

Una comparación en la reconstrucción de espectros de neutrones utilizando técnicas iterativas clásicas

Ortiz-Rodríguez J.M.^{1,3}, Martínez-Blanco M.R.², Gallego, E⁴, Vega-Carrillo H.R.^{1,2,3}*

Universidad Autónoma de Zacatecas:

*Unidades Académicas: Ingeniería Eléctrica¹, Estudios Nucleares²
Av. Ramón López Velarde #801, Col. Centro, Zacatecas, México*

*³Departamento de Electrotecnia y Electrónica, Escuela Politécnica Superior³
Avda. Menéndez Pidal, s/n - Escuela Politécnica Superior, Córdoba Spain.*

*⁴Universidad Politécnica de Madrid
Departamento de Ingeniería Nuclear
Madrid, España*

morvymmyahoo@com.mx

Resumen

Una de las principales desventajas con el uso del código BUNKI es que el proceso comienza la reconstrucción del espectro en base a un conocimiento a priori, tan cerca como sea posible a la solución que se desea obtener. El usuario tiene que especificar el espectro inicial o realizarlo a través de una subrutina denominada MAXIET para calcular una Maxwelliana y un espectro 1/E como espectro inicial. Debido a que la aplicación de procedimientos iterativos para resolver la reconstrucción del espectro de neutrones necesita un espectro inicial, es necesario contar con nuevas propuestas para la elección del mismo. En base a la experiencia obtenida con un método de reconstrucción ampliamente usado, denominado BUNKI, se ha desarrollado una nueva herramienta de cómputo para la espectrometría y dosimetría de neutrones, la cual se presenta por primera vez, misma que opera por medio de un algoritmo iterativo para la reconstrucción de espectros de neutrones. La característica principal de esta herramienta, radica en que a diferencia de los códigos iterativos existentes, la selección del espectro inicial la realiza el programa de forma automática, por medio de un catálogo de espectros de neutrones. Para el desarrollo del código, se seleccionó el algoritmo iterativo SPUNIT como la rutina a ser utilizada en la herramienta de cómputo y la matriz de respuesta UTA4 para 31 grupos de energía.

1. ANTECEDENTES

En 1960 R.L. Bramblett, R.I. Swing y T.W. Bonner describieron un espectrómetro de neutrones compuesto de detectores de neutrones térmicos cubiertos con esferas de polietileno [1]. En principio, a medida que los neutrones atraviesan las esferas de polietileno, se dispersan de las

* Buzón electrónico del autor principal: morvymm@yahoo.com.mx

mismas neutrones epitérmicos y rápidos perdiendo energía hasta que alcanzan el equilibrio térmico o salen del moderador. El detector responde a los neutrones térmicos que llegan hasta donde se encuentra el centro de la esfera moderadora. Cada combinación de detector-moderador tendrá una respuesta diferente a los neutrones en función de la energía. A partir de las tasas de conteo tomadas con las esferas, se puede reconstruir el espectro, el cual proporciona información acerca de la distribución de energía de los neutrones incidentes. Este tipo de espectrómetro de neutrones se conoce comúnmente como Sistema Espectrométrico de Esferas de Bonner (SEEB) y a las esferas de polietileno se les llama esferas de Bonner.

En el SEEB, cada detector se caracteriza por una función de respuesta. A medida que se incrementa el tamaño del moderador, el pico de la función de respuesta cambia a energías mayores de neutrones. La relación entre la función de respuesta, las tasas de conteo del detector y la fluencia de neutrones se describe a través de la ecuación integro-diferencial de Fredholm de primer tipo [2-6].

Debido a que el número de detectores es menor que el número de grupos de energía utilizados para describir el espectro, no existe una solución única y por tanto se deben aplicar procedimientos de reconstrucción. Existen varios métodos de reconstrucción y la mayoría de ellos, excepto los que se basan en métodos Monte Carlo, utilizan rutinas iterativas, éstos necesitan se les proporcione una solución inicial para comenzar la reconstrucción. Ejemplos de códigos de reconstrucción son LOHUI, SAND I y II, MAXED, BONDI, BUNKI, etc. Una observación interesante relacionada con el uso de estos códigos de reconstrucción, es que la calidad de la solución final es afectada ampliamente por el espectro inicial [7].

Los códigos BUNKI, y la versión de computadora personal BUNKIUT, son códigos de reconstrucción de espectros de neutrones ampliamente aceptados, los cuales han sido utilizados por los investigadores por más de 3 décadas. En 1983 K.A. Lowry y T.L. Johnson desarrollaron el código de cómputo denominado BUNKI [8]. Este código se escribió en lenguaje FORTRAN versión IV, mismo que se podía ejecutar en una computadora DEC-10. Posteriormente, en 1986, la Universidad de Texas en Austin desarrolló la versión de computadora personal denominado BUNKIUT, la cual contenía las mismas características del código BUNKI original, pero que agregó una rutina adicional para el graficado de los espectros. En 1993, Miller realizó modificaciones al código BUNKI, especialmente con lo que se refiere a las matrices de respuesta y las cantidades dosimétricas a calcular, denominando a esta herramienta de cómputo AFITBUNKI [8]. A partir de entonces el código BUNKI ha sufrido diversos cambios, como los realizados por Sweezy et al [9].

Dentro de las características que distinguen al código BUNKI se pueden mencionar las siguientes: el usuario del código elige reconstruir el espectro usando uno de dos métodos, los algoritmos SPUNIT o BON31G, estos algoritmos se escribieron como códigos de reconstrucción individuales utilizando métodos de recursión iterativos para reconstruir el espectro, reduciendo la desviación entre las respuestas del detector calculadas y medidas.

Una de las principales desventajas que presenta el código BUNKI, es que el usuario tiene que proporcionar un conocimiento a priori del espectro, esto es, para obtener el espectro de neutrones,

el usuario tiene que proporcionar al programa un espectro inicial que esté lo mas cerca posible a la solución que desea obtener, lo que en la práctica resulta muy difícil, ya que en la mayoría de las ocasiones el espectro que se desea medir es desconocido. En el código BUNKI, el usuario puede especificar un espectro inicial o realizarlo a través de una subrutina denominada MAXIET para calcular una Maxwelliana y un espectro 1/E como espectro inicial. Además, este código le permite al usuario seleccionar una de nueve matrices de respuesta para reconstruir el espectro.

De acuerdo con Vega et al., el uso de procedimientos iterativos para resolver un problema mal condicionado, como es la reconstrucción del espectro de neutrones, necesita un espectro inicial, lo que en la práctica resulta una tarea difícil, ya que la selección adecuada de este espectro inicial afecta en gran medida la calidad de la solución obtenida, por lo que es necesario contar con nuevas propuestas tendientes a resolver el mismo [7].

En el presente trabajo se presenta una herramienta de cómputo gráfica, amigable e intuitiva para el usuario final, la cual esta orientada a la espectrometría de neutrones, basada en técnicas iterativas de reconstrucción de espectros. Esta herramienta, a diferencia de herramientas clásicas, basadas en métodos iterativos y utilizadas para el mismo fin, como los códigos BUNKI, SAND, MAXED, etc., además de poseer un entorno gráfico, utiliza un procedimiento novedoso para la selección del espectro inicial, automatizando la selección del mismo a través de un catalogo de espectros de neutrones, mismo que ofrece mejores resultados comparados con los procesos de selección utilizados hasta ahora.

2. MATERIALES Y MÉTODOS

Como se mencionó con anterioridad, el espectro de neutrones reconstruido por medio de métodos iterativos, a partir de las lecturas tomadas de las esferas de Bonner, es altamente dependiente del espectro inicial, lo que representa un serio problema al utilizar los mismos, por lo que es necesario contar con nuevas propuestas para la elección de éste. El método utilizado en el desarrollo de esta herramienta de cómputo, la cual se realizó en el entorno de programación de LabVIEW®, se basa en el trabajo realizado por Vega-Carrillo et al, en 2002, el cual propone se utilice un catalogo de las tasas de conteo del detector calculadas a partir de un conjunto de espectros de neutrones reportados en la literatura por la AIEA. En esta aplicación se implementa la automatización de este procedimiento, basado en el catalogo de espectros de neutrones, para seleccionar el espectro inicial.

Para el desarrollo de este programa, se utilizó el algoritmo iterativo para la reconstrucción de espectros denominado SPUNIT, una de las dos rutinas iterativas de reconstrucción contenidas en el código BUNKI, ya que estudios anteriores demuestran que es el mas utilizado entre los investigadores, se utilizó también la matriz de respuesta de las esferas de Bonner, desarrollada en la Universidad de Texas en Austin, denominada UTA4, la cual ha demostrado ser la mas utilizada entre los investigadores [8]. La misma se utiliza para detectores de esferas de Bonner del tipo ⁶LiI(Eu). La resolución espectral se ha definido para 31 grupos de energía.

2.1. El Algoritmo de Reconstrucción SPUNIT

La matriz de respuesta de un conjunto de esferas de Bonner se podría escribir como:

$$c_j = \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} R_j(E) \Phi(E) dE \quad j = 1, 2, \dots, N \quad (1)$$

En donde c_j es la tasa de conteo en el j -ésimo detector, $R_j(E)$ es la respuesta del j -ésimo detector en función de la energía del neutrón, $\Phi(E)$ es la tasa de fluencia del neutrón en función de la energía, y N es el número total de detectores. La ecuación formalmente conocida como ecuación integro-diferencial de Fredholm de primer tipo, no se puede resolver para esta aplicación debido a que $R_j(E)$ no es una función analítica continua. Sin embargo, se puede aproximar por medio de un sistema de ecuaciones lineales de la forma siguiente:

$$c_j = \sum_{k=1}^M R_{jk} \Phi_k \quad j = 1, 2, \dots, N \quad (2)$$

En donde R_{jk} es la respuesta del j -ésimo detector a los neutrones en el k -ésimo intervalo de energía multiplicado por el ancho del k -ésimo intervalo de energía, y M es el número de intervalos de energía. A R_{jk} se le conoce como la matriz de respuesta. Si $M < N$ el sistema está sobre determinado por lo que no se puede encontrar una solución única. Si $M \geq N$ y ambos son relativamente pequeños (aproximadamente = 10), existe una solución única, pero no completamente resuelta. Si, como es el caso de la mayoría de las ocasiones, $M \gg N$, el sistema es indeterminado; siempre existe un error y no existe una solución única. Sin embargo, se puede aplicar un conocimiento a priori que se anticipa a la forma de un espectro de fluencia de neutrones y se puede encontrar una solución que se ajusta con la estimación del error mínimo.

Para la realización de este trabajo se seleccionó el algoritmo SPUNIT como la rutina a ser utilizada dentro del diseño de la herramienta de cómputo. La siguiente ecuación, muestra la base del algoritmo SPUNIT, el cual es una fórmula de recursión muy eficiente creada por Doroshenko et al [8].

$$\Phi_k^{i+1} = \frac{\Phi_k^i}{\sum_j \frac{R_{jk}}{C_0^j}} \sum_j \frac{R_{jk}}{C_j^i} \quad (3)$$

C_0^j son las cuentas medidas en el j -ésimo detector, C_j^i son las cuentas calculadas en el j -ésimo detector durante la i -ésima iteración y Φ_k^i es la fluencia del k -ésimo intervalo de energía durante la i -ésima iteración.

El proceso de reconstrucción comienza asumiendo una solución para Φ_k en base a un conocimiento a priori. Las cuentas del detector para la solución asumida se calculan usando la ecuación 2. Entonces se resuelve la ecuación 3 para cada intervalo de energía k , utilizando la

solución asumida Φ_k^i , las cuentas medidas del detector C_0^j y las cuentas calculadas del detector C_j^i de tal forma que se encuentre una nueva solución. Este proceso se itera hasta que se cumple un criterio de convergencia.

En BUNKI, el criterio de convergencia es una de tres condiciones. Si el error promedio calculado del ajuste alcanza satisfactoriamente el valor especificado por el usuario, o converge rápidamente a algún valor diferente del especificado por el usuario, o se alcanza el número máximo de iteraciones especificadas por el usuario. Pero a consecuencia de que en la mayoría de las ocasiones se desconoce el espectro que se desea medir, la selección del espectro inicial se torna en una tarea complicada.

El objetivo del presente trabajo fue desarrollar una herramienta de cómputo en un ambiente gráfico y que fuera fácil de utilizar, mismo que resuelva de mejor manera las actuales necesidades en materia de seguridad radiológica, de las investigaciones que se llevan a cabo en el presente, en lo que se refiere a la espectrometría y dosimetría de neutrones. Lo anterior se consiguió tomando como base el algoritmo iterativo para la reconstrucción de espectros de neutrones denominado SPUNIT y construyendo a partir del mismo, el marco sobre el cual se desarrolla la aplicación.

Además de la reconstrucción de los espectros y el cálculo de las dosis equivalentes, la presente herramienta propone una solución alternativa para el serio problema que presentan las herramientas de cómputo utilizadas en la actualidad para la reconstrucción de espectros de neutrones, basadas en métodos iterativos, mismas que requieren un espectro inicial tan cercano como sea posible al espectro que se desea reconstruir. Para conseguir lo anterior, se automatizó el proceso de selección del espectro inicial tomando como base el trabajo realizado por Vega-Carrillo et al en 2002 [7], implementándolo en el desarrollo de este código, resolviendo con ello uno de los principales inconvenientes de los programas basados en métodos iterativos.

3. RESULTADOS

El desarrollo de esta herramienta se está realizando en varias etapas. En este trabajo se muestran resultados preliminares, correspondientes a la primera etapa, la cual consistió en identificar las rutinas constituyentes de los códigos BUNKI y BUNKIUT y seleccionar aquellos elementos que serían tomados en consideración para el desarrollo del programa. Como se menciona con anterioridad, en el desarrollo de esta aplicación se utilizó el algoritmo SPUNIT y la matriz de respuesta UTA4. El código descrito, que en su versión preliminar se ha denominado NSDUAZ (del inglés, Neutron Spectrometry and Dosimetry of the Universidad Autónoma de Zacatecas, Espectrometría y dosimetría de neutrones de la Universidad Autónoma de Zacatecas) se realizó bajo el entorno de programación de LabVIEW, en un ambiente gráfico, intuitivo y amigable para el usuario final, tal como se observa en la figura 1, en donde se aprecia la carátula principal de la misma, la cual tiene como particularidad que únicamente solicita como datos de entrada, las tasas de conteo provenientes del SEEB.

En esta versión preliminar, NSDUAZ es capaz de reconstruir únicamente el espectro de neutrones, quedando pendiente la parte dosimétrica, la cual es calculada a partir del espectro obtenido, misma que se desarrollará en una segunda etapa de construcción de la misma.

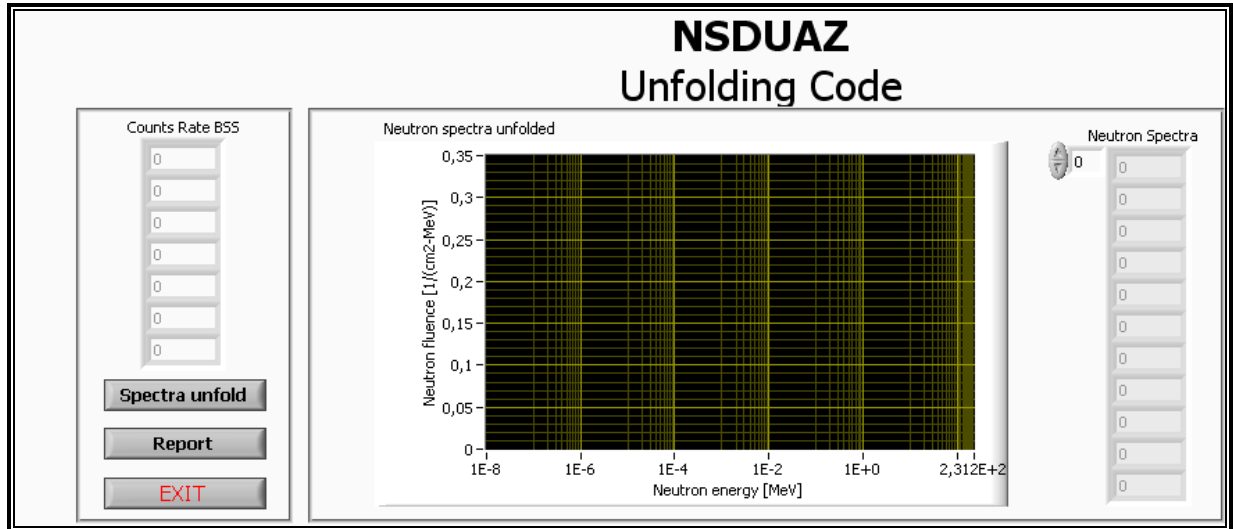


Figura 1. NSDUAZ-UC

En la figura 2 se aprecia el espectro reconstruido para una fuente de $^{241}\text{AmBe}$ a 50 cm, por medio de NSDUAZ. Luego de proporcionar las tasas de conteo leídas con el SEEB, se da clic en el botón “spectra unfold”, y en algunos segundos se obtiene el espectro reconstruido, quedando la selección del espectro inicial a cargo del programa y gracias al cual la reconstrucción se realiza rápidamente.

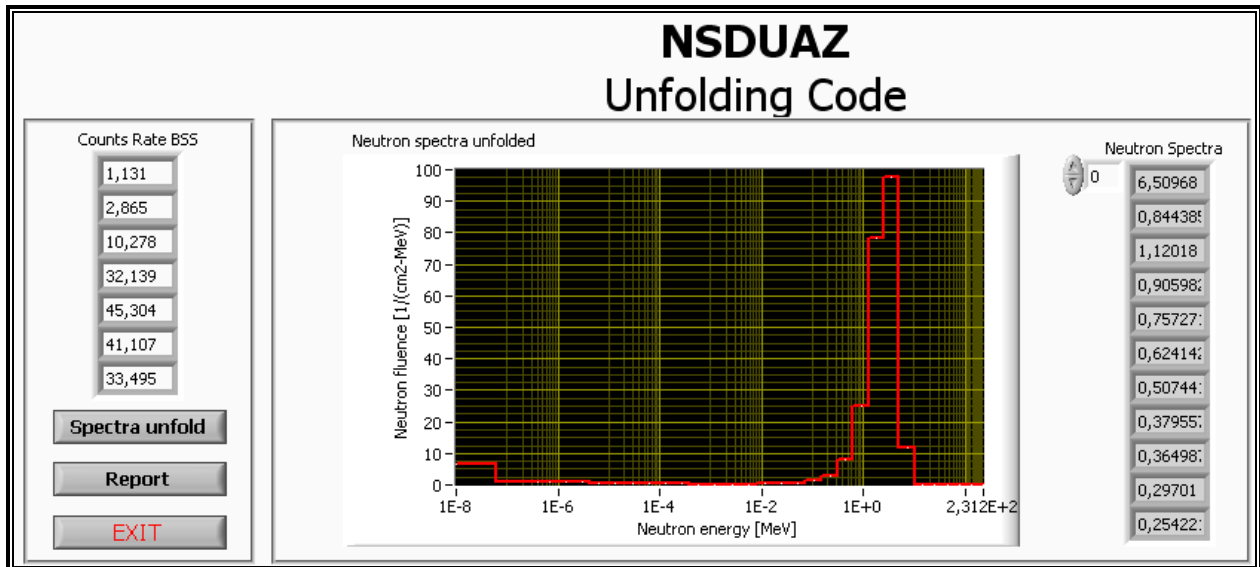


Figura 2. Espectro de una fuente de $^{241}\text{AmBe}$ reconstruido con NSDUAZ

En la figura 3 se muestra una comparación de las soluciones obtenidas con NSDUAZ, mostrada en color azul vs BUNKI, en color rojo. Para la comparación de los espectros obtenidos con ambas técnicas se utilizó la herramienta denominada NSDTB.

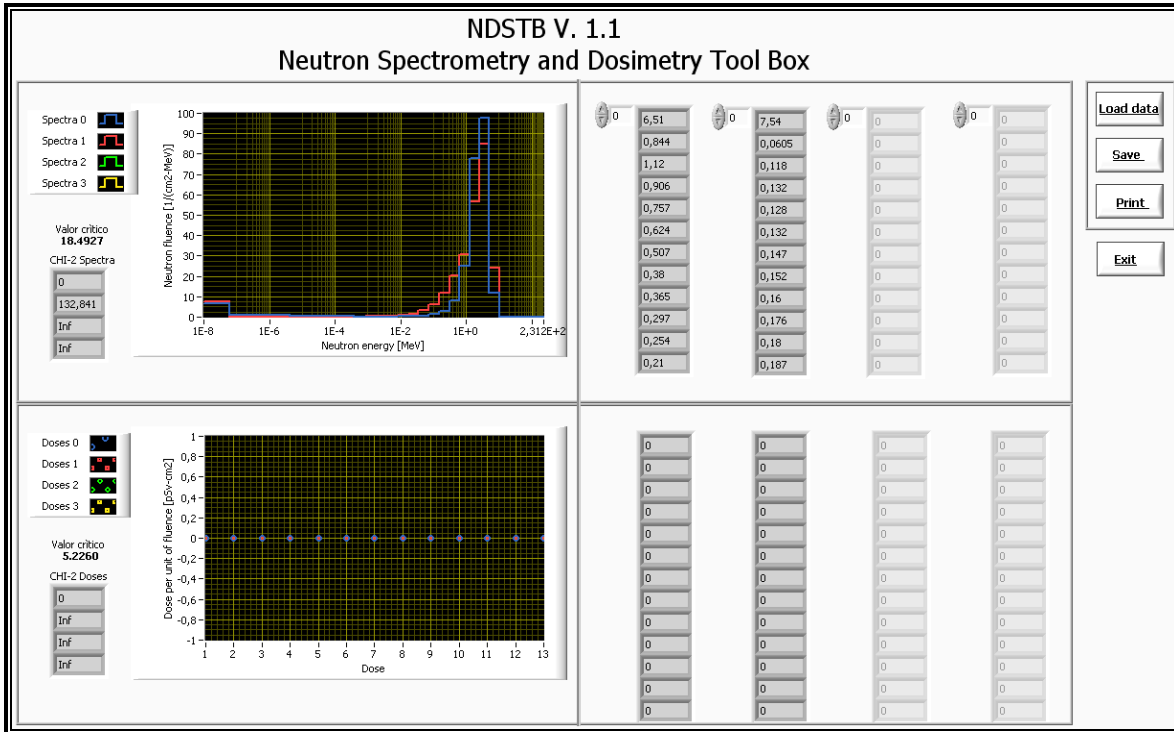


Figura 3. Comparación del espectro de una fuente de ²⁴¹AmBe reconstruido con NSDUAZ vs BUNKI

4. CONCLUSIONES

En base a la experiencia obtenida con un método de reconstrucción, ampliamente usado denominado BUNKI, se ha desarrollado una nueva herramienta de cómputo denominada NSDUAZ, la cual se presenta por primera vez, misma que opera por medio del algoritmo iterativo para la reconstrucción de espectros de neutrones denominado SPUNIT y la matriz de respuesta UTA4 para 31 grupos de energía. La característica principal de esta herramienta, radica en que a diferencia de los códigos iterativos existentes, la selección del espectro inicial la realiza el programa de forma automática, por medio de un catálogo de espectros de neutrones implementado dentro de la misma, de tal forma que esta herramienta no requiere de un usuario experto para la operación de la misma. El desarrollo de esta herramienta se realizó bajo en entorno grafico de LabVIEW®.

En este trabajo se presentan resultados preliminares, mostrando que esta aplicación, en esta etapa de desarrollo, es capaz de reconstruir espectros de neutrones, quedando pendiente para etapas posteriores la implementación de cálculos dosimétricos y criterios de convergencia para observar el error calculado de ajuste.

Al realizar comparaciones entre los espectros obtenidos con relación al código BUNKI se observa que existen diferencias en los espectros calculados. Se infiere que esto se debe en principal medida, al procedimiento de selección del espectro inicial. Se requiere realizar un mayor número de comparaciones para observar las diferencias y semejanzas e identificar las ventajas y desventajas de la propuesta realizada, así como pruebas estadísticas como χ^2 y R (correlación), entre otras, para determinar diferencias estadísticas, validando así la eficiencia de la herramienta diseñada.

Al utilizar NSDUAZ se ha observado que éste es sensible a las variaciones que puedan existir en los valores proporcionados de las tasas de conteo, ya que se ha observado que una variación ligera en los datos de las tasas de conteo, cambia la selección del espectro inicial propuesta por el programa, afectando en consecuencia la solución obtenida.

Agradecimientos

Este trabajo se realizó como parte del proyecto SYNAPSIS, parcialmente apoyado por el CONACyT bajo el contrato SEP 2004-C01-46893.

REFERENCIAS

1. Bramblett R.L., Ewing R.I. and Bonner T.W., *A new type of neutron spectrometer*. Nuclear Instruments and Methods, 1960. **9**: p. 1-12.
2. Alevra A.V., Cosack M., Hunt J.B., Thomas D.J. and Schraube H., *Experimental determination of the response of four Bonner sphere sets to monoenergetic neutrons (II)*. Radiation Protection Dosimetry, 1992. **40**(2): p. 91-102.
3. Goldhagen P., *Bonner-sphere neutron spectrometry*, in *Environmental Measurements Laboratory, U.S. Department of Energy*. 1997, http://www.eml.doe.gov/publications/procman/Sect3/3_6.pdf.
4. Vylet V., *Response matrix of an extended Bonner sphere system*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A, 2002. **479**: p. 26-30.
5. El Messaoudi M., Chouak A., Lferde M. and Cherkaoui R., *Performance of three different unfolding procedures connected to bonner sphere data* Radiation Protection Dosimetry 2004. **108**(3): p. 247-253.
6. Lacoste V., Gressier V., Pochat J.-L., Fernández F., Bakali M. and Bouassoule T. , *Characterization of Bonner sphere systems at monoenergetic and thermal neutron fields*. Radiation Protection Dosimetry, 2004. **110**(1-4): p. 529-532.
7. Vega Carrillo H.R., de la Torre M.P.I., *Catalogue to select the initial guess spectrum during unfolding*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A, 2002. **476**(1): p. 270-273.

8. Miller S.C., *AFITBUNKI: A Modified Iterative Code to Unfold Neutron Spectra from Bonner Sphere Detector Data*, in *Air force inst of tech wright-pattersonafb oh school of engineering* 1993. p. 118.
9. Sweezy J., Hertel N. and Veinot K., *BUMS--Bonner sphere Unfolding Made Simple: an HTML based multisphere neutron spectrometer unfolding package*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 2002. **476**(1-2): p. 263-269.