать пики. Не надо. Зачем их искать?

Для идентификации нуклидов присутствующих в спектре? Такая идентификация работает крайне плохо. Для того, чтобы разобраться какие нуклиды присутствуют в спектре надо смотреть на весь спектр, а не на один короткий участок. Предположим мы увидели в спектре пик 1173.2 кэВ Co-60. Но он может принадлежать и линии Вi-214 (1173.0) и Sn-125 (1173.3) и Re-184m (1173.7). И если мы ограничимся коротким участком спектра, то ничего понять не сможем. Но стоит посмотреть на область пика 1332.49 кэВ, а там нет близко расположенных пиков ни Вi-214, ни Sn-125, ни Re-184m и всё понятно. Процедура поиска пиков использует либо расчёт производных для спектра, либо свёртку с моделью пика. И свёртка с моделью пика работает, на мой взгляд, лучше всего. Лучше других методов, поскольку при этом учитывается форма пика. Свёртка – основная процедура в задачах распознавания образов. И она хороша и тем, что образ может быть любым. В данном случае я использую свёртку с моделью спектра нуклида. Прекрасно работает. Перепробовано много методов – лучший вариант свёртка с моделью спектра нуклида. Модель может быть и полной (включать спектр комптоновского рассеяния и тормозного бета частиц) и неполной – спектром пиков нуклида (цепочки нуклидов). Для идентификации нуклидов в спектре надо искать не пики, надо искать спектры (образы) нуклидов. И надо понимать, что это только предварительный анализ нуклидного состава. Окончательный ответ в численном выражении количества нуклида в пробе даёт только декомпозиция спектра – разложение спектра на спектры нуклидов.

Может быть пики надо искать, чтобы разбить спектр на «зоны интереса» для формирования системы уравнений? Нам же надо для решения задачи

интерференции формировать систему уравнений, а зачем нам уравнения вида $0 \cdot x = 0$, для «пустых» участков спектра. Не нужны. Но уравнения вида $a \cdot x = 0$ для участков, где нет пиков, но есть линии нуклидов нам очень нужны. Пропустить их будет большой ошибкой. То есть все «зоны интереса» определяются списком подозреваемых нуклидов и библиотекой линий этих нуклидов.

Может пики надо искать для того, чтобы отделить от пиков спектр непрерывного рассеяния (комптон и тормозное бета частиц)? Но как обычно это делается – спектр раскладывается на спектры (модели) пиков и полином (или сплайн, в программе SpectraLine, фирмы ЛСРМ, например) аппроксимирующий спектр непрерывного рассеяния. Но в большинстве программ и отечественных и западных фирм это разложение делается для одной «зоны» интереса – одного короткого участка спектра и разложение делается на полином (сплайн-сшитый полином) и модели пиков независимо для каждой зоны интереса. В пакете «СпектрРад» разложение производится для всего используемого для обработки энергетического диапазона (точнее – для всех «зон интереса») спектра или группы спектров. И разложение производится на спектры нуклидов и сплайн, аппроксимирующий спектр непрерывного рассеяния для тех нуклидов, которые в списке компонент разложения представлены не полными спектрами, а спектрами пиков. Итог – эффективные и надёжные оценки наличия нуклидов, их активностей и неопределённостей оценивания.

А пики искать не надо. Тем более, что сцинтилляционные спектры сплошь и рядом представляют собой один сплошной мультиплет от начала до конца спектра – чего его искать?

Кроме того, даже в обычных гамма спектрах пики формируются линиями разной формы (гамма линии отличаются от рентгеновских, а аннигиляционный пик всегда шире обычных). А, например, в гамма спектре, полученном при измерении пробы во время облучения нейтронами, пики сильно отличаются по ширине, поскольку доплеровское уширение линии зависит от энергетического спектра сечения поглощения нейтронов для разных нуклидов. Поэтому, например, пик Бора раз в пять шире обычных пиков и на нём могут торчать узкие пики других нуклидов. Спрашивается — как с ними разобраться при поиске пиков? Трудно. А для подхода, когда мы не ищем пики, а раскладываем спектр на спектры подозреваемых нуклидов — никаких проблем (спектр пиков бора будет состоять из пиков бора). Подозреваемых нуклидов в моём пакете «СпектрРад» можно указать до сотни, или включить автоматический анализ нуклидного состава (анализ по свёртке спектров нуклидов со спектром пробы – распознавание образов нуклидов в спектре).

Понятно зачем мы используем не полные отклики (спектры) нуклидов, а спектры пиков – их на порядок проще рассчитать, легко рассчитать их ослабление при прохождении гамма квантов через материал пробы, защиты, среды. Но если есть возможность рассчитать полные отклики спектрометра на излучение нуклида (полные спектры нуклидов) и нет нужды пересчитывать их в зависимости от материала пробы, защиты, среды, лучше использовать полные спектры нуклидов – оценки будут эффективнее. Для этого пакет «СпектрРад» предоставляет достаточно возможностей (https://spectrad.ru/sites/default/files/spectrad_eng.pdf).

Да, объединение всех частных систем уравнений в одну общую и технически непросто и новые проблемы появляются. Но сейчас это необходимо. И современное состояние

информации по ядерно-физическим данным и возможности современных компьютеров позволяют это делать. Иначе мы остаёмся, в лучшем случае, в середине двадцатого века.

Дополнительные возможности пакета в повышении эффективности оценивания (совместная обработка спектров, учёт начальных активностей нуклидов в цепочках распада) опубликованы на сайте: <https://spectrrad.ru/index.php/problemsyresheniya-htm/estimation-efficiency>

18.04.2025