مقاله پژوهشی

لیزرپزشکی؛ ۱۳۸۹، دوره ۷، شماره ۳، صفحات: ۳۱-۲۵.

بررسی طیف عنصر ^{22}Na به‌روش Grid search تعمیم‌یافته

محمدرضا رضایی[۱]
سعید محمدی[۱]
علی نگارستانی[۲]
سیدمهدی هاشمی[۳]
داریوش افضلی[۳]

[۱] مرکز تخصصی دکتری پیام نور، تهران
[۲] تحصیلات تکمیلی دانشگاه صنعتی، کرمان
[۳] مرکز بین‌المللی علوم و تکنولوژی پیشرفته و علوم محیطی، کرمان

نویسندهٔ مسئول: محمدرضا رضایی، تلفن: ۶۱۱۱۳۵۵۸
پست الکترونیک: mohamadreza45@gmail.com

خلاصه

مقدمه: با نوشتن یک کد خاص براساس تکنیک Grid search طیف انرژی عناصر بررسی شده است. این روش را می‌توان برای بررسی طیف‌های اتمی، مولکولی و هسته‌ای، پالس‌های لیزر و مطالعهٔ طیف‌هایی که از برهمکنش لیزر با سلول‌ها و اجزاء مختلف انسانی به‌دست می‌آید، به‌کار برد. طیف میکرورامان لنزهای چشمی برازش‌شده توسط De.Mul و طیف زمانی برازش شده با نرم‌افزار gnuplot یک تک‌مولکول که با لیزری با طول موج ۵۸۵ نانومتر برانگیخته شده است، کاملاً بر داده‌های اندازه‌گیری شده منطبق نیستند. در یک حالت خاص این کد برای طیف انرژی ^{22}Na به‌کار برده شده است.

روش بررسی: برای برازش یک معادله به داده‌های اندازه‌گیری‌شده ابتدا شکل نمودار داده‌ها در هر نرم‌افزار ممکن مشاهده و سپس معادلهٔ مناسبی حدس زده می‌شود و ضرایب آن به‌صورت دستی تغییر می‌کند تا نمودار معادلهٔ برازش شده با داده‌ها مطابقت داشته باشد. بعد از این مرحله با استفاده از یک کد نوشته‌شده بر اساس تکنیک Grid search معرفی شده اندازه‌گیری داده‌های ناشی از معادله معرفی می‌شود و داده‌های اندازه‌گیری شده با توجه به چگونگی تغییر χ^2 با یکدیگر مقایسه می‌شوند. در صورت اختلاف زیاد بین آن‌ها با معرفی پله‌هایی که میزان تغییرات ضرایب معادلهٔ برازش‌شده را مشخص می‌کند، سعی می‌شود $\chi 2$ کاهش یابد. این عمل تاجایی تکرار می‌شود که χ^2 به کمترین مقدار ممکن برسد.

یافته‌ها: با این روش می‌توان طیف انرژی هر ماده‌ای را فرمول‌بندی کرد. به‌طور مثال معادلهٔ توصیف کنندهٔ طیف انرژی ^{22}Na که با کمترین خطا بر داده‌های اندازه‌گیری شده برازش‌شده است، به‌صورت زیر خواهد بود:

$$N=199.0477 +76100EXP (0.00167 (E-508.7539)^2) + 75100EXP (0.00168 (E-509.2428)^2) + 3450.8070 EXP (0.0000831(E-655.356)^2) + 4002.813EXP (0.0001431(E-839.401)^2) + 11000EXP (0.00105 (E-1048.0230)^2)$$

شروع عملیات برازش با پارامتر $\chi^2 = 1107.6$ شروع شده و بعد از یک هفته با پارامتر $\chi^2=44.16$ خاتمه یافته است.

نتیجه گیری: با استفاده از یک کد خاص که بر اساس تکنیک grid search نوشته شده سعی شده است تا معادلهٔ توصیف‌کنندهٔ طیف انرژی عناصر معرفی شود.

واژه‌های کلیدی: تکنیک Grid search، طیف انرژی ^{22}Na، Chi-Squared.

مقدمه

تکنیک‌های زیادی برای برازش‌کردن یک نمودار به داده‌های اندازه‌گیری‌شده وجود دارد. استفاده از معادلهٔ برازش‌شده در فیزیک پزشکی، لیزر، هسته‌ای، اتمی و ... کاربرد زیادی دارد [۱۴-۱]. قریب به اتفاق این روش‌ها در کتاب معروف Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences آورده شده است [۱۵].

چهار روش برای برازش‌کردن وجود دارد [۱۶]:

۱- Grid search
۲- gradient search
۳- analytical matrix inversion
۴- Marquardt routines

این الگوها بر اساس مینیمم کردن پارامتر($\chi 2$) Chi-Squared استوارند. در روش Grid search ابتدا پارامترهای اولیه‌ای معرفی می‌شوند. سپس هر پارامتر جداگانه با پله‌هایی که معرفی می‌شود طوری تغییر می‌کند که $\chi 2$ کاهش یابد. در روش gradient search تمام پارامترها با پله‌های اولیهٔ معرفی‌شده همزمان تغییر می‌کنند و در مراحل بعدی با توجه به نحوهٔ تغییر $\chi 2$ مقدار پله‌ها تغییر می‌کند تا در نهایت $\chi 2$ کاهش یابد. ولی روش Grid search قابل اطمینان‌تر و سریع‌تر است [۱۶]. در روش Analytical برازش ماتریس n×n تغییرات $\chi 2$ نسبت به پله‌ها تشکیل می‌شود و با استفاده از عملیات ماتریسی چگونگی تغییر $\chi 2$ بررسی می‌شود. در روش Marquardt برازش عناصر ماتریس روش Analytical برازش با یک ضریب ثابت افزایش می‌یابند و تغییرات $\chi 2$ بررسی می‌شود. De.Mul در سال ۱۹۹۰ کدی را بر اساس تکنیک Grid search وgradient search معرفی کرد و با استفاده از آن طیف میکرورامان لنزهای چشمی را برازش کرد [۱۷].

طیف برازش‌شده کاملاً منطبق بر طیف تجربی نیست. De.Mul سه سال بعد نیز برنامه‌ای را بر اساس چهار روش معرفی‌شده ارائه کرد.

[Downloaded from icml.ir on 2024-04-19]

در این مقاله هیچ نمودار برازش شده‌ای معرفی نشده است تا نحوهٔ عملکرد هر روش مشخص باشد [۱۶].

در مطالعه‌ای دیگر لیزری با طول موج ۷۸۵ نانومتر بر لایه‌های نازک تومور تابیده شده است و طیف فلورسانس القایی آن‌ها با استفاده از کد SVM که براساس تکنیک grid search نوشته‌شده، برازش‌شده است [۱۸]. در این تحقیق هیچ نمودار تجربی برای توصیف و درستی نمودار برازش‌شده، ارائه نشده است.

روش Grid search یکی از روش‌های مناسب برازش کردن تابع بر داده‌ها است [۱۹و۲۰]. نرم‌افزارهای زیادی مثل Matlab و ... IGORPRO, Gnuplot, Origin, Labplot, Phytron جهت برازش تابع بر داده‌ها وجود دارد و Gnuplot یکی از قدرتمندترین آن‌ها است که در آنالیز و اسپکتروسکوپی بیومولکول‌ها و ... کاربرد گسترده‌ای دارد [۲۱ و ۲۲]. با این نرم‌افزار تابع بیشتر بر داده‌ها منطبق می‌شود ولی مقدار $\chi 2$ افزایش می‌یابد [۲۳ و ۲۴]. با ارائهٔ یک برنامهٔ جدید و متفاوت که می‌تواند به‌عنوان الگوی جدیدی مورد استفادهٔ محققان قرار گیرد، سعی شده است تا روش مناسبی براساس تکنیک Grid search برای استخراج معادلهٔ توصیف‌کنندهٔ طیف انرژی عناصر معرفی شود. روش Grid search دارای مزایای زیر است:

۱- امکان انطباق بیشتر معادله بر داده‌ها با کمترین مقدار $\chi 2$ وجود دارد.

۲- شناسایی ضرایب حساس امکان‌پذیر است (ضرایبی که تغییرات خیلی کم آن‌ها باعث تغییرات زیادی در $\chi 2$ می‌شود).

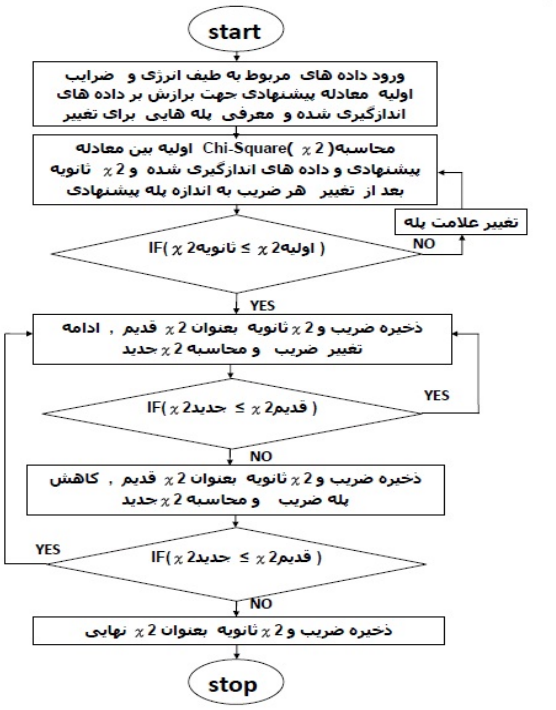
۳- قابل اطمینان و سریع‌تر از روش‌های دیگر است.

۴- برنامه نویسی آن ساده‌تر از روش‌های دیگر است.

۵- در روش‌های دیگر که ضرایب همزمان تغییر می‌کند، امکان اجرای همزمان کدها با کامپیوترهای دیگر وجود ندارد ولی در این روش به‌علت اینکه هر ضریب جداگانه تغییر می‌کند، امکان اجرای همزمان آن با کامپیوترهای دیگر وجود دارد. از نرم‌افزارهای PowerStation 4.0 و Origin Pro8 جهت بررسی نتایج استفاده شده است. داده‌های طیف ^{22}Na در این تحقیق ازدستگاه Cassy-MCA استخراج شده است [۲۵ و ۲۶].

روش بررسی

برای برازش یک معادله به داده‌های اندازه‌گیری شده ابتدا با استفاده از نرم‌افزار origin pro8 یا نرم‌افزارهای مناسب دیگر شکل نمودار داده‌ها مشاهده می‌شود. در صورت عدم تبعیت داده‌ها از معادلات برازش معرفی‌شده در این نرم‌افزارها معادلهٔ مناسبی حدس زده می‌شود و ضرایب آن به‌صورت دستی تغییر می‌کند تا نمودار معادلهٔ برازش‌شده به داده‌ها مطابقت داشته باشد. بعد از این مرحله با استفاده از یک کد نوشته‌شده بر اساس تکنیک‌های معرفی‌شده داده‌های ناشی از معادله معرفی می‌شود و داده‌های اندازه‌گیری‌شده با توجه به چگونگی تغییر $\chi 2$ با هم مقایسه می‌شوند. با معرفی پله‌هایی که میزان تغییرات ضرایب معادلهٔ برازش‌شده را مشخص می‌کند، سعی می‌شود $\chi 2$ کاهش یابد. این عمل تاجایی تکرار می‌شود که $\chi 2$ به کمترین مقدار ممکن برسد. فلوچارت کد Gridsearch تعمیم‌یافته در شکل ۱ چگونگی عملکرد برنامه را در برون‌یابی ضرایب نشان می‌دهد.



شکل ۱- فلوچارت برنامهٔ Gridsearch تعمیم یافته

روش آماری تحلیل داده‌ها بر اساس روش کمترین مربعات استوار است [۱۵]. برای انجام یک عمل برازش ابتدا برنامهٔ Grid search مناسبی برای تعیین ضرایب معادلهٔ توصیف‌کنندهٔ طیف عناصر نوشته شده است سپس داده‌های مربوط به طیف ^{22}Na با استفاده از دستگاه تحلیل‌گر چندکاناله (MCA) و نرم‌افزار Cassy کامپیوتری استخراج شده است (جدول۱). ۵ قلهٔ کوچک و بزرگ در طیف ^{22}Na مشاهده می‌شود که شکل هر یک گوسی است. برای توصیف یک نمودار گوسی به سه ضریب نیاز داریم یک عدد ثابت نیز برای تنظیم نمودار لازم است. درنتیجه برای توصیف این طیف به ۱۶ ضریب (۱۶=۱+۳×۵) نیاز خواهیم داشت. بنابراین معادلهٔ توصیف‌کنندهٔ طیف انرژی ^{22}Na به‌صورت معادلهٔ (۱) خواهد بود:

(1)

N=A1+A2 EXP (A3 (E-A4) 2)
+ A5 EXP (A6 (E-A7) 2) + A8 EXP (A9(E-A10) 2)
+ A11 EXP (A12 (E-A13) 2) +A14 EXP (A15 (E-A16) 2)

[Downloaded from icml.ir on 2024-04-19]

ورودی‌های این برنامه را ابتدا با ۱۶ ضریب حدسی آغاز می‌کنیم. ضریب A1 تقریباً مقدار N را در کمترین نشان می‌دهد. ضرایب A11 A8, A5, A2 و A14 به‌ترتیب متناسب با ارتفاع هر قلهٔ مشاهده شده در طیف از چپ به راست است. ضرایب A12, A9, A6, A3 و A15 به‌ترتیب متناسب با پهنای هر قلهٔ مشاهده‌شده در طیف از چپ به راست است. ضرایب A13, A10, A7, A4 و A16 به‌ترتیب متناسب با موقعیت هر قلهٔ مشاهده‌شده در طیف از چپ به راست است. عمل مینیمم کردن $\chi 2$ درنهایت بعد از یک زمان دلخواه با معرفی ۱۶ ضریب جدید پایان می‌پذیرد. مینیمم مقدار $\chi 2$ بستگی به زمان عمل برازش دارد.

MCA-Cassy داده‌ها از انرژی400KeV شروع و به انرژی 1150KeV ختم می‌شوند. فاصلهٔ انرژی هر شمارش 1.75KeV است.

یافته‌ها

برنامه در دو مرحله و با ۱۶ ضریب معرفی‌شده انجام شده است. ابتدا در مرحلهٔ اول با توجه به ارتفاع، پهنا و موقعیت هر قله در طیف و مقدار N در کمترین مقدار E، ۱۶ ضریب با پارامتر توصیف‌کنندهٔ $\chi 2$=1107.6 معرفی می‌شود. سپس برنامه به‌مدت ۴ روز اجرا می‌شود و ۱۶ ضریب با پارامتر توصیف‌کنندهٔ $\chi 2$=57.8 به‌دست می‌آید. در مرحلهٔ دوم اجرای مجدد برنامه با تغییر ضرایب خروجی مرحلهٔ قبل و معرفی ۱۶ ضریب جدید با پارامتر توصیف‌کنندهٔ $\chi 2$ = 56.9 شروع و بعد از ۳ روز ۱۶ ضریب نهایی با پارامتر توصیف‌کنندهٔ $\chi 2$ = 44.16 استخراج می‌شود (جدول۲).

جدول۲- ضرایب ورودی و خروجی در مرحلهٔ اول و دوم اجرای برنامه

ضرایب ورودی اولیه در مرحلهٔ اول			
A1= 200	A2= 76100	A3= 1.585E-03	A4= 508.1
A5=11000	A6= 9.4E-04	A7= 1046.3	A8= 5900
A9= 5.8E-05	A10= 391	A11= 3500	A12= 7. E-6
A13= 668	A14= 4100	A15=2 E-04	A16= 849
ضرایب خروجی در پایان مرحلهٔ اول			
204.3422	76100	1.641067E-03	508.8506
11014.54	1.041705E-03	1047.591	5900
6.395188E-05	392.2823	3502.942	8.074961E-05
669.4537	4100	1.750570E-04	850.4832
ضرایب ورودی اولیه در مرحلهٔ دوم			
A1= 190	A2=5450	A3= 1.25E-04	A4= 441
A5= 75100	A6= 1.65E-03	A7=508	A8= 3450
A9= 1. E-04	A10= 654.	A11=4000	A12= 1.2E-04
A13= 838	A14= 11000	A15=1. E-03	A16= 1047.3
ضرایب خروجی در پایان مرحلهٔ دوم			
196.2064	5461.770000	1.807270E-04	449.3282
75100.	1.676834E-03	509.2428	3450.807
8.309909E-05	655.356	4002.813	1.431487E-04
839.401	11000	1.048067E-03	1048.023

چند نمونه از ضرایب خروجی برنامهٔ Grid search در زمان‌های مختلف اجرای برنامه در جدول ۳ نشان داده شده است. ضرایب سعی ۱ در اولین مرحلهٔ اجرا توسط برنامهٔ Grid search معرفی می‌شوند. ضرایب سعی 123و121,119,117,115,9,7,5,3 از مراحل مختلف اجرای برنامه Grid search ۴ انتخاب شده‌اند. ضرایب خروجی نهایی بعد از ضرایب سعی ۱۲۳در جدول ۳ آورده شده است.

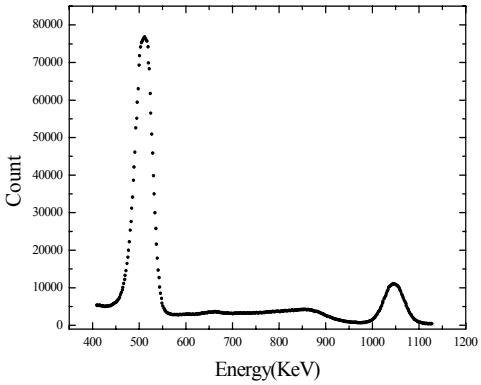
درنتیجه معادلهٔ (۲) با کمترین خطا توصیف‌کنندهٔ طیف انرژی ^{22}Na خواهد بود.

(2)

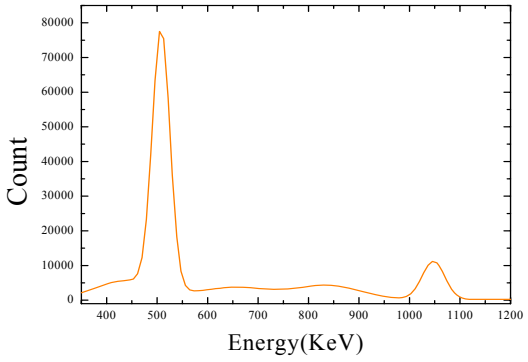
N=199.0477 +76100EXP (0.00167 (E-508.7539) 2)
+ 75100EXP (0.00168 (E-509.2428) 2)
+ 3450.8070 EXP (0.0000831(E-655.356) 2)
+ 4002.813EXP (0.0001431(E-839.401) 2)
+ 11000EXP (0.00105 (E-1048.0230) 2)

در شکل‌های ۲، ۳ و ۴ نمودارهای طیف ^{22}Na همراه با نمودار برازش‌شده با پارامتر توصیف‌کنندهٔ $\chi 2$= 44.16 با هم مقایسه شده است.

نمودار تغییرات زمانی شکل ۵ نشان می‌دهد که در طول زمان اجرای برنامهٔ grid search همواره $\chi 2$ در حال کاهش است.



شکل۲- نمودار طیف انرژی ^{22}Na بر اساس داده‌های دستگاه MCA- Cassy



شکل۳- نمودار برازش شدهٔ طیف انرژی ^{22}Na بر اساس برنامهٔ Grid search معرفی شده

[Downloaded from icml.ir on 2024-04-19]

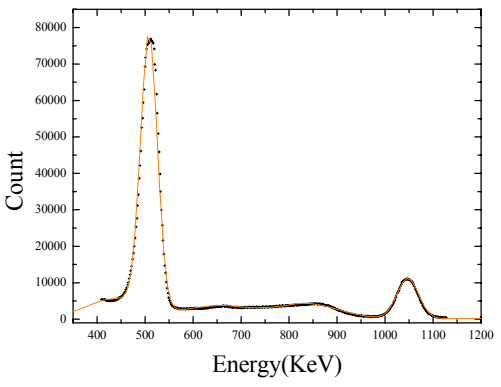
جدول ۱- طیف انرژی ^{22}Na استخراج شده با استفاده از دستگاه MCA-Cassy.
داده‌ها از انرژی 400KeV شروع و به انرژی 1150KeV ختم می‌شوند. فاصلهٔ انرژی هر شمارش 1.75KeV است.

400 KeV								
۵۲۰۷	۵۱۰۸	۵۱۸۴	۵۲۸۳	۵۳۸۳	۵۲۸۵	۵۳۸۸	۵۲۸۵	۵۳۸۹
۵۱۹۷	۵۲۴۷	۵۱۴۵	۵۰۷۲	۵۱۵۲	۵۱۶۱	۵۰۶۱	۵۰۱۸	۵۱۱۱
۶۶۲۴	۶۲۷۶	۶۱۰۸	۵۹۸۱	۵۸۵۵	۵۷۰۹	۵۵۸۱	۵۴۵۹	۵۳۱۹
۱۲۲۰۵	۱۱۱۱۶	۱۰۰۵۴	۹۴۴۴	۸۷۴۰	۸۱۴۵	۷۴۶۷	۷۱۷۰	۶۸۱۷
۳۱۱۶۰	۲۷۶۳۷	۲۵۳۳۱	۲۲۲۸۳	۲۰۰۰۷	۱۸۱۱۵	۱۶۴۶۹	۱۴۵۳۹	۱۳۲۷۶
۶۹۲۹۵	۶۳۰۰۷	۵۹۴۱۳	۵۵۱۴۲	۵۲۵۸۵	۴۶۱۵۲	۴۲۱۴۹	۳۸۶۳۷	۳۴۱۶۷
۷۶۰۷۱	۷۶۴۶۴	۷۶۸۵۵	۷۶۴۷۰	۷۶۰۷۹	۷۵۶۸۹	۷۵۲۸۶	۷۴۱۳۸	۷۱۸۱۸
۳۹۸۲۸	۴۵۸۹۷	۵۰۹۳۰	۵۶۵۱۵	۶۱۷۴۴	۶۸۳۲۳	۶۹۹۱۹	۷۴۱۸۶	۷۵۶۸۶
۸۵۱۸	۱۰۱۸۱	۱۲۶۸۷	۱۴۶۹۳	۱۷۸۸۳	۲۱۶۲۴	۲۵۷۷۳	۲۹۹۸۴	۳۴۹۸۳
۳۲۵۰	۳۳۵۶	۳۵۸۹	۳۸۷۷	۴۱۵۳	۴۵۱۷	۵۱۵۴	۵۸۸۷	۷۱۳۵
۲۸۸۸	۲۸۱۴	۲۸۹۵	۲۸۲۰	۲۸۸۸	۲۹۶۵	۳۰۳۹	۳۰۹۰	۳۱۹۶
۲۸۸۲	۲۸۱۲	۲۸۸۶	۲۹۲۵	۲۸۴۶	۲۷۹۸	۲۸۷۴	۲۸۹۸	۲۸۱۷
۳۰۱۴	۲۹۴۱	۲۹۶۳	۲۹۷۰	۳۰۰۲	۲۹۲۹	۲۸۶۵	۲۹۲۴	۲۹۴۸
۳۰۶۰	۳۰۱۱	۲۹۳۴	۲۸۸۸	۲۹۵۰	۲۹۹۸	۲۹۲۱	۲۸۶۵	۲۹۴۱
۳۲۱۸	۳۲۷۹	۳۳۰۰	۳۲۱۱	۳۱۳۱	۳۰۵۱	۳۱۱۳	۳۰۴۶	۲۹۹۵
۳۴۶۷	۳۴۵۱	۳۵۳۱	۳۵۰۹	۳۴۱۷	۳۳۴۱	۳۳۸۴	۳۳۸۴	۳۳۰۰
۳۶۰۹	۳۵۲۳	۳۵۲۰	۳۶۰۷	۳۶۸۲	۳۶۰۰	۳۵۷۵	۳۴۹۱	۳۵۵۵
۳۲۱۶	۳۳۰۱	۳۲۲۸	۳۲۸۸	۳۳۷۵	۳۴۵۵	۳۳۷۷	۳۴۵۱	۳۵۳۳
۳۰۹۸	۳۱۷۴	۳۲۳۹	۳۱۶۵	۳۱۷۴	۳۲۵۳	۳۳۱۶	۳۲۲۷	۳۳۰۲
۳۲۵۸	۳۲۳۶	۳۲۵۱	۳۲۸۱	۳۲۱۰	۳۲۶۸	۳۲۳۹	۳۲۳۷	۳۱۵۶
۳۳۲۱	۳۲۴۹	۳۱۹۷	۳۲۷۰	۳۳۴۰	۳۲۵۸	۳۱۸۹	۳۲۶۵	۳۳۴۴
۳۳۴۲	۳۴۰۵	۳۳۳۷	۳۲۳۴	۳۲۳۹	۳۳۱۶	۳۲۳۱	۳۲۳۰	۳۳۱۲
۳۳۴۷	۳۴۲۵	۳۴۱۱	۳۳۳۹	۳۲۸۹	۳۳۶۵	۳۴۲۶	۳۳۴۶	۳۲۶۷
۳۵۲۶	۳۵۱۱	۳۵۹۳	۳۵۷۴	۳۴۹۴	۳۴۶۴	۳۳۸۱	۳۴۵۶	۳۳۷۴
۳۶۸۵	۳۶۷۷	۳۵۹۰	۳۶۷۵	۳۷۱۷	۳۶۲۸	۳۵۵۵	۳۶۴۰	۳۶۱۱
۳۷۵۴	۳۸۳۳	۳۸۳۶	۳۷۴۲	۳۶۵۱	۳۷۲۹	۳۸۰۲	۳۷۱۸	۳۷۷۱
۳۸۸۳	۳۹۶۲	۳۹۷۸	۳۸۹۶	۳۸۹۵	۳۸۵۹	۳۹۴۲	۳۹۳۱	۳۸۴۱
۴۰۷۴	۴۰۲۲	۴۰۹۱	۴۱۰۰	۴۰۱۵	۳۹۵۴	۴۰۴۴	۴۰۶۸	۳۹۸۳
۴۲۹۹	۴۲۰۵	۴۲۶۴	۴۱۷۱	۴۲۴۵	۴۱۶۴	۴۱۲۲	۴۲۱۱	۴۱۵۵
۴۰۴۷	۴۱۲۷	۴۰۳۴	۴۱۱۵	۴۱۹۴	۴۲۴۵	۴۱۵۷	۴۱۴۹	۴۲۳۵
۳۴۷۷	۳۵۶۹	۳۶۵۸	۳۶۹۸	۳۷۷۲	۳۶۸۸	۳۷۸۴	۳۸۷۳	۳۹۵۶
۲۵۴۶	۲۶۶۲	۲۷۴۸	۲۸۹۲	۳۰۰۴	۳۰۸۱	۳۱۷۰	۳۳۰۴	۳۳۹۰
۱۸۲۸	۱۸۸۵	۲۰۰۰	۲۰۸۸	۲۱۶۳	۲۲۶۲	۲۳۷۶	۲۳۶۰	۲۴۴۹
۱۲۹۸	۱۳۴۳	۱۳۹۹	۱۴۵۳	۱۵۱۱	۱۵۶۵	۱۶۲۶	۱۶۹۳	۱۷۶۰
۹۳۳	۹۸۳	۱۰۲۹	۱۰۳۶	۱۰۸۴	۱۱۳۱	۱۱۸۱	۱۲۰۵	۱۲۵۰
۷۹۴	۸۳۱	۷۹۲	۸۳۳	۷۹۸	۸۳۴	۸۷۷	۹۱۶	۸۸۹
۷۳۳	۶۹۴	۶۹۵	۷۲۴	۷۲۵	۶۹۸	۷۲۹	۷۶۴	۸۰۰
۱۱۲۴	۱۰۵۰	۹۵۹	۹۱۲	۸۵۱	۸۲۹	۷۸۱	۷۴۵	۷۶۷
۲۸۶۸	۲۵۹۸	۲۲۲۳	۲۰۲۹	۱۸۱۸	۱۶۴۲	۱۴۰۷	۱۳۱۶	۱۲۲۲
۷۰۳۵	۶۳۶۱	۵۸۷۳	۵۲۳۹	۴۷۱۸	۴۳۱۶	۳۸۷۷	۳۶۲۱	۳۱۴۲
۱۰۷۲۰	۱۰۵۱۹	۱۰۳۱۸	۱۰۱۰۶	۹۵۰۶	۹۰۷۱	۸۴۸۵	۷۹۳۴	۷۴۹۵
۱۰۲۹۲	۱۰۵۰۵	۱۰۶۵۱	۱۰۷۹۷	۱۰۹۴۸	۱۱۱۰۱	۱۰۹۵۵	۱۱۰۱۵	۱۰۸۶۸
۵۷۹۲	۶۲۹۳	۶۸۱۳	۷۴۰۴	۷۹۲۹	۸۳۲۲	۹۰۲۶	۹۴۹۱	۹۹۱۷
۲۰۶۹	۲۳۶۰	۲۷۲۶	۲۹۴۳	۳۳۸۴	۳۷۷۰	۴۳۰۱	۴۶۴۱	۵۱۸۳
۸۰۷	۸۷۳	۹۵۰	۱۰۰۰	۱۱۵۱	۱۲۹۷	۱۴۵۶	۱۵۹۰	۱۸۳۰
۴۶۸	۴۹۵	۴۶۹	۵۱۰	۵۴۴	۵۷۵	۶۱۵	۶۵۲	۷۵۶
۴۱۲	۴۱۲	۴۱۲	۴۱۲	۴۴۳	۴۱۶	۴۳۹	۴۱۵	۴۳۳
1150 KeV								

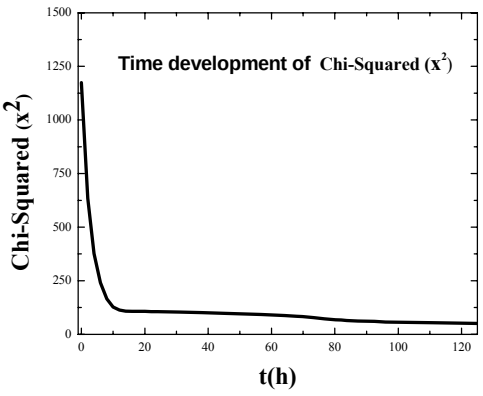
[Downloaded from icml.ir on 2024-04-19]

جدول۳- چند مورد از ضرایب خروجی برنامهٔ Grid search

ضرایب	ضرایب ورودی	سعی‌های: ۱	۳	۵	۷	۹
A_1	200	199.6841	199.3683	199.2104	198.9901	199.0477
A_2	76100	76100	76100	76100	76100	76100
A_3	1.59E-03	1.62E-03	1.66E-03	1.68E-03	1.67E-03	1.67E-03
A_4	508.1	508.8526	508.9352	508.7525	508.7479	508.7539
A_5	11000	11000.7	11001.4	11001.74	11002.4	11002.71
A_6	9.40E-04	1.34E-03	1.13E-03	1.09E-03	1.04E-03	1.03E-03
A_7	1046.3	1046.366	1046.432	1046.465	1046.53	1046.563
A_8	5900	5900	5900	5900	5900	5900
A_9	5.80E-05	7.65E-05	1.04E-04	1.17E-04	1.05E-04	1.01E-04
A_{10}	391	391.0604	391.1202	391.15	391.2058	391.2342
A_{11}	3500	3500.132	3500.264	3500.33	3500.457	3500.522
A_{12}	7.00E-06	1.33E-05	1.95E-05	2.26E-05	2.89E-05	3.18E-05
A_{13}	668	668.0659	668.1318	668.1648	668.2307	668.2637
A_{14}	4100	4100	4100	4100	4100	4100
A_{15}	2.00E-04	2.60E-04	3.19E-04	3.49E-04	4.06E-04	4.06E-04
A_{16}	849	849.0659	849.1318	849.1648	849.2307	849.2637
χ^2	1107.16	355.5	155.8	120.4	101.7	100.9
ضرایب	ضرایب خروجی	سعی‌های: ۱۱۵	۱۱۷	۱۱۹	۱۲۱	۱۲۳
A_1	194.7526	195.1122	195.3048	195.6646	195.8452	196.2064
A_2	5459.193	5459.84	5460.165	5460.795	5461.111	5461.77
A_3	1.77E-04	1.78E-04	1.79E-04	1.80E-04	1.80E-04	1.81E-04
A_4	448.7414	448.91410	449.00960	449.1922	449.2750	449.32800
A_5	75100	75100	75100	75100	75100	75100
A_6	1.67E-03	1.67E-03	1.67E-03	1.68E-03	1.67E-03	1.68E-03
A_7	508.9941	509.0572	509.088	509.1506	509.1815	509.2428
A_8	3450.639	3450.6820	3450.7020	3450.7440	3450.764	3450.8070
A_9	8.19E-05	8.19E-05	8.26E-05	8.29E-05	8.22E-05	8.31E-05
A_{10}	655.0833	655.1518	655.1848	655.2524	655.2868	655.356
A_{11}	4002.25	4002.391	4002.461	4002.602	4002.672	4002.813
A_{12}	1.4E-04	1.44E-04	1.44E-04	1.44E-04	1.43E-04	1.431E-04
A_{13}	839.1202	839.1906	839.2257	839.296	839.3312	839.401
A_{14}	11000	11000	11000	11000	11000	11000
A_{15}	1.05E-03	1.05E-03	1.05E-03	1.05E-03	1.05E-03	1.05E-03
A_{16}	1047.940	1047.9590	1047.9740	1047.997	1048.0080	1048.0230
χ^2	44.6	44.32	44.36	44.25	44.23	44.16



شکل ۴- نمودار طیف ^{22}Na همراه با نمودار برازش‌شده با پارامتر توصیف‌کنندهٔ Chi-Squared (χ2)= 44.16



شکل ۵- تغییرات زمانی Chi-Squared (χ2)

[Downloaded from icml.ir on 2024-04-19]

بحث و نتیجه گیری

هدف از این پژوهش مطالعهٔ دقیق طیف‌های مختلف جذبی و گسیلی در حالت‌های مختلف اتمی و هسته‌ای است که با استخراج معادله‌ای که با کمترین خطا بر داده‌های تجربی برازش‌شده باشد، امکان‌پذیر است. نرم‌افزارهایی که برای برازش، کاربرد گسترده‌ای دارند کاملاً قادر به این کار نیستند. به‌نظر می‌رسد از بین تکنیک‌هایی که براساس روش کمترین مربعات برای برازش معادله بر داده‌های تجربی وجود دارد، Grid search تکنیک مناسبی باشد. با استفاده از یک کد خاص که بر اساس تکنیک Grid search نوشته شده و سعی شده است تا بهترین معادلهٔ توصیف‌کنندهٔ طیف انرژی عناصر استخراج شود. این کد برای طیف ^{22}Na به‌کار گرفته شده است و ضرایب ۱۶ گانهٔ معادلهٔ برازش‌شده با کمترین مقدار ممکن Chi-Squared ($\chi 2$) به‌دست آمده است. ضرایب به‌دست‌آمده به دقت اندازه‌گیری و نحوهٔ کالیبراسیون دستگاه بستگی دارد. یکی از معایب روش Grid search و روش‌های ذکر شده در این مقاله زیادبودن زمان اجرای آن‌ها است. در آینده می‌توان با موازی کردن چند کامپیوتر امکان کاهش زمان اجرا برای کد Grid search را بررسی کرد. عیب دیگر روش Grid search عدم امکان بررسی وابستگی ضرایب به یکدیگر است چون احتمال اینکه حساسیت ضریب خاصی که در طول اجرای برنامه در حال تغییر است به مقدار ضرایب دیگر نیز وابسته باشد، وجود دارد. در نتیجه با معرفی اعداد دیگری برای ضرایب اولیهٔ ورودی، ضرایب خروجی یکسانی به‌دست نمی‌آید. بنابراین بررسی وابستگی ضرایب به یکدیگر پیشنهاد می‌شود. این کد در مطالعهٔ طیف‌هایی که از برهمکنش لیزر با سلول‌ها و اجزاء مختلف انسانی به‌دست می‌آید، کاربرد زیادی خواهد داشت.

References

1. Weimin P, Mark R, Michael M, Zhen H, Li N. Receptor Occupancy and Channel-opening Kinetics. Journal of Biological Chemistry 2007; 282: 22731-6.
2. Halabica A, Idrobo JC, Pantelides ST, Magruder RH, Pennycook SJ, Haglund RF. Pulsed infrared laser annealing of gold nanoparticles embedded in a silica matrix. Journal of applied physics 2008; 103: 083545.
3. Hilte F, Geerdes F, Axel W, Wagners, Karl-Heinz L, Peter K, Hartmut L. Levofloxacin Pharmacokinetics and Serum Bactericidal Activities against Five Enterobacterial Species. Department of Medical Physics and Laser Medicine Antimicrobial Agents and Chemotherapy 2000; 44 (12): 3478-80.
4. Francesco C, Pier GG, Luca Vigo, Rosario B. Photorefractive keratectomy for hyperopia: Long-term nonlinear and vector analysis of refractive outcome1. Journal of Ophthalmology1999; 106 (10): 1976-83.
5. Bird DK, Eliceiri KW, Fan C, White JG. Simultaneous Two-Photon Spectral and Lifetime Fluorescence Microscopy. Appl Opt 2004; 43: 5173-82.
6. Derenzo. TAUfitting- a fitting program to determine fluorescent decay components as sum of exponentials convolved with an impulse response. Lawrence Berkeley 1993; Laboratory Report No. LBL-33050.
7. Derenzo SE, Moses WW, Blankespoor SC. Design of a pulsed X-RAY system for fluorescent lifetime measurements with a timing accuracy of 109 PS. IEEE Trans Nucl Sci 1994; 41: 698-702.
8. Xiaoxia L, Shifu F, Youquan Z. Bio-tissue temperature measuring for laser medicine. ProcSPIE 2006; 6344: 63441.
9. Yanli1 Q, LIU Y, Songning X, Jie H, Zhiyong F, Daiying Z. Detection of subgingival calculus by Gaussian curve fittingting of laser-induced fluorescence emission. Journal of Optoelectronics Laser 2009; 07.
10. Stefan AE, Charlotta E, Claes K, Sune SD. Laser Applications in Medicine and Biology. Progress Report of Atomic Physics, LTH, Lund, Sweden 1997.
11. Pifferi A, Taroni P, Valentini G, Andersson ES. Real time method for fittingting time- resolved reflectance and transmittance measurements with a Monte Carlo model. Appl Opt 1998; 37: 2774-80.
12. Kota I, Ryuzaburo T, Moriaki W. Laser ablation of adipose tissue. Tokai J Exp Clin Med 2006; 31(4): 136-40.
13. Duan X, Yao B, Zhang Y, Song C, Ju Y, Wang Y. Diode-pumped high-efficiency Tm:YLF laser at room temperature. Chin Opt Lett 2008; 6: 591-3.
14. Chunyu Z, Ling Z, Zhiyi W, Chi Z, Yongbing L, Zhiguo Z. Diode- pumped contineous- wave Nd: LuVO4 laser operating at 916nm. Optics letters 2006; 31(10).
15. Bevington PR, Keith RD. Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences. 3rd edition McGraw- Hill New York 2003.

[Downloaded from icml.ir on 2024-04-19]

16. De Mul FFM, Greve J. Rampac a Program for Analysis of Complicated Raman Spectra. Journal of Raman spectroscopy 1993; 24: 245-50.

17. de Mul FFM, Ten Have HBG, Otto C, Greve J. The MCGA Multiple Cubic Gradient Approximation Method for the Analysis of Raman Spectra. Journal of raman spectroscopy 1990; 21: 725736.

18. Widjaja E, Zheng W, Huang Z. Classification of colonic tissues using near-infrared Raman spectroscopy and support vector machines. International journal of oncology 2008; 32: 653-62.

19. Inaba S, Sato J, Aono M, Numata T, Nishino T. Combined Effects of Nitrous Oxide and Propofol on the Dynamic Cerebrovascular Response to Step Changes in End-tidal Pco2 in Humans. Anesthesiology Clinical Investigation 2003; 98(3): 633-8.

20. Jinbu W, Xiaobing Z, Ping Y, InJa L, Jinwon J.X, Marzena D, Soenke S, Charles D.S, Jun Q, Angela M.G, YunXing W. Determination of multi-component protein structures in solution using global orientation and shape restraints J Am Chem Soc 2009; 131(30): 10507-15.

21. Ivonne L, Joost B, Freek A, Cees G. Sensitized Enantioselective Laser-Induced Phosphorescence Detection in Chiral Capillary Electrophoresis. Anal Chem 2010; 82 (22): 9410-17.

22. Joachim W. Dynamics of DNA-repair factors and chromosomes studied by laser-UVA icroirradiation and laser- photobleaching. Fakultät für Biologie 2003; 19:14588.

23. Physics.ut.ac.ir/~shafiei/pub/gnuplot.doc.

24. Michalet X, Colyer RA, Antelman J, Siegmund OH, Tremsin A, Vallerga JV, Weiss S. Single-quantum dot imaging with a photon counting camera. Curr Pharm Biotechnol 2009; 10(5): 543-58.

25. www.phys.nthu.edu.tw/~hf/en/11_Gamma%20ray %20detection.pdf.

26. http://www.ld-didactic.de/software/524202.pdf.

[Downloaded from icml.ir on 2024-04-19]