

GENERATION OF SYNTETHIC GAMMA SPECTRA WITH MATLAB

Palmerio J.J. Coppo A.D.
CNEA, Programa Nacional de Gestión de Residuos Radiactivos
jpalmerio@cae.cnea.gov.ar

Objectives:

The aim of this work is the simulation of gamma spectra using the MATLAB program to generate the calibration curves in efficiency, which will be used to measure radioactive waste in drums. They are necessary for the proper characterization of these drums.

A Monte Carlo simulation was basically developed with the random number generator Mersenne Twister and nuclear data obtained from NIST. This paper shows the results obtained and difficulties encountered until today.

The physical correction of the simulated spectra has been the only aspect we have been working, up to this moment.

Procedures:

A simplified representation of the “Laboratorio de Verificación y Control de la Calidad” was chosen. Drums with cemented liquid waste are routinely measured in this laboratory.

The commercial program MCNP was also used to get a valid reference in the field of simulation of spectra. We analyzed the spectra obtained by MATLAB in the light of classical literature photon detection and the spectrum obtained by MCNP.

Conclusions:

Currently the program developed seems adequate to simulate a measurement in the “Laboratorio de Verificación y Control de la Calidad”. The spectra obtained by MATLAB seem to physically represent what is observed in real spectra. However, it is a slow program. The current development efforts are directed to improve the speed of simulation. An alternative is to use the CUDA language for NVIDIA video cards to parallelize the simulation.

An adequate simulation of the electronic measuring chain is also needed to obtain better representations of the shapes of the peaks.

GENERACIÓN DE ESPECTROS SINTÉTICOS GAMMA POR MATLAB

Palmerio J.J. Coppo A.D.

CNEA, Programa Nacional de Gestión de Residuos Radiactivos

jpalmerio@cae.cnea.gov.ar

Resumen: Este trabajo trata sobre la simulación de espectros gamma por un método de Monte Carlo utilizando un desarrollo propio sobre MATLAB. Este desarrollo se aborda partiendo de la necesidad de realizar calibraciones sintéticas para la medición de residuos radiactivos contenidos en tambores, de los cuales no se dispone de patrones adecuados.

Introducción:

El “Laboratorio de Verificación y Control de la Calidad” mediante un equipo Gamma Scanner verifica los datos enviados por el generador de residuos acondicionados en tambores de 200 litros. Considerando las formas de tratamiento de los residuos radiactivos, surgen dos grupos definidos: los tambores homogéneos y los inhomogéneos. El Laboratorio cuenta con una calibración para el primer grupo de tipo experimental. El segundo grupo, se encuentra con la dificultad de definir un único patrón representativo que pueda utilizarse en todos los casos para caracterizar cada distribución geométrica de la actividad de cada radionucleido en cada tambor inhomogéneo (sólidos compactados).

Como solución a este problema se planteó la construcción de un modelo del “Laboratorio de Verificación y Control de la Calidad” que permita obtener espectros sintéticos lo más similares posibles a los obtenidos realmente por el Gamma Scanner en ese mismo laboratorio. La finalidad que se busca es poder obtener curvas de calibración sintéticas que permitan medir geometrías de las que no se disponga un patrón.

Para este fin se trabajó en un modelo sencillo de simulación por Monte Carlo sobre MATLAB. También se realizó una simulación análoga sobre MCNP para tener una referencia en el ámbito del transporte por Monte Carlo.

El programa desarrollado resuelve el transporte de fotones para varias fuentes y varios detectores, teniendo en cuenta las interacciones con los materiales que hay en el recinto simulado. Es una simulación en la que se analizan todas las trayectorias de todos los fotones emitidos por la fuente durante un cierto tiempo.

La decisión de modelar mediante el uso de MATLAB se vio fundamentada principalmente en la flexibilidad y transparencia que se obtienen al programar los diversos aspectos de la interacción de fotones gamma con la materia. El generador de números aleatorios es una parte fundamental en la aplicación de los métodos de Monte Carlo. Estos métodos usan una enorme cantidad de sorteos en su ejecución, por lo que es necesario que el generador de números aleatorios tenga asegurada una longitud de período lo más larga posible.

El generador elegido para las simulaciones con MATLAB es “Mersenne Twister” de Makoto Matsumoto y Takuji Nishimura el cual posee una longitud de período de $2^{19937}-1$ (MCNP opera con un generador congruencial multiplicativo, de longitud de período de $2^{31}-2$), además es muy rápido ya que solo usa sumas y restas. Todavía no se dispone de una batería de pruebas totalmente conclusivas y globalmente aceptadas sobre la calidad de un generador, pero sí se puede decir que el generador elegido para llevar a cabo las simulaciones realizadas mediante MATLAB pasó todas las pruebas que existen al respecto hasta ahora.

El otro apartado fundamental para una simulación de este tipo es el uso de secciones eficaces macroscópicas para definir la forma de interacción de los fotones con la materia. Estos datos se obtuvieron con el programa XCOM del NIST.

El programa desarrollado analiza la trayectoria de cada fotón en forma discreta. Se evalúa la ocurrencia de una interacción con la materia cada un *camino libre medio* (se supone un solo efecto por interacción). Las interacciones evaluadas son *efecto fotoeléctrico*, *dispersión Compton* y *producción de pares*. Además de las interacciones anteriores se considera la posibilidad de no interacción del fotón con la materia, esta se calcula a partir de la atenuación de un haz de fotones gamma que atraviesan un espesor equivalente a un *camino libre medio*. La ecuación 1 representa la atenuación que sufre un haz de fotones al atravesar un espesor x en un material de coeficiente de absorción u . La ecuación 2 se deduce de la ecuación 1 para la situación en la que un haz de fotones atraviesa un espesor de material $1/u$. El valor $1/u$ es el *camino libre medio*, o sea es la distancia media que recorre un fotón entre interacciones.

$$I = I_0 \cdot e^{-u \cdot x}$$

Ec 1. Ley de atenuación de un haz de fotones. Donde u es el coeficiente de absorción y x es el espesor que el haz atraviesa.

$$P_{ni} = \frac{I}{I_0} = e^{-u \cdot \frac{1}{u}} = e^{-1}$$

Ec 2. Probabilidad de no interacción con la materia al atravesar un espesor de $1/u$.

Ahora que la probabilidad de no interacción es conocida y además está normalizada, es posible describir la probabilidad de interacción para cada uno de los posibles efectos.

$$P_i = 1 - P_{ni} = 1 - e^{-1}$$

Ec 3. Probabilidad de interacción del fotón con la materia por algún efecto.

$$P_{fe} = \frac{\Sigma_{fe}}{u} \cdot P_i; P_{dC} = \frac{\Sigma_{dC}}{u} \cdot P_i;$$

$$P_{pp} = \frac{\Sigma_{pp}}{u} \cdot P_i$$

Ec 4. Probabilidades para cada tipo de efecto. P_{fe} es la probabilidad de interacción fotoeléctrica, P_{dC} es la probabilidad de interacción por Compton y P_{pp} es la interacción por producción de pares. Σ son las secciones eficaces macroscópicas para cada efecto.

En base a las probabilidades que se definen en las ecuaciones 1 y 4 es que se evalúa la ocurrencia de alguna interacción. En el caso que un fotón salga del universo simulado o de una absorción fotoeléctrica se finaliza el análisis de esa trayectoria. Si ocurre una dispersión Compton, se calcula la distribución de Klein-Nishina para estimar la probabilidad de los diferentes ángulos de dispersión posibles. Para el caso en que ocurra una producción de pares, se calculan la aniquilación del positrón y las trayectorias de los dos fotones creados. Finalmente, si no ocurre ninguna interacción, el fotón se desplaza un camino libre medio en la dirección que llevaba. La figura 5 muestra un diagrama del funcionamiento lógico del programa.

Junto con el análisis por secciones eficaces es necesario hacer un análisis de la posición que el fotón ocupa. Este análisis permite cargar los datos de secciones eficaces correspondientes al material en que se encuentra el fotón. También así se puede determinar si el fotón ha llegado a un detector. Además permite saber si un fotón ha

salido del recinto simulado, evitando el cálculo asociado a un fotón que nunca llegará al detector.

Actualmente, el programa permite el diseño del recinto a simular a partir de algunas figuras geométricas sencillas como cilindros o prismas rectangulares. Es necesario además suministrar los datos de las fuentes (que objetos son fuentes), los detectores (que objetos son detectores) y los materiales (de todos los objetos). Con estos datos el programa genera una serie de archivos que contienen la información geométrica, de secciones eficaces, de fuentes y de detectores. En una etapa posterior se realiza la simulación a partir de esta información. En esa etapa debe suministrarse además el tiempo de duración del experimento en el recinto simulado.

Finalmente, el programa desarrollado incluye dos opciones de detectores, el detector *ideal* y el *pseudoreal*. El primero es un detector “absorbente”; o sea, se comporta como si fuera infinitamente grande, cada fotón que en él ingresa deposita toda su energía. El segundo detector considera la energía depositada en el mismo a partir de las interacciones dentro de él.

Desarrollo:

Como ya se mencionó, para realizar las simulaciones se utilizó una representación simplificada del “Laboratorio de Verificación y Control de la Calidad”. Como fuente se eligió utilizar un tambor de residuos líquidos cementados con 2mCi de ^{137}Cs y ^{60}Co (esta actividad es para cada radionucleido). En las Figuras 1 y 2 se puede observar la geometría en la que se realizaron las simulaciones. El tambor se consideró compuesto de cemento y con una distribución isotrópica de la actividad de ^{137}Cs y ^{60}Co .

En cuanto al detector, se lo consideró como un cilindro de Germanio híper puro, cubierto por un blindaje cilíndrico de Plomo. Se colocó, también un colimador de Plomo al frente del detector. En las Figuras 3 y 4 pueden observarse las dimensiones de todos los objetos del recinto.

Los espectros con MATLAB se obtuvieron en una computadora con un procesador C2D 6320 y 2GB de memoria RAM. El código del programa se escribió de manera que se analicen varias trayectorias de fotones al mismo tiempo. Cada núcleo del procesador realizó los cálculos de una trayectoria de forma que al finalizar una se inicia otra, así los núcleos se mantienen siempre ocupados. El tiempo en el recinto simulado para las simulaciones con MATLAB fue de 60 s.

Se incluye además una geometría adicional un poco más simple en cuanto a la fuente y el colimador. Debido a la fuerte atenuación que la matriz de cemento impone y al escaso conteo obtenido en el estado actual del programa, no es posible observar con claridad ningún efecto como *retrodispersión*, *bordes Compton* o *escapes simples y dobles*. Por esta razón, se diseñó el recinto que muestran las figuras 12 y 13, en donde la actividad y la composición de la fuente es la misma que la utilizada en la simulación con la geometría mostrada en las figuras 1, 2, 3 y 4, pero con un tamaño de fuente mucho menor. Además se quitó el colimador de Plomo.

Los espectros obtenidos por MATLAB son cuatro:

- Modelo del “Laboratorio de Verificación y Control de la Calidad” con detector pseudoreal (figura 6)
- Modelo del “Laboratorio de Verificación y Control de la Calidad” con detector ideal (figura 7).
- Geometría adicional con detector pseudoreal (figura 8).
- Geometría adicional con detector ideal (figura 9).

En cuanto a la simulación sobre MCNP, se realizó sobre la misma geometría. Los resultados obtenidos pueden observarse en la figura 10.

Para interpretar los espectros se calcularon las energías de: *Retrodispersión*, *borde Compton*, *escape simple* y *escape doble*. La energía de *retrodispersión* se calculó como la energía de dispersión Compton con un ángulo de 180° (ecuación 6).

$$E_R = \frac{E_F}{1 + \frac{(1 - \cos \theta)E_F}{m_0 c^2}}$$

Ec 6. E_R es la energía de retrodispersión. E_F es la energía del fotopico. θ es el ángulo de dispersión. $m_0 c^2$ es la energía de la masa en reposo del electrón.

$$E_B = E_F - E_R$$

Ec 7. E_B es la energía de borde Compton. E_R es la energía de retrodispersión. E_F es la energía del fotopico.

$$E_S = E_F - 511 \text{KeV}$$

$$E_D = E_F - 1022 \text{KeV}$$

Ec 8. E_S es la energía de escape simple. E_D es la energía de escape doble. E_F es la energía del fotopico.

La energía de *borde Compton* se calculó como la energía del *pico pleno* menos la energía de *retrodispersión*. Finalmente las energías de los *escapes simples* y *dobles* se calcularon con las ecuaciones 8. Los resultados obtenidos se encuentran en la tabla 1.

Conclusiones:

La opción de simular espectros gamma con un desarrollo propio en MATLAB parece ser buena. Los espectros obtenidos de esta manera exhiben los fenómenos que la bibliografía clásica predice, como ser los picos de aniquilación, de escapes simples o dobles, etc. En la figura 11 puede observarse un espectro de un tambor real que se obtuvo con el Gamma Scanner en el “Laboratorio de Verificación y Control de la Calidad”. Puede observarse que ese espectro no tiene picos de escapes simples o dobles, es posible que el detector sea muy eficiente para el rango de energías en el que se trabajó. Puede observarse también que las simulaciones realizadas con el detector ideal en MATLAB guardan más similitudes con el espectro real. Esta idea apoya el hecho de suponer al detector real como muy eficiente.

En cuanto a la simulación realizada sobre MCNP, se puede decir que fue la más rápida. Es decir, MCNP es un programa muy eficiente y capaz (además ha sido validado), aunque el espectro obtenido con el no haya sido tan parecido al que se obtuvo en una medición real.

Finalmente se puede decir que la simulación desarrollada en MATLAB es una posibilidad que aun necesita maduración. La mayor dificultad radica en la velocidad, el programa desarrollado es lento. Este hecho imposibilita simular tiempos de medición más largos para juzgar mejor la similitud entre los espectros simulados y los reales. Para resolver esto actualmente se está trabajando en la reescritura del código para aprovechar las posibilidades de la paralelización masiva de cálculo sobre una placa de video (a través de CUDA). Otra cosa que aún no se ha modelado es la cadena electrónica asociada a la detección.

Referencias:

- [1] Knoll, G. F. "Radiation Detection and Measurement". *John Wiley & Sons*, 1978.
- [2] Gilmore, G. and Hemingway, J. D. "Practical Gamma Ray Spectrometry". *John Wiley & Sons*, 1995.
- [3] Fishman, G. S. "Monte Carlo: Concepts, Algorithms and Applications". *Springer*, 1996.
- [4] Matsumoto, M. and Nishimura, T. "Mersenne Twister: A 623-dimensionally equidistributed uniform pseudorandom number generator". *Keio University/Max-Planck-Institut für Mathematik*, 1998.

Anexo: Figuras, gráficos y tablas.

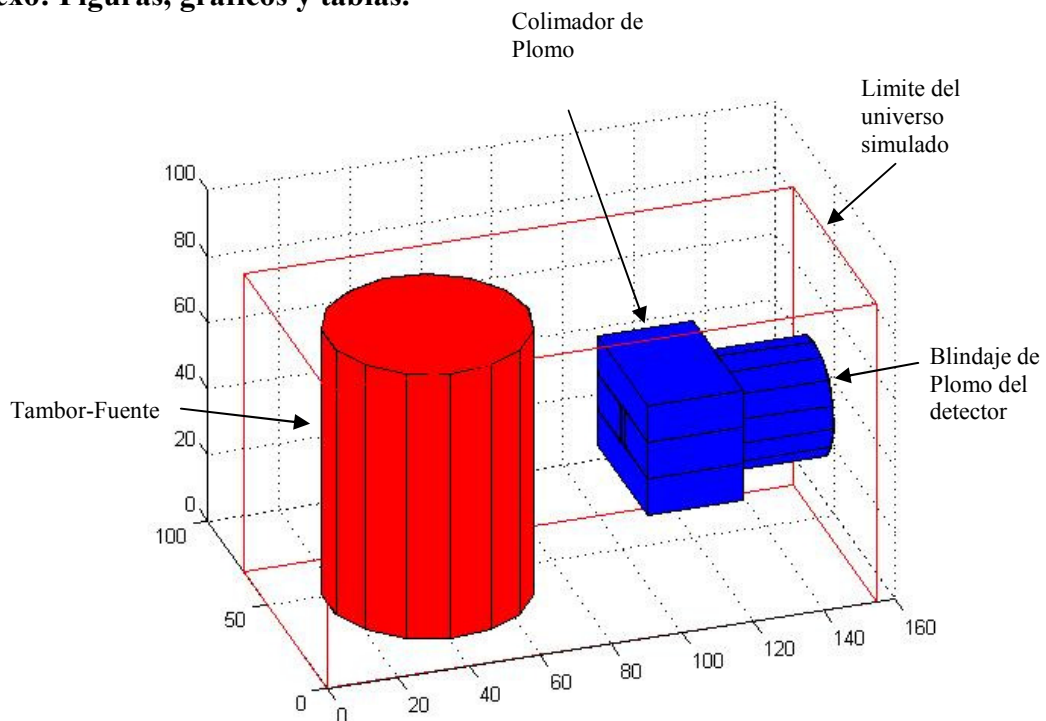


Fig 1. Lateral en perspectiva del recinto simulado.

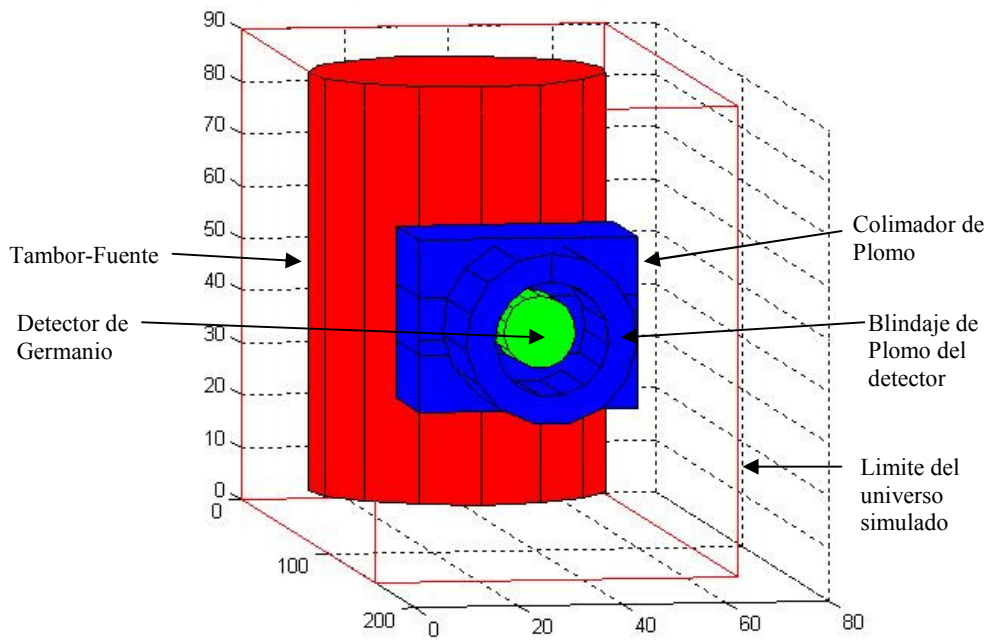


Fig 2. Parte trasera en perspectiva del recinto simulado.

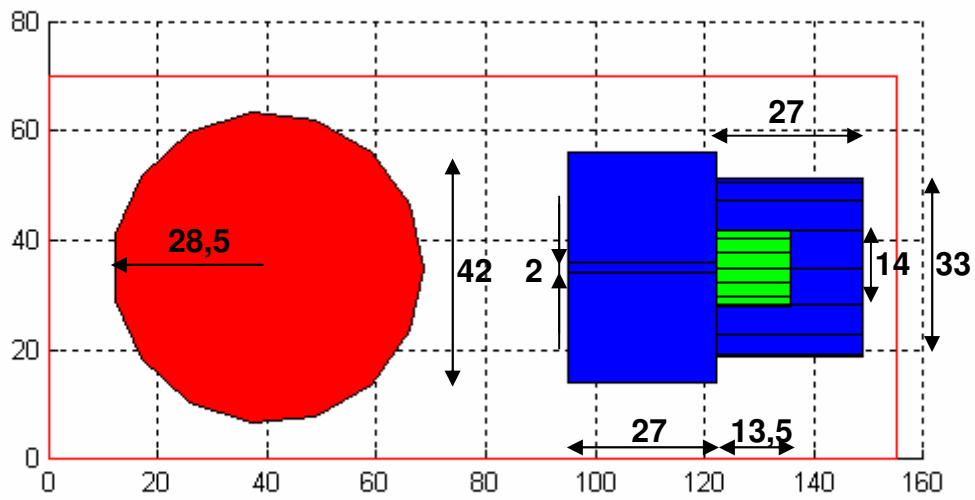


Fig 3. Vista superior del recinto simulado (todas las medidas están en cm).

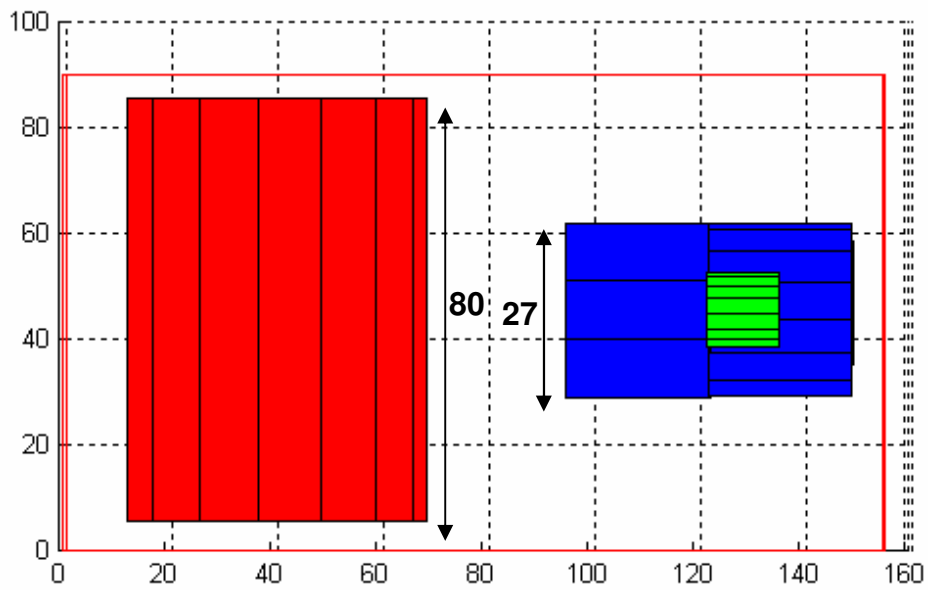


Fig 4. Vista lateral del recinto simulado (todas las medidas están en cm).

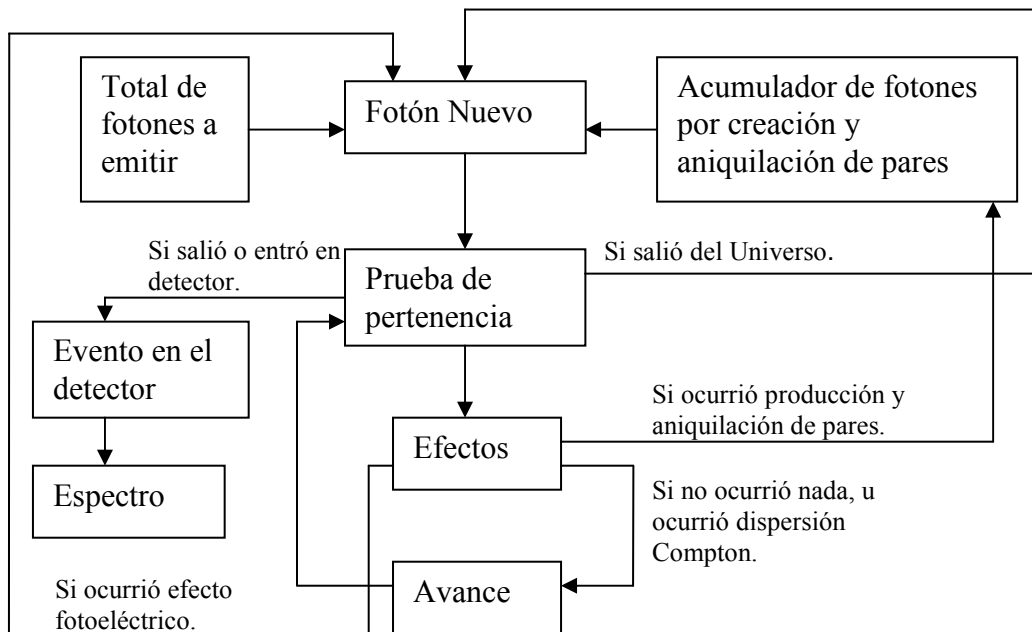


Fig 5. Diagrama de flujo de la simulación.

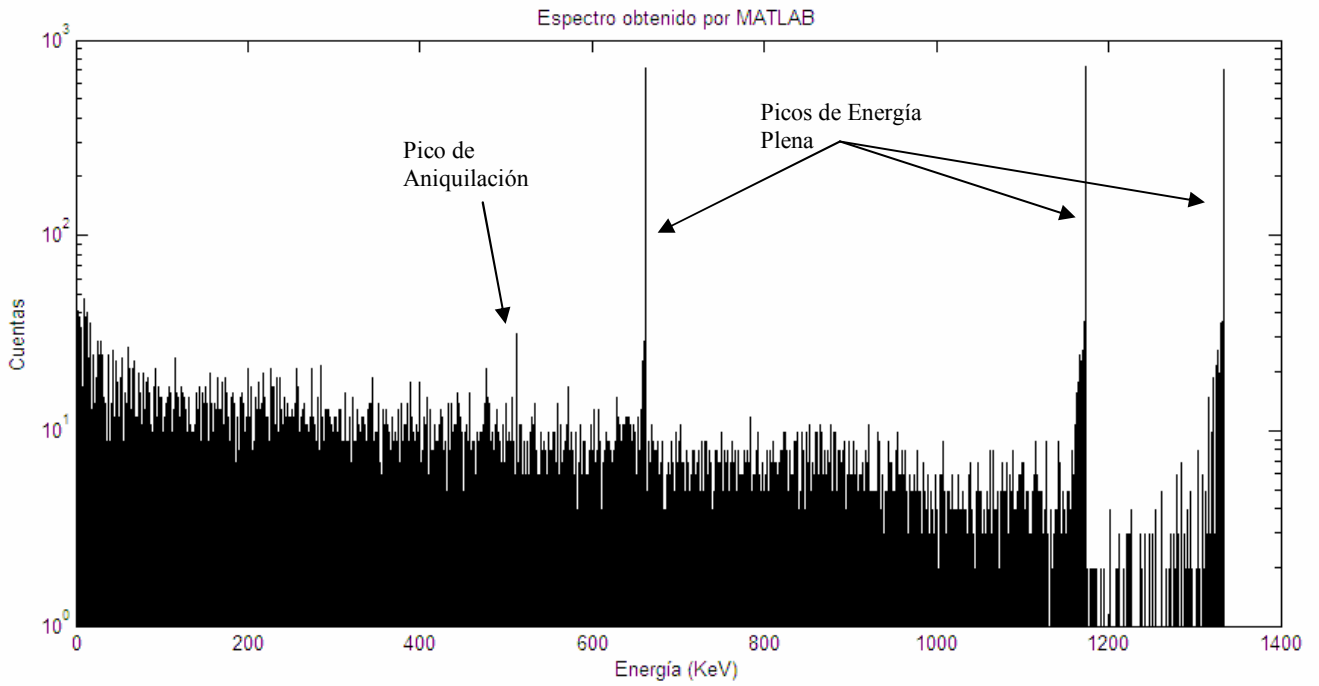


Fig 6. Espectro obtenido por MATLAB (detector pseudoreal).

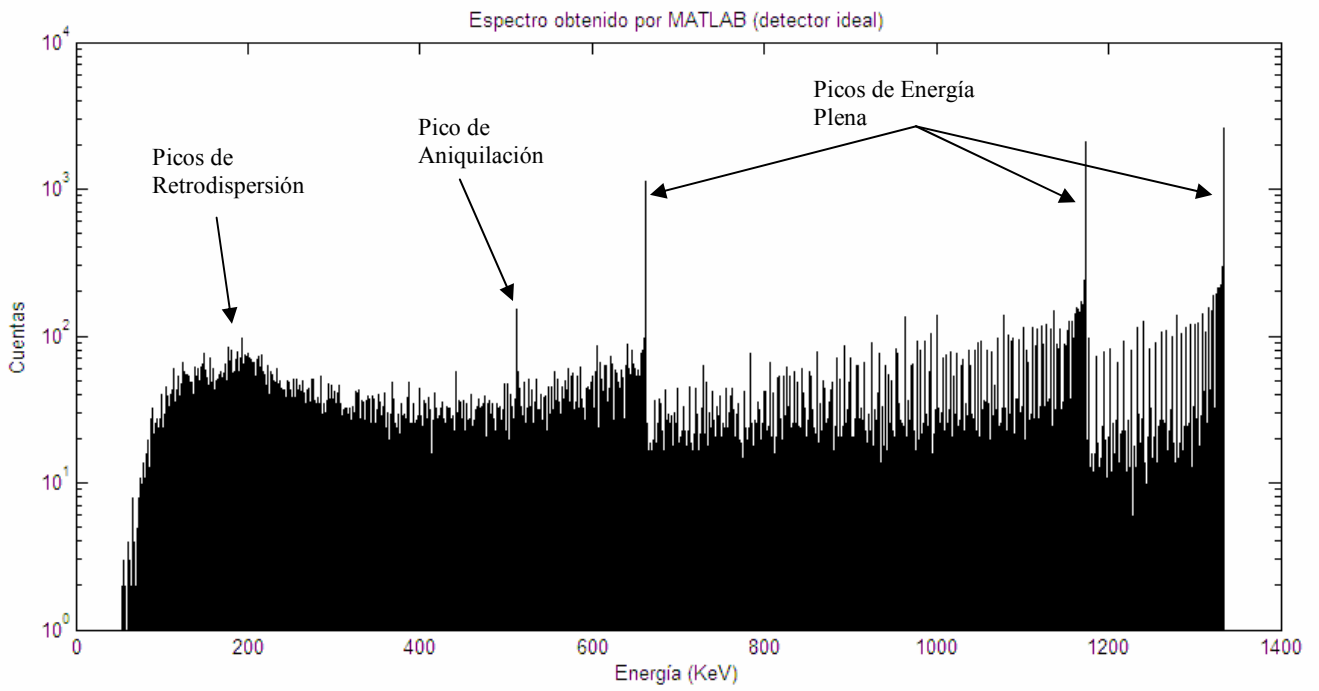


Fig 7. Espectro obtenido por MATLAB (detector ideal).

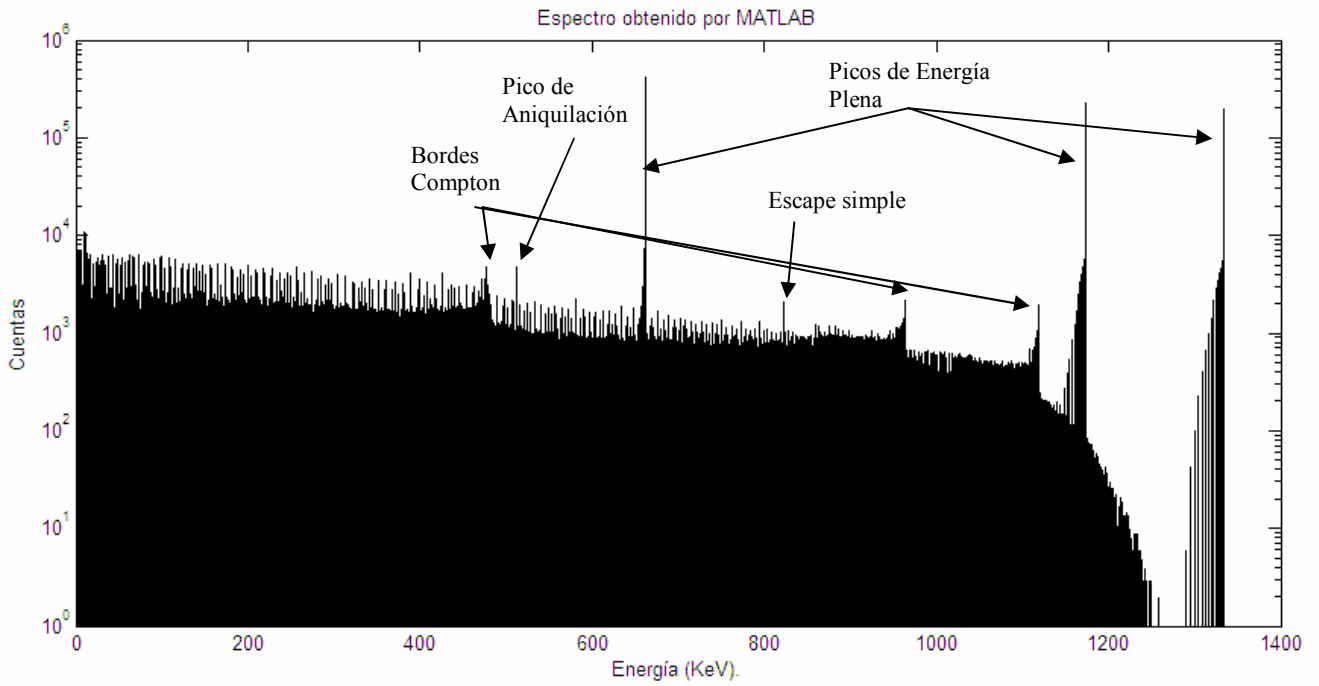


Fig 8. Espectro obtenido por MATLAB (detector pseudoreal).

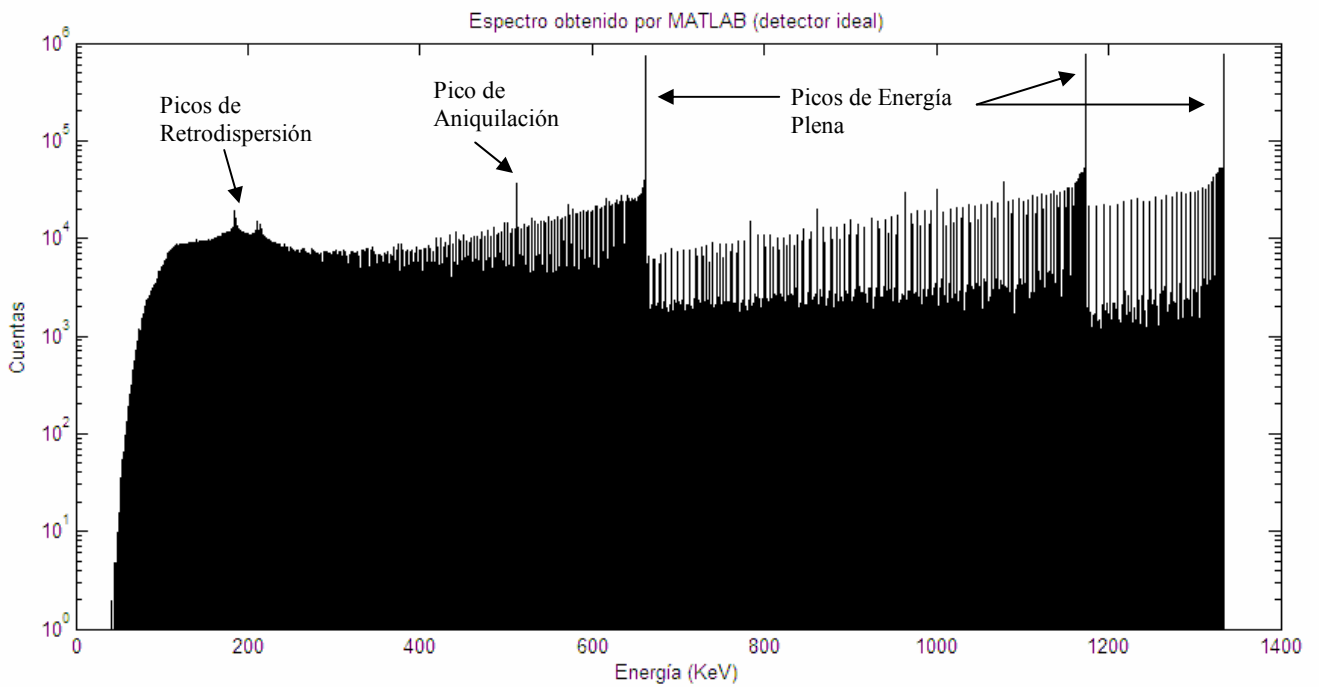


Fig 9. Espectro obtenido por MATLAB (detector ideal).

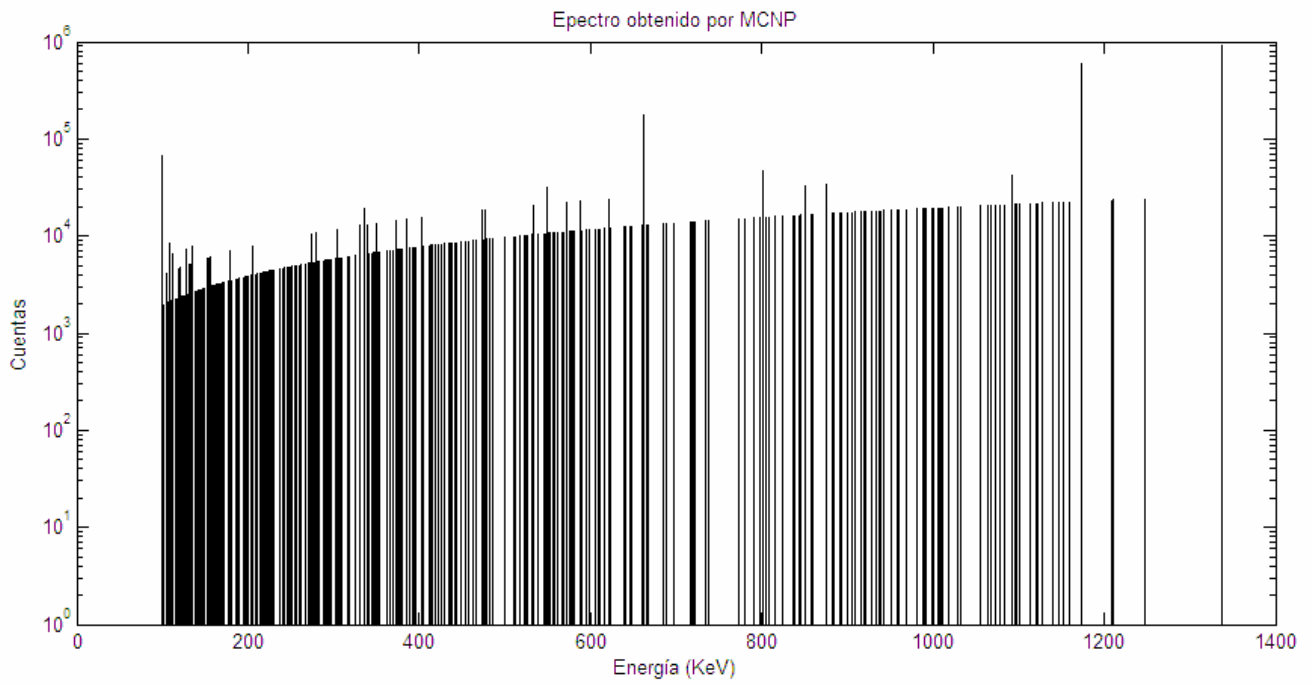


Fig 10. Espectro obtenido por MCNP.

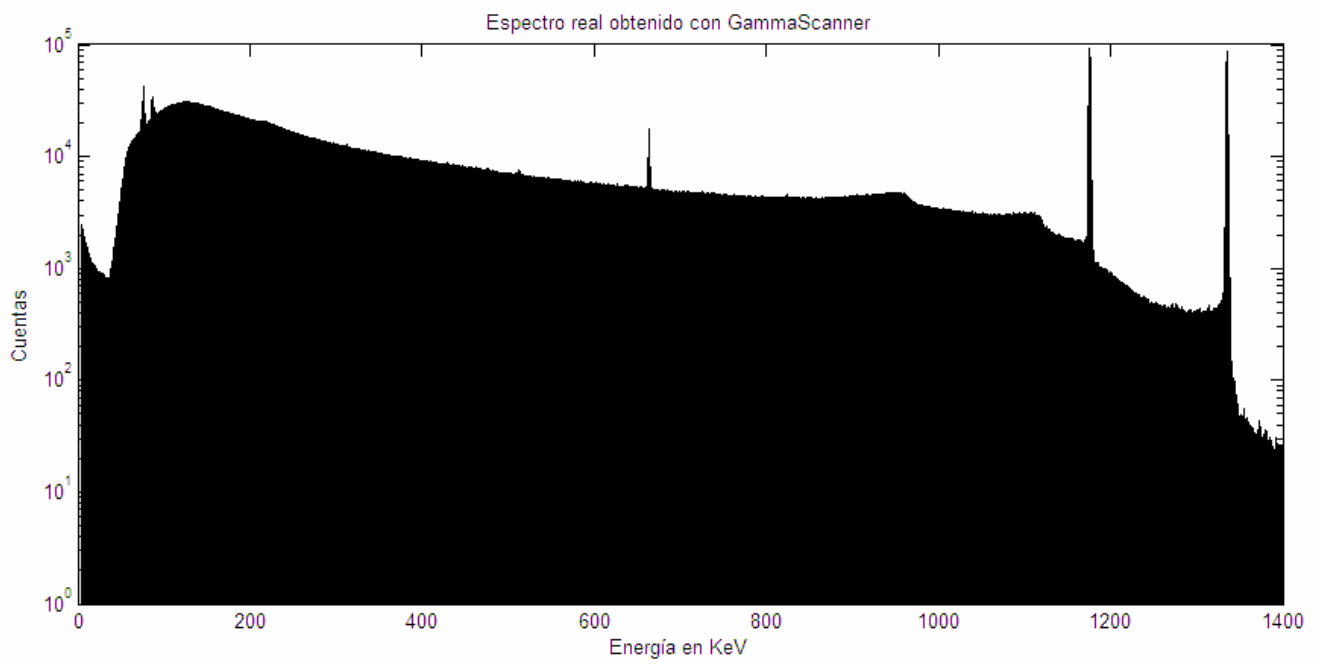


Fig 11. Espectro obtenido por Gamma Scanner.

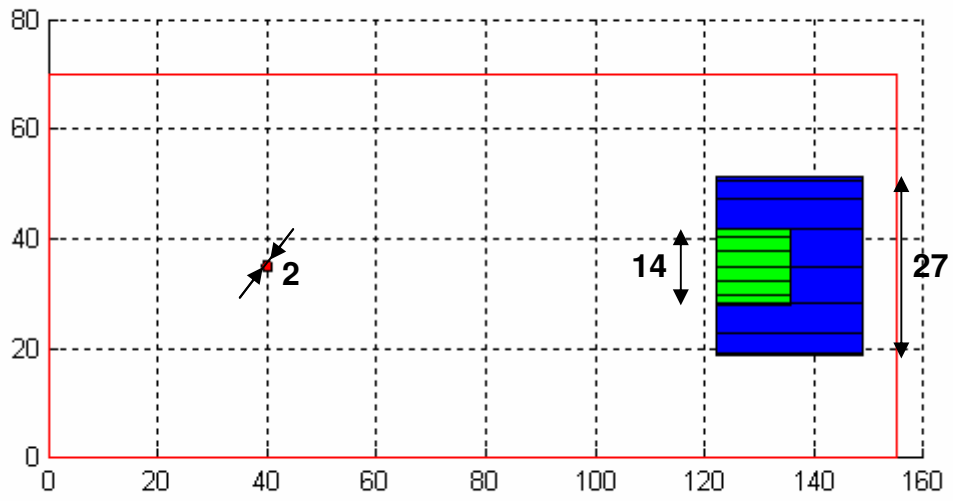


Fig 12. Vista superior del recinto adicional simulado (todas las medidas están en cm).

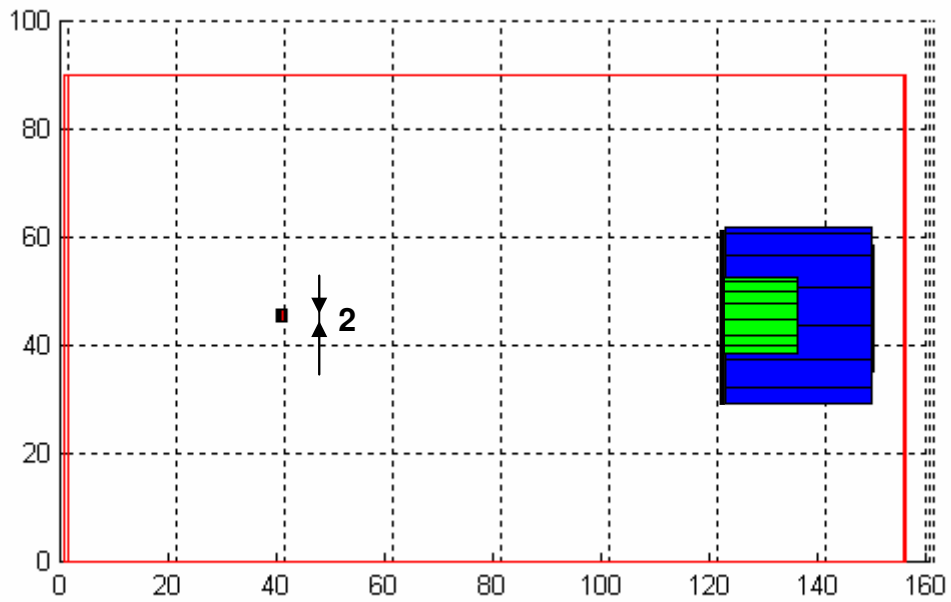


Fig 13. Vista lateral del recinto adicional simulado (todas las medidas están en cm).

E_F	661,657 KeV	1173,237 KeV	1332,501 KeV
E_R	184,320 KeV	209,812 KeV	214,390 KeV
E_B	477,340 KeV	963,430 KeV	1118,110 KeV
E_S	-	662,237 KeV	821,201 KeV
E_D	-	151,237 KeV	310,501 KeV

Tabla 1. Energías de borde Compton, retrodispersión y escapes simples y dobles para los picos de energía plena mayoritarios para ^{137}Cs y ^{60}Co .