

NGHIÊN CỨU TỐI ƯU KÍCH THƯỚC HỘP CHỨA MẪU MARINELLI BẰNG THUẬT TOÁN TIẾN HOÁ VI PHÂN KẾT HỢP VỚI MCNP4C2

VÕ XUÂN AN

Khoa Công nghệ Điện tử, Trường Đại học Công nghiệp Thành phố Hồ Chí Minh

voxuanan@iuh.edu.vn

DOIs: <https://doi.org/10.46242/jstiuh.v57i03.4394>

Tóm tắt. Hộp chứa mẫu Marinelli với thể tích lớn được sử dụng phổ biến để chứa mẫu trong các phép đo mẫu môi trường có hoạt độ phóng xạ thấp trên hệ phổ kế gamma dùng đầu dò germanium siêu tinh khiết (High Purity Germanium - HPGe) do góc khối phát bức xạ gamma từ hộp chứa mẫu hay nguồn phóng xạ đến đầu dò lớn. Trong công trình này, chúng tôi phát triển phương pháp tối ưu hoá kích thước hình học hộp chứa mẫu Marinelli dựa vào thuật toán tiến hoá vi phân (Differential Evolution) kết hợp với chương trình MCNP4C2 (Monte Carlo N-Particle code, Version 4C2). Mẫu đo là dung dịch NaI với các nhân phóng xạ ^{131}I phát tia gamma với năng lượng 0,364MeV, thành phần chủ yếu là nước với thể tích 450cm³, mật độ 1g/cm³. Thuật toán tiến hoá vi phân được sử dụng để tối ưu kích thước hình học gồm bán kính phần trên r_1 và chiều cao phần dưới h_2 của hộp chứa mẫu Marinelli thông qua tiến trình xác định hiệu suất ghi lớn nhất của đầu dò được tính toán bằng chương trình MCNP4C2. Sau hơn 100 thế hệ, thuật toán tìm kiếm đã hội tụ với hiệu suất ghi lớn nhất của đầu dò là 0,041185 đối với cấu trúc kích thước hình học hộp chứa mẫu Marinelli có bán kính phần trên r_1 bằng 5,4941cm và chiều cao phần dưới h_2 bằng 6,1042cm. So sánh với thuật toán di truyền, thuật toán tiến hoá vi phân đã thể hiện ưu điểm vượt trội trong tìm kiếm tối ưu. Trong phạm vi sai số của thước đo, kích thước hình học tối ưu của hộp chứa mẫu Marinelli nhận được từ nghiên cứu này phù hợp với kết quả nghiên cứu trước đây của chúng tôi.

Từ khoá. hộp chứa mẫu Marinelli, đầu dò HPGe, thuật toán tiến hoá vi phân, MCNP4C2.

1. MỞ ĐẦU

Trong kỹ thuật đo các mẫu môi trường có hoạt độ phóng xạ thấp, mẫu đo thường được chuẩn bị với khối lượng lớn nhằm tăng số lượng tia gamma đi vào đầu dò, giảm thời gian đo và đồng thời giảm ảnh hưởng nhiễu môi trường lên kết quả đo. Tùy thuộc khối lượng mẫu đo hoặc dựa vào các đặc điểm cụ thể của phép đo, người ta có thể lựa chọn hộp chứa mẫu có thể là dạng trụ, dạng côn hoặc dạng Marinelli [1]. Trong nhiều năm qua, hộp chứa mẫu Marinelli được sử dụng phổ biến vì có thể tích lớn (do đó, chứa khối lượng lớn) và cấu trúc hình học bao bọc gần như toàn bộ đầu dò nên hiệu suất ghi của đầu dò cao. Cơ sở khoa học về việc sử dụng hộp chứa mẫu Marinelli đã được nghiên cứu chi tiết [2, 3]. Tuy nhiên do thể tích mẫu đo lớn nên ảnh hưởng của hiệu ứng mật độ, hiệu ứng thành phần hoá học, hiệu ứng trùng phùng lên hiệu suất ghi của đầu dò trở nên đáng kể [4, 5, 6]. Trong những năm gần đây, đã có một số công trình nghiên cứu sử dụng các thuật toán di truyền (GA - Genetic Algorithm), thuật toán tiến hoá vi phân (DE - Differential Evolution) để xác định các thông số kích thước hình học của đầu dò dựa vào mục tiêu xác định độ lệch nhỏ nhất của hiệu suất ghi của đầu dò giữa kết quả tính toán mô phỏng và thực nghiệm [7, 8, 9], nghiên cứu sử dụng thuật toán GA xác định kích thước hình học tối ưu của hộp chứa mẫu đối với thể tích mẫu đo cho trước dựa vào mục tiêu xác định hiệu suất ghi lớn nhất của đầu dò [10, 11]. Trong công trình [11], chúng tôi đã nghiên cứu tối ưu kích thước hình học của hộp chứa mẫu Marinelli bằng thuật toán GA kết hợp với chương trình MCNP4C2. Trong nghiên cứu này, nhằm mục tiêu đa dạng hoá công cụ toán học trong việc giải quyết bài toán tối ưu, so sánh hiệu lực tìm kiếm giữa các thuật toán tiến hoá và kiểm chứng lẫn nhau kết quả tính toán tối ưu, chúng tôi ứng dụng thuật toán DE kết hợp với chương trình MCNP4C2 để tối ưu kích thước hình học của hộp chứa mẫu Marinelli.

2. PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

2.1. Thiết bị thực nghiệm

Trong nghiên cứu này, hệ phổ kế gamma dùng đầu dò germanium siêu tinh khiết (HPGe) GC1518 kiểu p được sử dụng, đặt tại Trung tâm Hạt nhân Tp. Hồ Chí Minh. Đầu dò có hiệu suất tương đối so với đầu dò

nhấp nháy NaI(Tl) $3'' \times 3''$ là 15%, độ rộng đỉnh năng lượng toàn phần danh định là 0,825keV tại 122keV và 1,8keV tại 1,33MeV. Phần mềm phân tích phổ là Canberra Genie 2000 [12] được nhà sản xuất Canberra Industries Inc. cung cấp cùng với thiết bị.

Để giảm phong phóng xạ từ môi trường, đầu dò và mẫu đo được đặt trong buồng chì gồm lớp chì dày 10cm, lớp thiếc dày 0,3cm, lớp paraffin dày 5,5cm và lớp đồng dày 0,1cm theo thứ tự từ ngoài vào trong. Mặc khác, để giảm nhiễu tín hiệu điện tử, đầu dò và khối tiền khuếch đại được đặt trong bình nitrogen (N_2) lỏng và được làm lạnh đến nhiệt độ 77K (-196°C).

Kết quả nghiên cứu từ công trình [11] cho thấy rằng ảnh hưởng của hiệu ứng năng lượng tia gamma, hiệu ứng mật độ, hiệu ứng thành phần hoá học của mẫu đo lên kích thước tối ưu của hộp chứa mẫu Marinelli là không đáng kể nên dung dịch NaI với mật độ 1g/cm^3 chứa các nhân phóng xạ ^{131}I được lựa chọn sử dụng. Đồng vị phóng xạ ^{131}I phát tia gamma có năng lượng $E_\gamma = 0,364\text{ MeV}$, suất phát $Y = 82\%$, thời gian bán rã $T_{1/2} = 8,02$ ngày. Dung dịch phóng xạ ^{131}I được chuẩn bị với thể tích 450 cm^3 đựng trong hộp chứa mẫu Marinelli có đáy và mặt bên áp sát đầu dò.

2.2. Xây dựng mô hình hệ phổ kế gamma

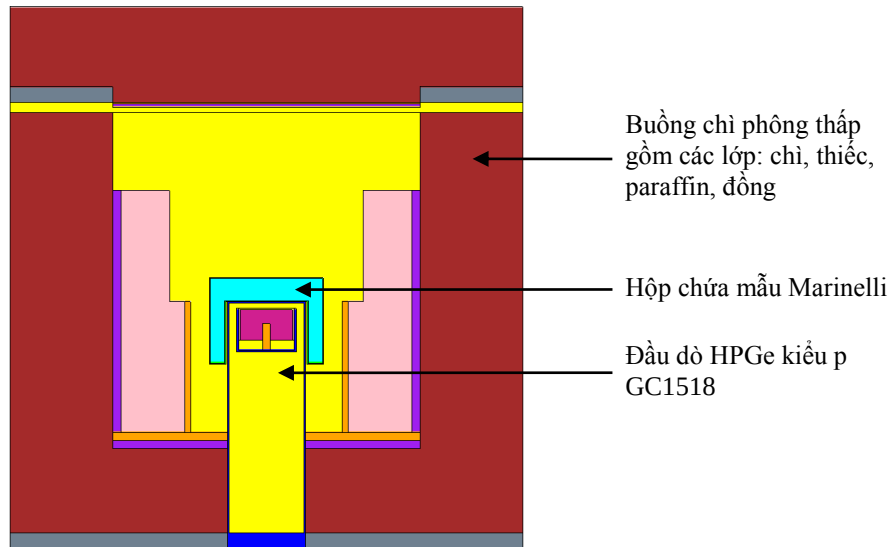
Chương trình mô phỏng Monte Carlo MCNP4C2 [13] được sử dụng để xây dựng mô hình hệ đo gồm nguồn phóng xạ ^{131}I đựng trong hộp chứa mẫu Marinelli, đầu dò germanium siêu tinh khiết và buồng chì phòng thấp như Hình 1. Còn những phần thiết bị khác của hệ đo gồm bộ tiền khuếch đại nhạy điện tích, khuếch đại, khối phân tích đa kênh và hệ máy tính lưu trữ và xử lý số liệu đóng góp không đáng kể vào phổ gamma mô phỏng được bỏ qua [14]. Thông tin về cấu trúc hình học và thành phần vật liệu của hệ đo được mô tả trong một input chuẩn của MCNP4C2. Trong đó, thông tin số liệu đầu dò do nhà sản xuất Canberra Industries Inc. cung cấp và thông tin số liệu buồng chì được khảo sát, đo đạc trực tiếp.

Mô hình hộp chứa mẫu Marinelli được xây dựng dựa trên cơ sở vật liệu chế tạo hộp bằng nhựa polyethylene với mật độ $0,857\text{g/cm}^3$ và có thành dày 0,1cm.

Tia gamma phát ra từ nguồn đo tương tác với môi trường vật chất hệ phổ kế gamma được mô hình hoá bằng mode p. Với mode p, electron sinh ra sau tương tác sẽ được xử lý theo mô hình gần đúng TTB (Thick Target Bremsstrahlung), khi đó electron di chuyển cùng hướng với tia gamma tới và đồng thời phát bức xạ Bremsstrahlung. Khi tia gamma xuyên qua vùng nghèo của đầu dò sẽ tạo ra các cặp hạt mang điện tích trái dấu và được tập hợp về các điện cực. Thông qua bộ tiền khuếch đại nhạy điện tích, điện tích của các hạt mang điện chuyển đổi thành xung điện áp. Xung điện áp tỉ lệ với phần năng lượng tia gamma được giữ lại trong đầu dò. Khi đó kết quả số liệu phân bố độ cao xung theo năng lượng hay phổ gamma mô phỏng được truy xuất bằng thẻ F8. Ngoài ra do ảnh hưởng của ba hiệu ứng gồm sự giãn rộng thống kê số lượng hạt mang điện, hiệu suất tập hợp điện tích và đóng góp nhiễu của hệ thống điện tử làm cho các quang đỉnh trong phổ gamma thực nghiệm phân bố dạng Gauss nên trong xây dựng mô hình còn sử dụng tuỳ chọn GEB (Gaussian Energy Broadening) của thẻ FT8 đi cùng với thẻ F8.

Trong mô hình các tia gamma phát ra từ nguồn đo là hộp chứa mẫu Marinelli có thể tích lớn, mật độ phân bố đều, thẻ nguồn SDEF được sử dụng cùng với các thẻ thông tin vị trí và kích thước nguồn SI và thẻ thông tin hàm phân bố mật độ xác suất tia gamma phát ra từ nguồn SP với các tuỳ chọn phù hợp.

Quá trình mô phỏng phổ gamma được thực hiện trên máy tính cá nhân với bộ vi xử lý Intel® Core i5 1,2GHz. Kết quả truy xuất được ghi trong một output chuẩn của MCNP4C2, bao gồm kết quả số liệu phân bố độ cao xung theo năng lượng hay phổ gamma mô phỏng và trên cơ sở đó tính toán hiệu suất ghi của đầu dò.



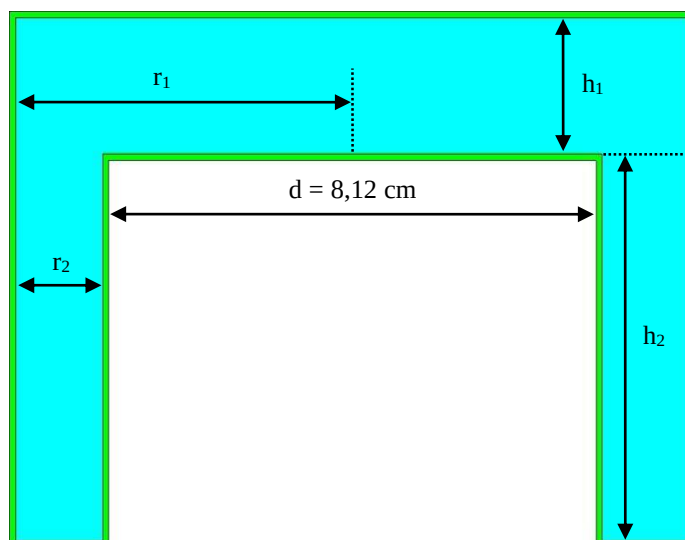
Hình 1. Buồng chì, hộp chứa mẫu và đầu dò của hệ phổ kế gamma phòng thấp dùng đầu dò HPGe đặt tại Trung tâm Hạt nhân Tp. Hồ Chí Minh được mô phỏng bằng chương trình MCNP4C2.

2.3. Thuật toán tiến hoá vi phân và quá trình tối ưu

Thuật toán tiến hoá vi phân (DE - Differential Algorithm) được phát triển năm 1995 ứng dụng thích hợp đối với các bài toán tối ưu với biến liên tục đã được kiểm chứng và cho thấy kết quả tốt hơn so với nhiều thuật toán khác như SA (Simulated Annealing), GA (Genetic Algorithm) [15]. Thuật toán DE đang được xem là một trong các thuật toán tiến hoá tốt nhất cho các bài toán tối ưu với biến liên tục. Trong lĩnh vực nghiên cứu hệ phổ kế gamma dùng đầu dò germanium siêu tinh khiết với cấu trúc hình học nguồn đo khác nhau, thuật toán DE vẫn còn rất mới mẻ, hiện chỉ có một vài nghiên cứu ứng dụng thuật toán DE kết hợp với MCNP [7] hoặc kết hợp với GESPECOR [8] đối với bài toán khảo sát đặc tính cấu trúc hình học của đầu dò HPGe. Đối với bài toán xác định kích thước tối ưu của nguồn đo thể tích lớn cũng chỉ có một vài nghiên cứu ứng dụng thuật toán GA kết hợp với MCNP [10, 11]. Đây là cơ sở để chúng tôi lựa chọn sử dụng thuật toán DE cho bài toán tối ưu kích thước hình học của hộp chứa mẫu Marinelli.

Thuật toán DE và GA nằm chung nhóm các thuật toán tiến hoá, mô phỏng quá trình tiến hoá trong tự nhiên thông qua quá trình lai ghép, đột biến và chọn lọc. Tập hợp các cá thể hay lời giải của bài toán tối ưu trong một thế hệ gọi là quần thể. Quần thể ban đầu được khởi tạo một cách ngẫu nhiên. Các cá thể mới sinh ra thông qua quá trình lai ghép và đột biến từ các cá thể của quần thể trước sẽ được chọn lọc, cá thể tốt nhất sẽ được giữ lại cho thế hệ sau. Thuật toán GA làm việc với chuỗi nhị phân hay mã số của các biến mà không phải là chính các biến. Trong khi đó, thuật toán DE làm việc với các biến số thực, cơ chế lai ghép, đột biến hoàn toàn khác với thuật toán GA. Ở thuật toán DE, cá thể mới sinh ra là sự kết hợp bởi tối thiểu 3 cá thể của quần thể trước đó, trong khi đó thuật toán GA chỉ có 2 cá thể bố mẹ được kết hợp để sản sinh cá thể mới trong thế hệ kế tiếp.

Ở thuật toán DE, mỗi cá thể là một lời giải được biểu diễn bằng một vector gồm n số thực $x_p^g = (x_{p,1}^g, \dots, x_{p,i}^g, \dots, x_{p,n}^g)$. Trong đó mỗi thành phần vector $x_{p,i}^g$ tương ứng với một biến quyết định của bài toán tối ưu; p là chỉ số biểu thị một cá thể hay lời giải khả dĩ trong một quần thể chạy từ 1 đến NP, NP là kích cỡ quần thể; g là chỉ số biểu thị một vòng lặp chu kỳ tiến hoá hay còn gọi là thế hệ. Điều kiện ràng buộc của các biến quyết định được giới hạn bởi giá trị cực tiểu $x_{\min} = (x_{1,\min}, \dots, x_{i,\min}, \dots, x_{n,\min})$ và giá trị cực đại $x_{\max} = (x_{1,\max}, \dots, x_{i,\max}, \dots, x_{n,\max})$ tương ứng đối với tất cả các lời giải khả dĩ p và các thế hệ g .



Hình 2. Hộp chứa mẫu Marinelli với bán kính phần trên r_1 , chiều cao phần trên h_1 , bề dày phần dưới r_2 , chiều cao phần dưới h_2 và đường kính hốc lõm $d = 8,12$ cm. Với thể tích cho trước $V = 450\text{cm}^3$, cấu trúc hình học hộp chứa mẫu Marinelli được xác định bởi các kích thước r_1 và h_2 .

Bảng 1. Các thông số về năng lượng tia gamma, thể tích hộp chứa mẫu và kích thước hình học của hộp chứa mẫu Marinelli.

	Ký hiệu	Giá trị đã biết	Biến quyết định	$x_{\min}$	$x_{\max}$	Giá trị tối ưu điển hình
(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)	(7)
Năng lượng tia gamma	E_γ	0,364MeV	-	-	-	-
Thể tích hộp chứa mẫu	V	450cm ³	-	-	-	-
Đường kính hốc lõm	d	8,12cm	-	-	-	-
Thành hộp chứa mẫu	t	0,1cm	-	-	-	-
Bán kính phần trên	r_1	-	$x_{p,1}^g$	4,061cm	7,049cm	5,4941cm
Chiều cao phần trên	h_1	-	-	-	-	-
Bề dày phần dưới	r_2	-	-	-	-	-
Chiều cao phần dưới	r_2	-	$x_{p,2}^g$	0,001cm	12,899cm	6,1042cm
Hiệu suất ghi lớn nhất của đầu dò	f_{opt}	-	-	-	-	0,041185

Ghi chú: Số liệu nói trên được lấy từ kết quả khảo sát và đo đạc trực tiếp hoặc lấy trực tiếp từ kết quả tính toán.

Trong nghiên cứu này, mục tiêu của bài toán tối ưu là xác định 2 tham số độc lập (r_1, h_2) trong 5 tham số kích thước hình học (r_1, h_1, r_2, h_2, d) của hộp chứa mẫu Marinelli với thể tích cho trước được mô tả trong Hình 2. Mỗi cá thể hay lời giải khả dĩ của bài toán tối ưu được mô tả bằng một vector $x_p^g = (x_{p,1}^g, x_{p,2}^g)$, 2 thành phần vector hay biến quyết định tương ứng với 2 tham số độc lập (r_1, h_2). Điều kiện ràng buộc của các biến được giới hạn bởi giá trị cực tiểu $x_{\min} = (x_{1,\min}, x_{2,\min})$ và giá trị cực đại $x_{\max} = (x_{1,\max}, x_{2,\max})$ được liệt kê ở cột 5 và 6 Bảng 1.

Hàm mục tiêu được xây dựng dựa trên cơ sở tìm kiếm hiệu suất ghi lớn nhất của đầu dò được tính toán bằng chương trình mô phỏng Monte Carlo MCNP4C2. Do đó, mỗi lời giải khả dĩ của bài toán tối ưu, hàm mục tiêu có một giá trị xác định, gọi là độ thích nghi. Lời giải tốt nhất sẽ cho kết quả độ thích nghi có giá trị lớn nhất. Mặt khác, hàm mục tiêu được xây dựng kết hợp với cơ chế hàm phạt (penalty function). Ở đây, đối với các lời giải $x_p^g = (x_{p,1}^g, x_{p,2}^g)$ thoả mãn các điều kiện (2) và (3) nhưng không thoả mãn điều kiện (4), độ thích nghi được giảm một cách thích hợp để chắc chắn rằng lời giải này sau đó sẽ được loại bỏ trong suốt quá trình tiến hoá. Theo đó, hàm mục tiêu có dạng như sau:

$$f_{\text{opt}} = \varepsilon_{\text{MCNP}}(x_{p,1}^g, x_{p,2}^g, E, V, d) - \max \left[\left(1 - \frac{V}{V_2} \right) \varepsilon_{\text{MCNP}}(x_{p,1}^g, x_{p,2}^g, E, V, d), 0 \right] \rightarrow \max \quad (1)$$

Trong đó:

$\varepsilon_{MCNP}(x_{p,1}^g, x_{p,2}^g, E, V, d)$ là hiệu suất ghi của đầu dò được xác định từ phổ gamma tính toán bằng chương trình MCNP4C2.

$$V_2 = \pi(2r_1r_2 - r_2^2)h_2, r_2 = r_1 - \left(\frac{d}{2} + t\right)$$

E, V, d và t lần lượt là năng lượng tia gamma, thể tích, đường kính hốc lõm và thành hộp chứa mẫu Marinelli cho trước được liệt kê ở cột 3 Bảng 1.

$$x_{1,\min} \leq x_{p,1}^g \equiv r_1 \leq x_{1,\max} \quad (2)$$

$$x_{2,\min} \leq x_{p,2}^g \equiv h_2 \leq x_{2,\max} \quad (3)$$

$$V_2 \leq V \quad (4)$$

Cấu trúc của chương trình máy tính gồm 4 bước được viết bằng ngôn ngữ lập trình DIGITAL Visual Fortran 6 [16] và được trình bày trong lưu đồ thuật toán như Hình 3.

Bước 1: Khởi tạo quần thể ban đầu (thế hệ $g = 0$). Quần thể ban đầu được khởi tạo bằng cách phát ngẫu nhiên từng cá thể x_p^0 theo phương trình sau:

$$x_{p,i}^0 = x_{i,\min} + (x_{i,\max} - x_{i,\min}) \times \text{rand} \quad (5)$$

Trong đó: $x_{i,\min}$ và $x_{i,\max}$ lần lượt là giá trị cực tiểu và giá trị cực đại của các biến $x_{p,i}^g$; rand là hàm phát số ngẫu nhiên phân bố đồng dạng có giá trị nằm trong khoảng (0, 1).

Bước 2: Đột biến. Đây là bước đầu tiên của vòng lặp chu kỳ tiến hoá tạo ra NP vector đột biến. Mỗi vector đột biến n_p^g được tạo ra từ 3 cá thể khác nhau bằng cách lựa chọn ngẫu nhiên từ NP cá thể trong quần thể của thế hệ g như sau:

$$n_p^g = x_c^g + F(x_a^g - x_b^g) \text{ với } p = \overline{1, NP} \quad (6)$$

Trong đó: F là thông số điều khiển tốc độ đột biến có giá trị trong khoảng (0, 1) [17]. Thông số này đóng vai trò quan trọng trong việc duy trì tính đa dạng của quần thể.

Để đảm bảo các thành phần của vector đột biến nằm trong điều kiện ràng buộc của biến, tiến trình thuật toán cần phải thỏa mãn điều kiện sau đây:

$$\begin{aligned} \text{Nếu } n_{p,i}^g < x_{i,\min} \text{ thì } n_{p,i}^g &= x_{i,\min} \\ \text{Nếu } n_{p,i}^g > x_{i,\max} \text{ thì } n_{p,i}^g &= x_{i,\max} \end{aligned} \text{ với } p = \overline{1, NP}; i = \overline{1, n} \quad (7)$$

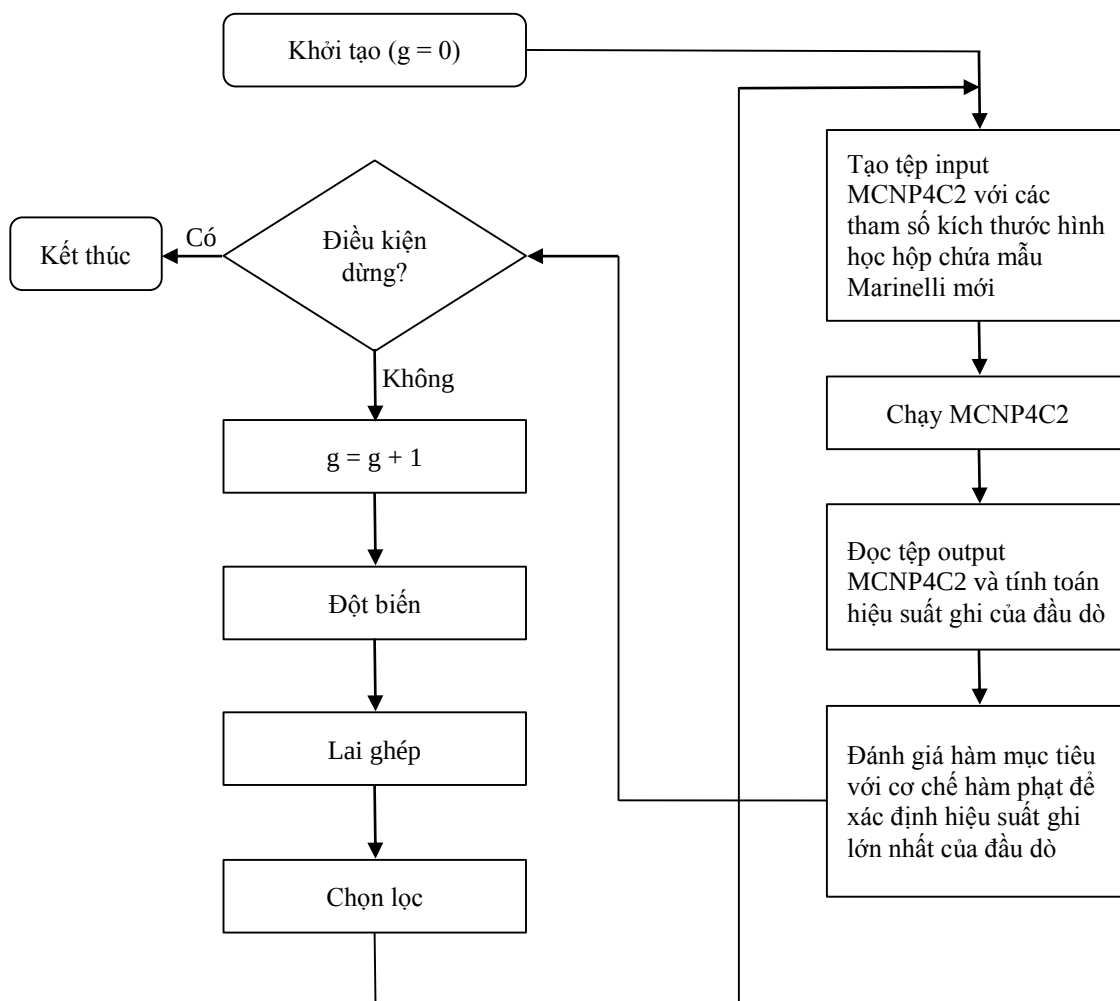
Bước 3: Lai ghép. Sau quá trình đột biến, thuật toán sẽ tiến hành quá trình lai ghép để tạo ra một cá thể mới, gọi là vector thử t_p^g bằng cách trộn ngẫu nhiên vector đột biến n_p^g với vector ban đầu x_p^g theo quy tắc đối với các thành phần của vector thử:

$$t_{p,i}^g = \begin{cases} n_{p,i}^g & \text{nếu } \text{rand} < \text{CR} \\ x_{p,i}^g & \text{cho các trường hợp còn lại} \end{cases} \text{ với } p = \overline{1, NP}; i = \overline{1, n} \quad (8)$$

Trong đó: CR là thông số điều khiển tốc độ lai ghép có giá trị nằm trong khoảng (0, 1) [17].

Bước 4: Chọn lọc. Đây là bước cuối cùng của một vòng lặp chu kỳ tiến hoá bằng việc so sánh giá trị của hàm mục tiêu f_{opt} hay độ thích nghi của vector thử t_p^g với vector ban đầu x_p^g . Các vector được lựa chọn cho thế hệ kế tiếp phải có giá trị tốt nhất của hàm mục tiêu f_{opt} (trong nghiên cứu này là hiệu suất ghi lớn nhất của đầu dò) theo quy tắc sau đây:

$$x_p^{g+1} = \begin{cases} t_p^g & \text{nếu } \text{rand} < \text{CR} \\ x_p^g & \text{cho các trường hợp còn lại} \end{cases} \text{ với } p = \overline{1, NP} \quad (9)$$



Hình 3. Lưu đồ thuật toán tiến hoá vi phân kết hợp với chương trình MCNP4C2 để tối ưu kích thước hình học của hộp chứa mẫu Marinelli.

Để xác định kích thước tối ưu của hộp chứa mẫu Marinelli, thuật toán tiến hoá vi phân sử dụng kích cỡ quần thể $NP = 50$, thông số điều khiển tốc độ đột biến $F = 0,5$, thông số điều khiển tốc độ lai ghép $CR = 0,85$ và số vòng lặp chu kỳ tiến hoá hay số thế hệ $g = 100$.

Hiệu suất ghi của đầu dò tính toán bằng MCNP4C2 thông qua thẻ truy xuất kết quả phân bố độ cao xung F8 và thẻ mở rộng đỉnh năng lượng dạng Gauss FT8 với tùy chọn GEB. Mỗi cấu trúc kích thước hình học hộp chứa mẫu Marinelli tính toán bằng MCNP4C2 được thực hiện với $2,1 \times 10^6$ lịch sử hạt để đảm bảo sai số tương đối trong kết quả số liệu phân bố độ cao xung theo năng lượng hay phổ gamma mô phỏng nhỏ hơn 0,003.

Thời gian chạy của một lần thực hiện bài toán tối ưu là hơn 100 giờ (~ 4,2 ngày) trên máy tính cá nhân với bộ vi xử lý Intel® Core i5 1,2GHz.

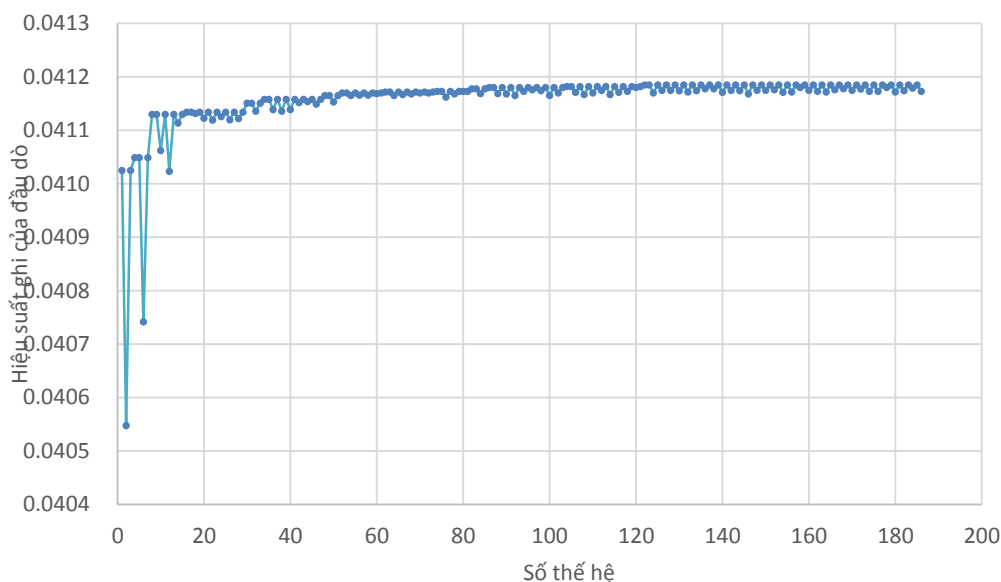
Việc sử dụng thuật toán tiến hoá vi phân kết hợp với chương trình MCNP4C2 để nghiên cứu tối ưu kích thước hình học hộp chứa mẫu Marinelli được thực hiện tự động hoàn toàn, không cần phải can thiệp thủ công trong suốt quá trình chạy mô phỏng và tối ưu. Đầu tiên, thông số mô hình cấu trúc hình học và thành phần vật liệu của hệ phổ kế gamma gồm đầu dò, nguồn phóng xạ và buồng chì che chắn được mô tả trong tệp input chuẩn của MCNP4C2, trong đó bao gồm các số liệu đã biết và các tham số kích thước hình học (r_1, h_2) hộp chứa mẫu Marinelli được khởi tạo ngẫu nhiên, sau đó chạy mô phỏng MCNP4C2 để lấy kết quả phân bố độ cao xung theo năng lượng và tính toán hiệu suất ghi của đầu dò. Kế tiếp, kết quả hiệu suất ghi của đầu dò và số liệu tính toán của quá trình tối ưu sẽ được lưu trữ và ghi lại trong tệp kết quả. Cuối cùng, một quần thể gồm các cá thể hay bộ tham số cấu trúc hình học (r_1, h_2) hộp chứa mẫu Marinelli mới

được phát ra và quá trình tối ưu được thực hiện với vòng lặp chu kỳ tiến hoá mới. Kết quả tối ưu được xác định sau hơn 100 vòng lặp chu kỳ tiến hoá hay thể hệ đối với quần thể gồm 50 cá thể. Các kích thước hình học tối ưu của hộp chứa mẫu Marinelli được trình bày ở cột cuối cùng của Bảng 1 với hiệu suất ghi lớn nhất của đầu dò đạt đến 0,041185.

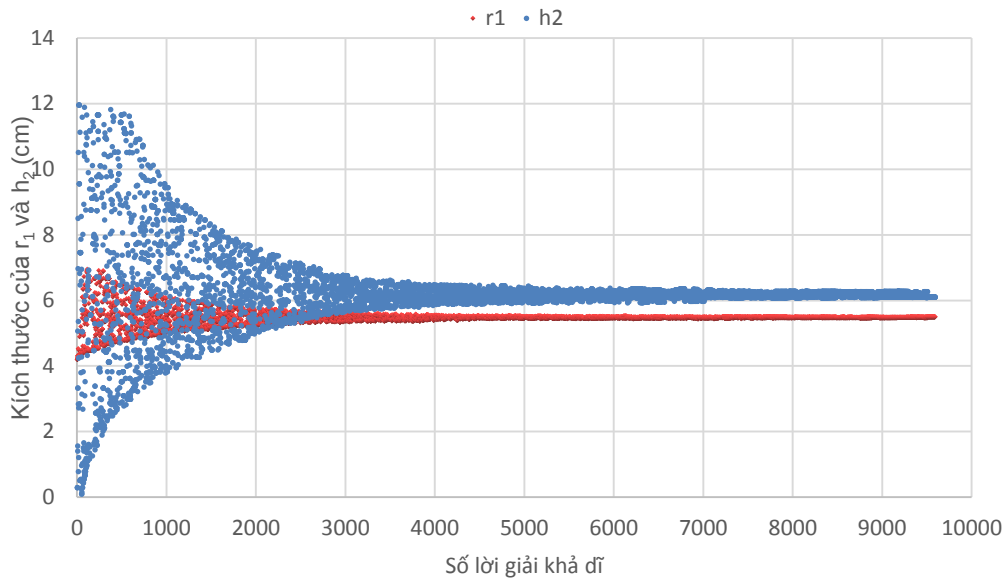
3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Do ảnh hưởng của hiệu ứng năng lượng tia gamma, hiệu ứng mật độ, hiệu ứng thành phần hoá học của mẫu đo là không đáng kể đối với kích thước hình học tối ưu của hộp chứa mẫu Marinelli [11] nên trong nghiên cứu này, mẫu đo dạng dung dịch NaI mật độ 1g/cm^3 chứa các nhân phóng xạ phát tia gamma năng lượng 0,364MeV được sử dụng. Hiệu suất ghi của đầu dò tại năng lượng 0,364MeV tương ứng với bộ tham số cấu trúc hình học của hộp chứa mẫu Marinelli được tính toán bằng chương trình MCNP4C2 là thông số quan trọng của hàm mục tiêu f_{opt} (1) để tìm giá trị lớn nhất của bài toán tối ưu.

Tiến trình hội tụ về lời giải tối ưu được minh hoạ trong Hình 4 và Hình 5. Hình 4 cho thấy rằng tiến trình chạy mô phỏng và tối ưu được kéo dài lên đến 186 thể hệ. Tuy nhiên, chỉ hơn 100 thể hệ bài toán đã hội tụ về lời giải tối ưu và đã xác định hiệu suất ghi lớn nhất của đầu dò đạt đến 0,041185. Kết quả này có giá trị lớn hơn so với kết quả của bài toán tối ưu sử dụng thuật toán GA kết hợp với chương trình MCNP4C2 trước đây, chứng tỏ thuật toán DE đã thể hiện ưu điểm vượt trội so với thuật toán GA trong quá trình tìm kiếm tối ưu.



Hình 4. Sự hội tụ về lời giải tối ưu được biểu diễn bởi hiệu suất ghi lớn nhất của đầu dò trong một chu kỳ tiến hoá theo số thế hệ. Sau hơn 100 thế hệ, tiến trình chạy mô phỏng và tối ưu đã xác định hiệu suất ghi lớn nhất của đầu dò đạt đến 0,041185.



Hình 5. Sự hội tụ về lời giải tối ưu được biểu diễn thông qua độ phân tán của kích thước r_1 và h_2 theo số lời giải khả dĩ trong không gian tìm kiếm của bài toán tối ưu. Kích thước tối ưu của r_1 và h_2 lần lượt bằng 5,4941cm và 6,1042cm với hiệu suất ghi lớn nhất của đầu dò bằng 0,041185.

Ở Hình 5, các lời giải khả dĩ của bài toán tối ưu được sắp xếp theo hiệu suất ghi của đầu dò tăng dần, độ phân tán trung bình $\bar{D}_i$ của nhóm 1000 lời giải khả dĩ liên tiếp (r_1, h_2) được trình bày trong Bảng 2 và được định nghĩa như sau:

$$\bar{D}_i = \frac{\frac{1}{n} \sum_{j=1}^{NS} |x_{ij} - x_{i,opt}|}{x_{i,opt}} \times 100\% \quad (10)$$

Trong đó: opt là chỉ số biểu thị lời giải tối ưu; $i = \overline{1, n}$ là chỉ số biểu thị biến quyết định; $j = \overline{1, NS}$ là chỉ số biểu thị lời giải khả dĩ của tiến trình tối ưu. Trong nghiên cứu này, $n = 2$, $NS = 9300$.

Bảng 2. Độ phân tán trung bình $\bar{D}_i$ của 9 nhóm lời giải khả dĩ liên tiếp đối với các kích thước hình học r_1 và h_2 của hộp chứa mẫu Marinelli.

Độ phân tán trung bình	Nhóm 1000 lời giải khả dĩ liên tiếp									Hàm khớp và hệ số tương quan
	1000	2000	3000	4000	5000	6000	7000	8000	9000	
$\bar{D}_1$ đối với r_1	0,0190	0,0079	0,0037	0,0021	0,0008	0,0007	0,0006	0,0005	0,0004	$y = 0,017e^{-0,0005x}$ $R^2 = 0,9026$
$\bar{D}_2$ đối với h_2	0,4397	0,1991	0,0920	0,0350	0,0255	0,0176	0,0158	0,0116	0,0150	$y = 0,368e^{-0,0004x}$ $R^2 = 0,8661$

Hàm khớp của độ phân tán trung bình $\bar{D}_i$ của 9 nhóm lời giải khả dĩ liên tiếp đối với các kích thước hình học r_1 và h_2 được trình bày ở cột cuối cùng Bảng 2 cho thấy rằng tiến trình hội tụ của bài toán tối ưu để xác định lời giải tốt nhất với độ phân tán trung bình $\bar{D}_i$ giảm theo quy luật hàm mũ.

Mặc khác, do tính chất thống kê của kết quả tính toán tối ưu trong nghiên cứu này và xét vùng giá trị của hàm mục tiêu f_{opt} giảm 0,1% so với hiệu suất lớn nhất của đầu dò (từ lời giải thứ 5000 trở lên, xem Hình 5) nên lời giải tối ưu không phải là duy nhất và tồn tại một miền tối ưu (r_1, h_2) , với:

$$\begin{aligned} 5,4361\text{cm} &\leq r_1 \leq 5,5307\text{cm} \\ 5,9188\text{cm} &\leq h_2 \leq 6,4312\text{cm} \end{aligned}$$

Bảng 3. Hiệu suất ghi lớn nhất của đầu dò với kích thước tối ưu r_1 , h_1 , r_2 , h_2 của hộp chứa mẫu Marinelli.

STT	Hiệu suất ghi lớn nhất của đầu dò	r_1 (cm)	h_1 (cm)	r_2 (cm)	h_2 (cm)
1	0,041185	5,49	2,21	1,29	6,14
2	0,041185	5,42	2,17	1,32	6,34
3	0,041182	5,46	2,24	1,26	6,28
4	0,041178	5,47	2,22	1,27	6,23
5	0,041173	5,42	2,17	1,32	6,34
6	0,041172	5,47	2,22	1,27	6,26
7	0,041170	5,46	2,24	1,27	6,28
8	0,041165	5,49	2,21	1,29	6,10
9	0,041165	5,49	2,21	1,29	6,11
10	0,041158	5,47	2,23	1,27	6,25
Trung bình		5,46	2,21	1,29	6,23
Độ lệch chuẩn		0,03	0,03	0,02	0,09
Độ lệch tương đối		0,51%	1,15%	1,66%	1,41%

Hiệu suất ghi lớn của đầu dò và các kích thước tối ưu r_1 , h_1 , r_2 , h_2 của 10 lần tính lặp sử dụng thuật toán tiến hoá vi phân kết hợp với MCNP4C2 được trình bày trong Bảng 3. Kết quả cho thấy rằng trong 10 lần tính lặp của bài toán tối ưu, độ lệch tương đối của các kích thước tối ưu r_1 , h_1 , r_2 , h_2 không vượt quá 2% và được trình bày ở dòng cuối cùng Bảng 3. Hơn nữa, trong thực tế thí nghiệm chế tạo hộp chứa mẫu Marinelli, với độ chính xác của thước đo là 1mm hay 0,1cm, 10 bộ kích thước tối ưu nói trên được xem là trùng nhau trong vùng sai số của thước đo. So sánh với kết quả từ công trình [11] cho thấy rằng các kích thước tối ưu của hộp chứa mẫu Marinelli được xác định từ nghiên cứu này là cũng giống nhau trong vùng sai số của thước đo.

4. KẾT LUẬN

Việc sử dụng thuật toán tiến hoá vi phân kết hợp với chương trình MCNP4C2 đã cho phép xác định kích thước tối ưu của hộp chứa mẫu Marinelli hoàn toàn tự động mà không cần phải can thiệp thủ công nào từ khâu tạo tệp input đến khâu đọc tệp output để xử lý số liệu và cuối cùng là khâu thực hiện các phép toán lai ghép, đột biến và chọn lọc của thuật toán tiến hoá vi phân. Mặc dù thời gian tính toán của một tiến trình tối ưu còn khá lớn (~4,2 ngày), chủ yếu là thời gian dành cho việc tính toán mô phỏng MCNP4C2, nhưng hạn chế này có thể khắc phục khi chạy trên hệ máy tính mạnh song song. Thuật toán tiến hoá vi phân đã thể hiện ưu điểm vượt trội so với thuật toán di truyền trong việc tìm kiếm cực trị của bài toán tối ưu. Trong phạm vi sai số của thước đo, các kích thước tối ưu của hộp chứa mẫu Marinelli được xác định từ nghiên cứu này hoàn toàn phù hợp với kết quả nghiên cứu trước đây của chúng tôi.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] J.G. Guerra, J.G. Rubiano, G. Winter, ..., J.P. Bolivar, "Computational characterization of HPGe detectors usable for a wide variety of source geometries by using Monte Carlo simulation and a multi-objective evolutionary algorithm," *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A* (2017), 113-122.
- [2] J.D. Hemingway, "Investigations Towards an Improved Marinelli for Gamma Detectors," *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry* (1986), 299-306.
- [3] V.X. Ân, "Nghiên cứu phân bố hiệu suất của hệ phổ kế gamma phòng thấp sử dụng đầu dò germanium siêu tinh khiết," *Tạp chí Khoa học và Công nghệ - Trường Đại học Công nghiệp Tp. Hồ Chí Minh* (2018), 56-62.
- [4] A.M. Ababneh and M.M. Eyadeh, "Coincidence summing corrections in HPGe gamma-ray spectrometry for Marinelli-beakers geometry using peak to total (P/T) calibration," *Journal of Radiation Research and Applied Sciences* (2015), 323-327.
- [5] T. Kajimoto, S. Endo, N.T. Thanh and K. Shizuma, "Calculation of coincidence summing in gamma-ray spectrometry with the EGS5 code," *Applied Radiation and Isotopes* (2015), 53-58.
- [6] K. Shizuma, Y. Oba and M. Takada, "A practical method for determining γ -ray full-energy peak efficiency considering coincidence-summing and self-absorption corrections for the measurement of environmental samples after the Fukushima reactor accident," *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* (2016), 183-190.

- [7] I.V. Prozorova, N.G. Eh, S.V. Bedenko, ..., H.R.V. Carrillo, "Characterizing the coaxial HPGe detector using Monte Carlo simulations and evolutionary algorithms," *Applied Radiation and Isotopes* (2021) 109748.
- [8] N.M. Murphy, L.L. Vintro, C.I. Burbidge and L. Currivan, "An automated programme for the optimisation of HPGe detector parameters using an evolutionary algorithm with GESPECOR," *Applied Radiation and Isotopes* (2020), 108883.
- [9] B. Jeon, J. Kim, M. Moon and G. Cho, "Parametric optimization for energy calibration and gamma response function of plastic scintillation detectors using a genetic algorithm," *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* (2019), 8-14.
- [10] S.M. Zamzamin, S.A. Hosseini and M. Samadfam, "Optimization of the Marinelli beaker dimensions using genetic algorithm," *Journal of Environmental Radioactivity* (2017), 81-88.
- [11] N.Q. Huy, D.Q. Binh and V.X. An, "A study for improving detection efficiency of an HPGe detector based gamma spectrometer using Monte Carlo simulation and genetic algorithms," *Applied Radiation and Isotopes* (2012), 2695-2702.
- [12] Canberra, *Genie 2000 Basic Spectroscopy Software Version 2.1*, Canberra Industries Inc, 2002.
- [13] J.F. Briesmeister, *MCNP - A General Monte Carlo N-Particle Transport Code Version 4C*, Los Alamos, 2000.
- [14] M.L. Averill and K.W. David, *Simulation Modeling and Analysis*, McGraw-Hill, 2000.
- [15] R. Storn and K. Price, "Differential evolution - A simple and efficient heuristics for global optimization over continuous spaces," *Journal of Global Optimization* (1997), 341-359.
- [16] M. Etzel and K. Dickinson, *Digital Visual Fortran Programmer's Guide*, Elsevier, 1999.
- [17] R. Storn and K. Price, "Differential evolution - A simple and efficient adaptive scheme for global optimization over continuous spaces," *International Computer Science Institute, Berkeley, CA* (1995), Technical Report TR-95-012.

A STUDY OF OPTIMIZING GEOMETRICAL DIMENSIONS OF THE MARINELLI BEAKER USING A DIFFERENTIAL EVOLUTION ALGORITHM COUPLED WITH MCNP4C2 COMPUTATIONAL CODE

VO XUAN AN

Faculty of Electronics Technology, Industrial University of Ho Chi Minh City
 voxuanan@iuh.edu.vn

Abstract. The Marinelli beakers with large volume have been widely used to contain samples in measurements of low-activity environmental samples by gamma spectrometers using high purity germanium (HPGe) detectors due to the solid angle of gamma beam from the radiation source to the detector to be wide. In this work, we have developed a computational methodology for optimizing geometrical dimensions of the Marinelli beaker based on the differential evolution algorithm couple with MCNP4C2 code. The selected sample was the radiation solution of ^{131}I having the energy line of 0.364MeV and the main component to be water with volume of 450cm^3 and density of 1g/cm^3 . The differential evolution algorithm was used to search the geometrical dimensions of the Marinelli beaker including the upper radius, r_1 and the lower height, h_2 through maximizing the detector efficiency computed by the MCNP4C2 code for that geometrical dimensions, respectively. After over 100 generations, the search algorithm was focused with the maximum efficiency of 0.041185 for the Marinelli beaker model having the upper radius, r_1 equal to 5.4941cm and the lower height, h_2 equal to 6.1042cm. Comparing with the genetic algorithm, the differential evolution algorithm showed that there was the outstanding advantage in optimization searching. Within the error range of measuring instrument, the optimization geometrical dimensions obtained from this work agrees with our previous results.

Keywords. Marinelli beaker, HPGe detector, differential evolution algorithm, MCNP4C2.

Ngày gửi bài: 27/07/2021

Ngày chấp nhận đăng: 27/10/2021