TH9800084

โปรแกรมวิเคราะห์สเปคตรัมของรังสีแกมมา Sigmas 1.0

ปริวรรต เสียงสนั่น วันชัย ธรรมวานิช และ สมพร จองคำ
กองฟิสิกส์ สำนักงานพลังงานปรมาณูเพื่อสันติ โทรศัพท์ 5614080 โทรสาร 5613013

บทคัดย่อ

ได้ทำการพัฒนาโปรแกรม Sigmas 1.0 สำหรับวิเคราะห์สเปคตรัมของรังสีแกมมาช่วงพลังงาน 0-3 MeV จากหัววัดรังสีแบบสารกึ่งตัวนำ Ge(Li) หรือ HPGe นอกจากนั้น ยังสามารถใช้ค้นหาพีค คำนวณพื้นที่ใต้พีค มีคำสั่งให้พลอตสเปคตรัม พิมพ์และแสดงภาพบนจอในลักษณะต่าง ๆ การคำนวณพื้นที่ใต้พีคมี 2 วิธีคือ วิธีของ Covell และวิธีการทำให้เข้ารูปด้วยฟังก์ชันวิเคราะห์ (analytic function) โดยอาศัยวิธีของ Levenberg และ Marquardt โปรแกรมสามารถฟิตพีคที่ซ้อนกันเป็นจำนวนมากได้ ทั้งยังมีภาคแสดงผลเป็นรูปกราฟที่มีความเร็วมากพอสมควร

Gamma Ray Spectrum Analysis Code : Sigmas 1.0

Pariwat Siangsanan, Wanchai Dharmavanij and Somporn Chongkum
Physics Division, Office of Atomic Energy for Peace, Tel. 5614080 Fax. 5613013

ABSTRACT

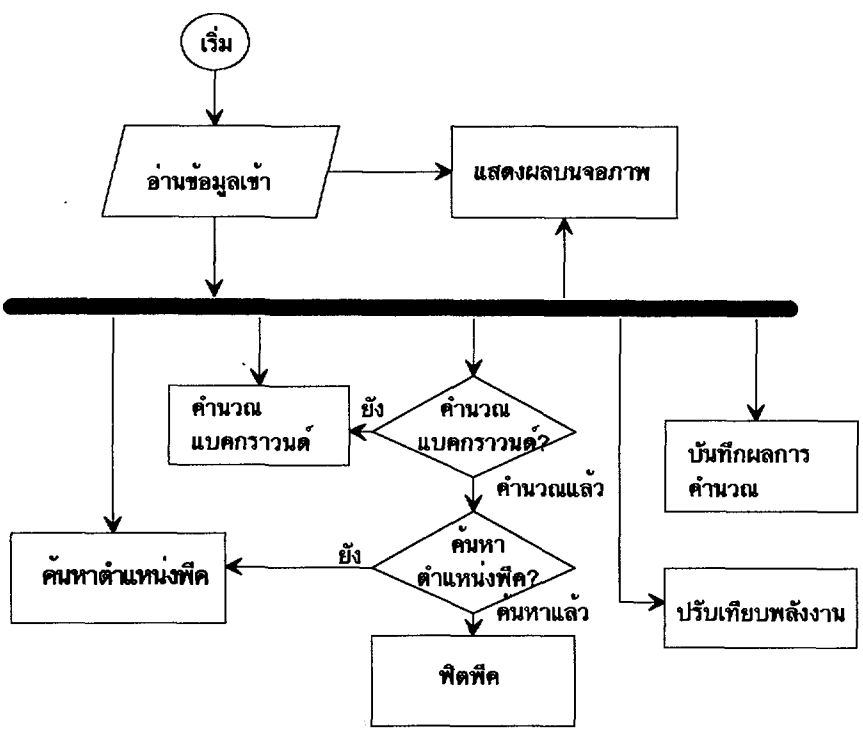
We have developed Sigmas 1.0 a software package for data reduction and gamma ray spectra evaluation. It is capable of analysing the gamma-ray spectrum in the range of 0-3 MeV by semiconductor detector, i.e. Ge(Li) or HPGe, peak searching, net area determining, plotting and spectrum displaying.There are two methods for calculating the net area under peaks; the Covell method and non-linear fitting by the method of Levenberg and Marquardt which can fit any multiplet peak in the spectrum. The graphic display was rather fast and user friendly.

1. บทนำ

ในปัจจุบันได้มีการนำโปรแกรมคอมพิวเตอร์ มาใช้ในการวิคราะห์ข้อมูลรังสีแกมมา กันอย่างแพร่หลาย โปรแกรมเหล่านี้ต้องสั่งซื้อมาจากต่างประเทศในราคาแพง และบางครั้งโปรแกรมที่ใช้ก็มีคุณสมบัติบางอย่างขาดไป หรือไม่ตรงตามวัตถุประสงค์ที่จะใช้งาน ดังนั้นทางกองฟิสิกส์จึงได้ทำการพัฒนาโปรแกรม วิคราะห์สเปคตรัมของรังสีแกมมาขึ้น โดยให้ชื่อโปรแกรมนี้ว่า Sigmas for Windows เวอร์ชัน 1.0 โปรแกรมที่พัฒนาขึ้นนี้จะทำงานบน Windows เนื่องจากมีข้อดี อยู่มากมาย อาทิเช่น การทำงานแบบ Multi Tasking และทรัพยากร(Resource) ต่าง ๆ มี อยู่เป็นจำนวนมากสามารถนำไปใช้ได้เลย เป็นต้น เทคนิคที่ใช้ในการเขียนการเขียนเป็นแบบ OOP (Object Oriented Programming) ผสมผสานกับ เทคนิคแบบเก่า(Non-OOP) โดยใช้โปรแกรมแปลภาษา Borland C++ 3.1 for Windows

2. วัสดุอุปกรณ์และวิธีการ

ขั้นตอนวิธีการคำนวณของโปรแกรม Sigmas 1.0 มีรายละเอียดดังแผนผังในรูปที่ 1



รูปที่ 1 แผนผังขั้นตอนการคำนวณ

2.1 การอ่านข้อมูลเข้า

ข้อมูลที่อ่านเข้าเป็นข้อมูลแบบตัวเลข (numeric) อยู่ในรูปรหัสแอสกี (ASCII) โดยในแต่ละฟิลด์จะแสดงค่านับวัดในแต่ละช่อง (counts per channel)

2.2 การแสดงผลบนจอภาพ

การนำข้อมูลสเปคตรัมมาแสดงผลบนจอภาพมีสองลักษณะคือ การแสดงผลแบบเต็มสเปคตรัมและการแสดงผลเฉพาะบริเวณที่สนใจ ในแบบหลังจะแบ่งจอภาพออกเป็นสองส่วน ครึ่งล่างจะเป็นส่วนของสเปคตรัมเต็ม ครึ่งบนจะเป็นส่วนของสเปคตรัมที่สนใจที่อยู่ในกรอบสี่เหลี่ยมไข่ปลาในสเปคตรัมครึ่งล่าง และทั้งสองแบบสามารถเลือกสเกลของแกนตั้งให้เป็นลอการิทึมหรือแบบเชิงเส้นก็ได้

2.3 การค้นหาตำแหน่งพีค(Peak Search)

การค้นหาตำแหน่งของพีคทำได้โดยอาศัยสมการ

$$C_i = \sum_{i-2}^{i+2} C_k - \frac{5}{6}\left(\sum_{i-6}^{i-4} C_k + \sum_{i+4}^{i+6} C_k\right) \qquad (1)$$

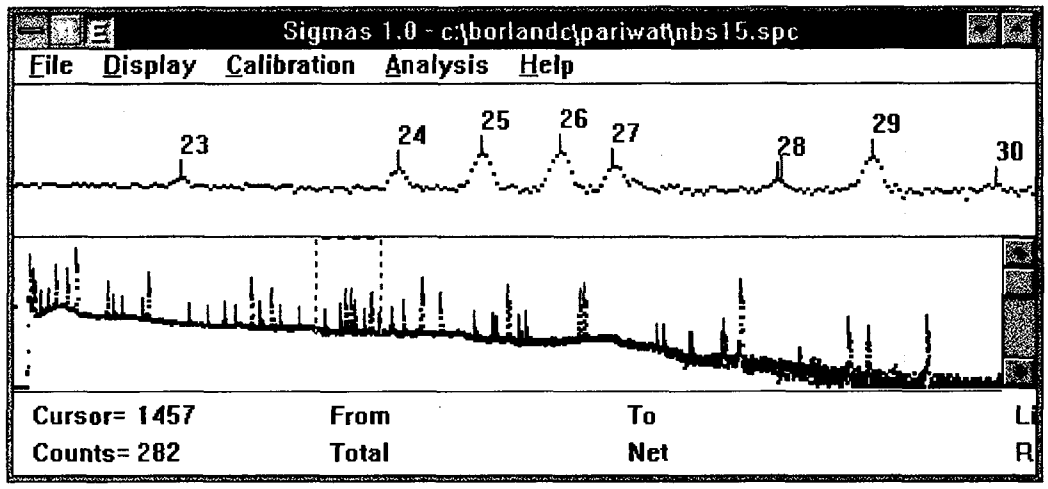
เมื่อ C_i คือ ค่านับวัดที่ตำแหน่ง i

และจะถือว่า i คือตำแหน่งของพีคถ้าหาก C_i ตอบสนองเงื่อนไขต่อไปนี้

1. $C_i > \frac{5}{6}\left(\sum_{i-6}^{i-4} C_k + \sum_{i+4}^{i+6} C_k\right)$

2. $C_i > C_{i-1}$ และ $C_i \geq C_{i+1}$

เมื่อค้นหาได้แล้วจะทำเครื่องหมายและระบุหมายเลขลำดับไว้ในแต่ละพีคดังแสดงในรูปที่ 2



รูปที่ 2 แสดงผลการค้นหาตำแหน่งพีค เมื่อค้นพบแล้วจะทำเครื่องหมายขีดสีแดงที่ยอดพีค

2.4 การคำนวณแบคกราวนด์(Background Calculation)

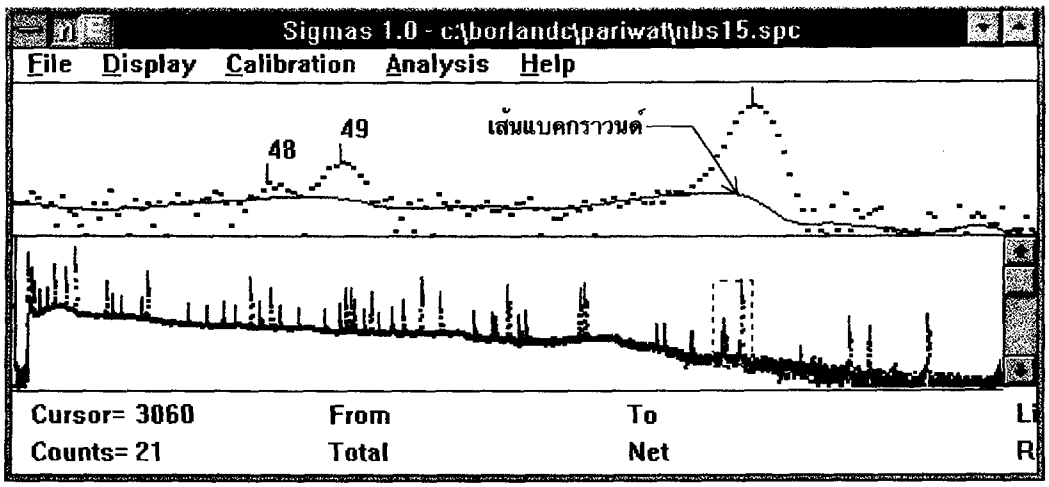
คำนวณแบคกราวนด์โดยใช้ขั้นตอนวิธีการคำนวณของโปรแกรม TPASS[1] โดยกำหนดให้ W_i เป็นน้ำหนักของค่านับวัดในแต่ละช่อง เริ่มต้นให้ $W_i = 1$ จะคำนวณค่าแบคกรานด์ B_k ในแต่ละช่อง k ได้ดังนี้

$$B_k = \sum_{i=k-N/2}^{k+N/2} \frac{W_i C_i}{W_k} \qquad \text{โดยที่} \qquad W_k = \sum_{i=k-N/2}^{k+N/2} W_i \tag{2}$$

แล้วใช้เงื่อนไข

1. ถ้า $C_i - B_i > \sqrt{2C_i}$ ให้ $W_i = 0$
2. ถ้า $B_i > C_i$ ให้ $W_i = 1$
3. ถ้า $B_i > C_i + \sqrt{2C_i}$ ให้ $B_i = C_i + \sqrt{2C_i}$

หลังจากนั้นคำนวณซ้ำโดยสมการ (2) เป็นจำนวนรอบมากเท่าที่ต้องการ แล้วทำการสมูธ B_k ด้วยการสมูธแบบ 10 จุด (ten-point smoothing) ดังแสดงในรูปที่ 3



รูปที่ 3 แสดงผลการคำนวณแบคกราวนด์ หลังจากคำนวณแล้วจะลากเส้นแบคกราวนด์เป็นสีเขียวในสเปคตรัม

2.5 การฟิตพีค(Peak Fitting)

ใช้เทคนิค non-linear least square ของ Marquardt[2] ฟังก์ชันที่ใช้ในการฟิตคือ[3]

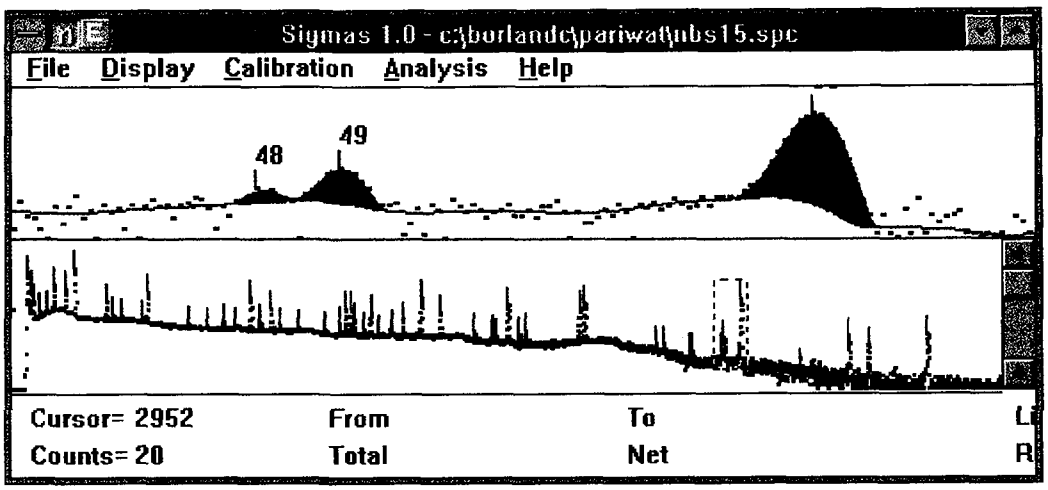
$$f(x) = \begin{cases} P_1 e^{P_4(2x-2P_2+P_4)/2P_3^2} & \text{for } x < P_2 - P_4 \\ P_1 e^{-(x-P_2)/2P_3^2} & \text{for } x > P_2 - P_4 \end{cases} \quad (3)$$

เมื่อ P_1 = ความสูงของพีค

P_2 = ตำแหน่งของพีค

P_3 = ความกว้างของพีค(ความเบี่ยงเบนมาตรฐาน)

P_4 = ระยะห่างจากยอดพีคถึงจุดที่ฟังก์ชันเปลี่ยนจาก exponential เป็น Gaussian



รูปที่ 4 แสดงผลการฟิตพีค แถบสีในแต่ละพีคคือพื้นที่ใต้พีคที่ได้จากการฟิต

2.5.1 การเติมและกำจัดพีค (Adding and Deleting Peaks)

ในกรณีที่สับรูทีน Peak Search ไม่สามารถค้นหาพีคได้ ผู้ใช้สามารถกำหนดตำแหน่งของพีคเพิ่มลงไปในสเปคตรัมได้ และถ้าต้องการลบตำแหน่งของพีคใด ๆ ก็สามารถทำได้

2.6 การปรับเทียบพลังงาน (Energy Calibration)

ปรับเทียบพลังงานโดยใช้สมการ

$$E = aX^2 + bX + c \qquad (4)$$

โดยที่ E คือ พลังงาน

X คือ หมายเลขช่อง (channel number)

a, b, c คือ พารามิเตอร์ที่ได้จากการฟิตโดยอาศัยข้อมูลจากรังสีแกมมาอ้างอิงมาตรฐาน (standard reference)

2.7 การบันทึกผลการคำนวณ (Filing and Displaying Results)

2.7.1 บันทึกในหน่วยความจำของโปรแกรม

ในกรณีที่ไม่ต้องการเก็บผลเพื่อใช้อ้างอิงต่อไป ผลการคำนวณจะถูกเก็บไว้ในหน่วยความจำและสามารถนำมาแสดงบนจอภาพเมื่อต้องการ

2.7.2 การบันทึกลงในแฟ้มข้อมูล

ในกรณีที่ต้องการนำผลคำนวณไปใช้อ้างอิง ผลการวิเคราะห์จะถูกเก็บเป็นรหัสแอสกี (ASCII) ไว้ในไฟล์ .SGM ซึ่งมีรูปแบบ (format) ดังตัวอย่างข้างล่าง

SIGMAS - Version 1.0

Analysis Report

Date : 25/3/1995

Source File : c:\borlandc\pariwat\nbs15.spc

PK	IT	ENERGY	CHANNEL	FWHM	AREA	%ERROR	R-CHISQ
1	6	42.34	68.02	2.72	157375.34	9.19	1.33e+03
2	5	48.19	81.94	2.40	30617.29	5.78	1.02e+02
3	5	49.58	85.24	2.03	7894.17	11.39	1.02e+02
4	7	59.72	109.36	2.12	1830.69	7.49	1.03e+01
5	3	74.72	145.05	3.44	1927.89	18.90	6.88e+01
6	7	86.39	172.81	2.37	46813.89	5.77	1.56e+02
7	8	105.28	217.76	2.44	31390.14	1.83	1.06e+01
8	8	123.12	260.22	2.49	242531.66	1.13	3.07e+01
9	7	176.54	387.40	2.58	10608.85	1.85	3.62e+00

4. บทวิจารณ์และสรุปผล

4.1 แบคกราวนด์ที่คำนวณได้จะมีลักษณะเฉพาะตัว เนื่องจากใช้ข้อมูลในแต่ละสเปคตรัมในการคำนวณ ต่างจากการใช้ฟังก์ชันวิเคราะห์ เช่น ฟังก์ชันเส้นตรง ฟังก์ชันพาราโบลา หรือ ฟังก์ชันคอมพลิเมนทารีเออเรอร์ เป็นต้น โดยสรุปได้ดังนี้

คำนวณโดย TPASS	ใช้ฟังก์ชันวิเคราะห์
กำหนดขอบเขตในการฟิตพีคได้แน่นอน	ขอบเขตในการฟิตพีคมีผลกระทบต่อคุณภาพของการฟิตมาก
ลักษณะของแบคกราวนด์จะสอดคล้องกับรูปร่างของแต่ละพีค	แบคกราวนด์ที่ฟิตได้อาจบิดเบือนจากที่ควรจะเป็น

ซึ่งทำให้การฟิตพีคในแต่ละสเปคตรัมมีความคงเส้นคงวา (consistent)

4.2 โปรแกรมสามารถใช้งานในการวิเคราะห์เชิงคุณภาพแต่ยังไม่มีส่วนของ Isotope Identification เท่านั้น ส่วนการใช้งานในการวิเคราะห์เชิงปริมาณ จะได้ทำการพัฒนาต่อไป

5. เอกสารอ้างอิง

1. ORNL-5732 Dist. Category UC-32.

2. William H. Press, Brian P. Flannery, Saul A. Teukolsky and William T. Vetterling, NUMERICAL RECIPES in C The Art of Scientific Computing, Cambridge University Press,Cambridge,1991.

3. K. Debertin and R.G. Helmer, GAMMA- and X-RAY SPECTROMETRY with SEMICONDUCTOR DETECTOR, Elsevier Science Publisher B.V., Amsterdam, 1988.