

بررسی طیف عنصر ^{22}Na به روش Grid search تعمیم یافته

خلاصه

مقدمه: با نوشتن یک کد خاص براساس تکنیک Grid search طیف انرژی عناصر بررسی شده است. این روش را می توان برای بررسی طیف های اتمی، مولکولی و هسته ای، پالس های لیزر و مطالعه طیف هایی که از برهمکنش لیزر با سلول ها و اجزاء مختلف انسانی به دست می آید، به کار برد. طیف میکرورامان لنزهای چشمی برازش شده توسط De.Mul و طیف زمانی برازش شده با نرم افزار gnuplot یک تک مولکول که با لیزری با طول موج ۵۸۵ نانومتر برانگیخته شده است، کاملاً بر داده های اندازه گیری شده منطبق نیستند. در یک حالت خاص این کد برای طیف انرژی ^{22}Na به کار برده شده است. روش بررسی: برای برازش یک معادله به داده های اندازه گیری شده ابتدا شکل نمودار داده ها در هر نرم افزار ممکن مشاهده و سپس معادله مناسبی حدس زده می شود و ضرایب آن به صورت دستی تغییر می کند تا نمودار معادله برازش شده با داده ها مطابقت داشته باشد. بعد از این مرحله با استفاده از یک کد نوشته شده بر اساس تکنیک Grid search معرفی شده اندازه گیری داده های ناشی از معادله معرفی می شود و داده های اندازه گیری شده با توجه به چگونگی تغییر χ^2 با یکدیگر مقایسه می شوند. در صورت اختلاف زیاد بین آن ها با معرفی پله هایی که میزان تغییرات ضرایب معادله برازش شده را مشخص می کند، سعی می شود χ^2 کاهش یابد. این عمل تاجایی تکرار می شود که χ^2 به کمترین مقدار ممکن برسد. یافته ها: با این روش می توان طیف انرژی هر ماده ای را فرمول بندی کرد. به طور مثال معادله توصیف کننده طیف انرژی ^{22}Na که با کمترین خطا بر داده های اندازه گیری شده برازش شده است، به صورت زیر خواهد بود:

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

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 معادله توصیف کننده طیف انرژی عناصر معرفی شود.

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

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 بین المللی علوم و تکنولوژی پیشرفته و علوم

محیطی، کرمان

نویسنده مسئول: محمدرضا رضایی، تلفن: ۶۱۱۳۵۵۸

پست الکترونیک: mohamadrez45@gmail.com

مقدمه

تکنیک های زیادی برای برازش کردن یک نمودار به داده های اندازه گیری شده وجود دارد. استفاده از معادله برازش شده در فیزیک پزشکی، لیزر، هسته ای، اتمی و ... کاربرد زیادی دارد [۱۴-۱]. قریب به اتفاق این روش ها در کتاب معروف Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences آورده شده است [۱۵]. چهار روش برای برازش کردن وجود دارد [۱۶]:

۱- Grid search

۲- gradient search

۳- analytical matrix inversion

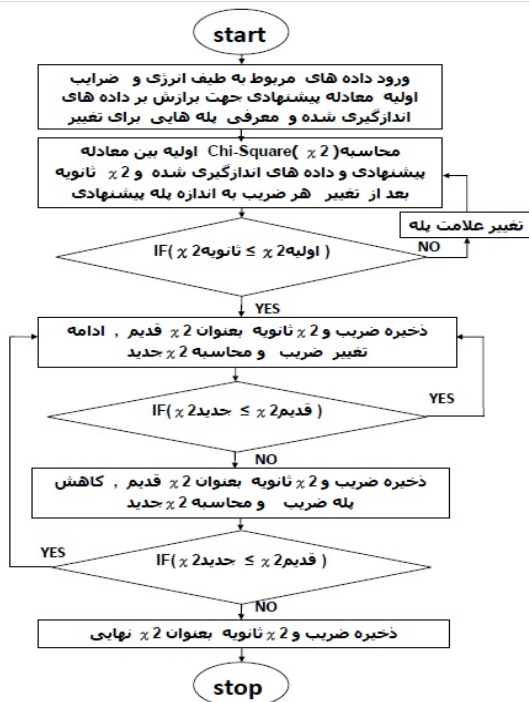
۴- Marquardt routines

این الگوهی بر اساس مینیم کردن پارامتر χ^2 (Chi-Squared) استوارند. در روش Grid search ابتدا پارامترهای اولیه ای معرفی می شوند. سپس هر پارامتر جداگانه با پله هایی که معرفی می شود طوری تغییر می کند که χ^2 کاهش یابد. در روش gradient search

تمام پارامترها با پله های اولیه ای معرفی شده همزمان تغییر می کنند و در مراحل بعدی با توجه به نحوه تغییر χ^2 مقدار پله ها تغییر می کند تا در نهایت χ^2 کاهش یابد. ولی روش Grid search قابل اطمینان تر و سریع تر است [۱۶]. در روش Analytical برازش ماتریس $n \times n$ تغییرات χ^2 نسبت به پله ها تشکیل می شود و با استفاده از عملیات ماتریسی چگونگی تغییر χ^2 بررسی می شود. در روش Marquardt برازش عناصر ماتریس روش Analytical برازش با یک ضریب ثابت افزایش می یابند و تغییرات χ^2 بررسی می شود. De.Mul در سال ۱۹۹۰ کدی را بر اساس تکنیک Grid search و gradient search معرفی کرد و با استفاده از آن طیف میکرورامان لنزهای چشمی را برازش کرد [۱۷].

طیف برازش شده کاملاً منطبق بر طیف تجربی نیست. De.Mul سه سال بعد نیز برنامه ای را بر اساس چهار روش معرفی شده ارائه کرد.

نوشته شده بر اساس تکنیک‌های معرفی شده داده‌های ناشی از معادله معرفی می‌شود و داده‌های اندازه‌گیری شده با توجه به چگونگی تغییر χ^2 با هم مقایسه می‌شوند. با معرفی پله‌هایی که میزان تغییرات ضرایب معادله برازش شده را مشخص می‌کند، سعی می‌شود χ^2 کاهش یابد. این عمل تاجایی تکرار می‌شود که χ^2 به کمترین مقدار ممکن برسد. فلوجارت کد Gridsearch تعمیم یافته در شکل ۱ چگونگی عملکرد برنامه را در برون‌یابی ضرایب نشان می‌دهد.



شکل ۱- فلوجارت برنامه Gridsearch تعمیم یافته

روش آماری تحلیل داده‌ها بر اساس روش کمترین مربعات استوار است [۱۵]. برای انجام یک عمل برازش ابتدا برنامه Grid search مناسبی برای تعیین ضرایب معادله توصیف کننده طیف عناصر نوشته شده است سپس داده‌های مربوط به طیف ^{22}Na با استفاده از دستگاه تحلیل گر چندکاناله (MCA) و نرم افزار Cassy کامپیوتری استخراج شده است (جدول ۱). ۵ قله 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. در نتیجه برای توصیف این طیف به ۱۶ ضریب $(16 = 5 \times 3 + 1)$ نیاز خواهیم داشت. بنابراین معادله توصیف کننده طیف انرژی ^{22}Na به صورت معادله (۱) خواهد بود:

(1)

$$N = A_1 + A_2 \exp(A_3(E - A_4) / 2) + A_5 \exp(A_6(E - A_7) / 2) + A_8 \exp(A_9(E - A_{10}) / 2) + A_{11} \exp(A_{12}(E - A_{13}) / 2) + A_{14} \exp(A_{15}(E - A_{16}) / 2)$$

در این مقاله هیچ نمودار برازش شده‌ای معرفی نشده است تا نحوه 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 نوشته شده، برازش شده است [۱۸]. در این تحقیق هیچ نمودار تجربی برای توصیف و درستی نمودار برازش شده، ارائه نشده است.

روش Grid search یکی از روش‌های مناسب برازش کردن تابع بر داده‌ها است [۱۹ و ۲۰]. نرم افزارهای زیادی مثل Matlab IGORPRO, Gnuplot, Origin, Labplot, Phytron و ... 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 نرم افزار تابع بیشتر بر داده‌ها منطبق می‌شود ولی مقدار χ^2 افزایش می‌یابد [۲۳ و ۲۴]. با ارائه یک برنامه جدید و متفاوت که می‌تواند به عنوان الگوی جدیدی مورد استفاده محققان قرار گیرد، سعی شده است تا روش مناسبی براساس تکنیک Grid search برای استخراج معادله توصیف کننده طیف انرژی عناصر معرفی شود. روش Grid search دارای مزایای زیر است:

- ۱- امکان انطباق بیشتر معادله بر داده‌ها با کمترین مقدار χ^2 وجود دارد.
- ۲- شناسایی ضرایب حساس امکان پذیر است (ضرایبی که تغییرات خیلی کم آن‌ها باعث تغییرات زیادی در χ^2 می‌شود).
- ۳- قابل اطمینان و سریع تر از روش‌های دیگر است.
- ۴- برنامه نویسی آن ساده تر 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 به علت اینکه هر ضریب جداگانه تغییر می‌کند، امکان اجرای همزمان آن با کامپیوترهای دیگر وجود دارد. از نرم افزارهای Origin Pro8 و PowerStation 4.0 جهت بررسی نتایج استفاده شده است. داده‌های طیف ^{22}Na در این تحقیق از دستگاه Cassy-MCA استخراج شده است [۲۵ و ۲۶].

روش بررسی

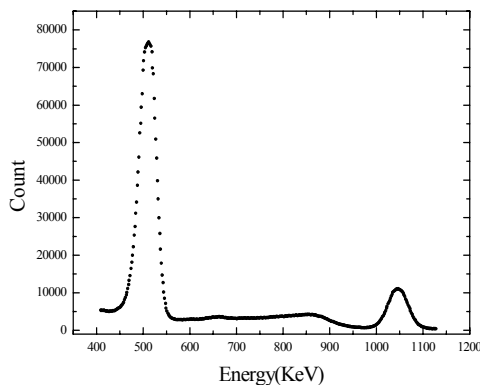
برای برازش یک معادله به داده‌های اندازه‌گیری شده ابتدا با استفاده از نرم افزار origin pro8 یا نرم افزارهای مناسب دیگر شکل نمودار داده‌ها مشاهده می‌شود. در صورت عدم تبعیت داده‌ها از معادلات برازش معرفی شده در این نرم افزارها معادله مناسبی حدس زده می‌شود و ضرایب آن به صورت دستی تغییر می‌کند تا نمودار معادله برازش شده به داده‌ها مطابقت داشته باشد. بعد از این مرحله با استفاده از یک کد

۱ در اولین مرحله اجرا توسط برنامه Grid search معرفی می‌شوند. ضرایب سعی 3, 5, 7, 9, 115, 117, 119, 121 و 123 از مراحل مختلف اجرای برنامه 4 Grid search انتخاب شده‌اند. ضرایب خروجی نهایی بعد از ضرایب سعی 123 در جدول 3 آورده شده است. در نتیجه معادله (2) با کمترین خطا توصیف‌کننده طیف انرژی ^{22}Na خواهد بود.

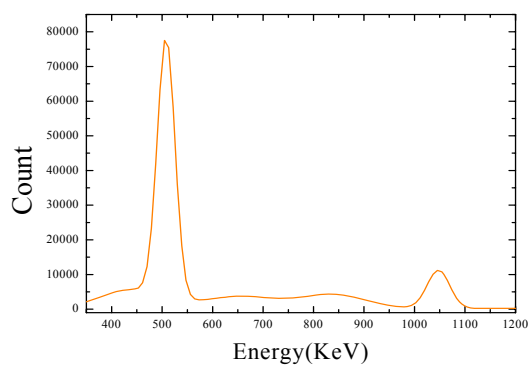
$$N=199.0477 + 76100\text{EXP}(0.00167(E-508.7539)2) + 75100\text{EXP}(0.00168(E-509.2428)2) + 3450.8070\text{EXP}(0.0000831(E-655.356)2) + 4002.813\text{EXP}(0.0001431(E-839.401)2) + 11000\text{EXP}(0.00105(E-1048.0230)2)$$

در شکل‌های 2، 3 و 4 نمودارهای طیف ^{22}Na همراه با نمودار برازش شده با پارامتر توصیف‌کننده $\chi^2=44.16$ با هم مقایسه شده است.

نمودار تغییرات زمانی شکل 5 نشان می‌دهد که در طول زمان اجرای برنامه grid search همواره χ^2 در حال کاهش است.



شکل ۲- نمودار طیف انرژی ^{22}Na بر اساس داده‌های دستگاه MCA- Cassy



شکل ۳- نمودار برازش شده طیف انرژی ^{22}Na بر اساس برنامه Grid search معرفی شده

ورودی‌های این برنامه را ابتدا با 16 ضریب حدسی آغاز می‌کنیم. ضریب A1 تقریباً مقدار N را در کمترین نشان می‌دهد. ضرایب A11, A2, A5, A8 و A14 به ترتیب متناسب با ارتفاع هر قله مشاهده شده در طیف از چپ به راست است. ضرایب A3, A6, A9, A12 و A15 به ترتیب متناسب با پهناهای هر قله مشاهده شده در طیف از چپ به راست است. ضرایب A4, A7, A10, A13 و A16 به ترتیب متناسب با موقعیت هر قله مشاهده شده در طیف از چپ به راست است. عمل مینیمم کردن χ^2 در نهایت بعد از یک زمان دلخواه با معرفی 16 ضریب جدید پایان می‌پذیرد. مینیمم مقدار χ^2 بستگی به زمان عمل برازش دارد.

MCA-Cassy داده‌ها از انرژی 400KeV شروع و به انرژی 1150KeV ختم می‌شوند. فاصله انرژی هر شمارش 1.75KeV است.

یافته‌ها

برنامه در دو مرحله و با 16 ضریب معرفی شده انجام شده است. ابتدا در مرحله اول با توجه به ارتفاع، پهنا و موقعیت هر قله در طیف و مقدار N در کمترین مقدار E، 16 ضریب با پارامتر توصیف‌کننده $\chi^2=1107.6$ معرفی می‌شود. سپس برنامه به مدت 4 روز اجرا می‌شود و 16 ضریب با پارامتر توصیف‌کننده $\chi^2=57.8$ به دست می‌آید. در مرحله دوم اجرای مجدد برنامه با تغییر ضرایب خروجی مرحله قبل و معرفی 16 ضریب جدید با پارامتر توصیف‌کننده $\chi^2=56.9$ شروع و بعد از 3 روز 16 ضریب نهایی با پارامتر توصیف‌کننده $\chi^2=44.16$ استخراج می‌شود (جدول 2).

جدول ۲- ضرایب ورودی و خروجی در مرحله اول و دوم اجرای برنامه

ضرایب ورودی اولیه در مرحله 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 مرحله 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 مرحله 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 مرحله 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 برنامه Grid search در زمان‌های مختلف اجرای برنامه در جدول 3 نشان داده شده است. ضرایب سعی

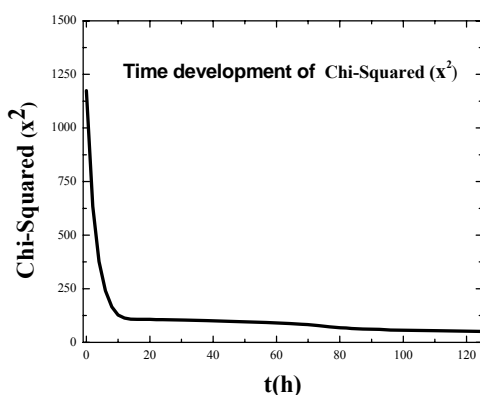
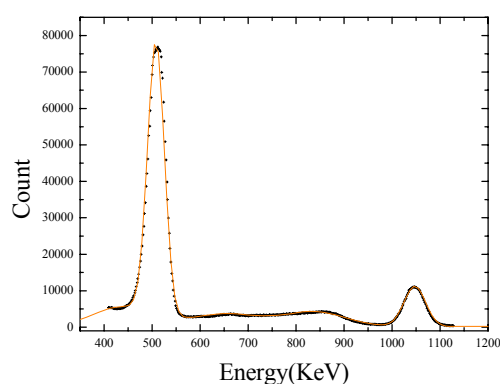
جدول ۱- طیف انرژی ^{22}Na استخراج شده با استفاده از دستگاه MCA-Cassy. داده‌ها از انرژی 400KeV شروع و به انرژی 1150KeV ختم می‌شوند. فاصله انرژی هر شمارش 1.75KeV است.

400 KeV								
۵۲۰۷	۵۱۰۸	۵۱۸۴	۵۲۸۳	۵۳۸۳	۵۲۸۵	۵۳۸۸	۵۲۸۵	۵۳۸۹
۵۱۹۷	۵۲۴۷	۵۱۴۵	۵۰۷۲	۵۱۵۲	۵۱۶۱	۵۰۶۱	۵۰۱۸	۵۱۱۱
۶۶۳۴	۶۲۷۶	۶۱۰۸	۵۹۸۱	۵۸۵۵	۵۷۰۹	۵۵۸۱	۵۴۵۹	۵۳۱۹
۱۳۲۰۵	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	۶۸۳۳۳	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	۳۲۲۶	۳۲۵۱	۳۲۸۱	۳۲۱۰	۳۲۶۸	۳۲۳۹	۳۲۲۷	۳۱۵۶
۳۳۲۱	۳۲۲۹	۳۱۹۷	۳۲۲۰	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	۳۴۶۰	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	۲۴۶۰	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	۴۲۹	۴۱۵	۴۲۳

1150 KeV

جدول ۳- چند مورد از ضرایب خروجی برنامه Grid search

سعی‌های:					ضرایب ورودی	ضرایب
۹	۷	۵	۳	۱		
199.0477	198.9901	199.2104	199.3683	199.6841	200	A ₁
76100	76100	76100	76100	76100	76100	A ₂
1.67E-03	1.67E-03	1.68E-03	1.66E-03	1.62E-03	1.59E-03	A ₃
508.7539	508.7479	508.7525	508.9352	508.8526	508.1	A ₄
11002.71	11002.4	11001.74	11001.4	11000.7	11000	A ₅
1.03E-03	1.04E-03	1.09E-03	1.13E-03	1.34E-03	9.40E-04	A ₆
1046.563	1046.53	1046.465	1046.432	1046.366	1046.3	A ₇
5900	5900	5900	5900	5900	5900	A ₈
1.01E-04	1.05E-04	1.17E-04	1.04E-04	7.65E-05	5.80E-05	A ₉
391.2342	391.2058	391.15	391.1202	391.0604	391	A ₁₀
3500.522	3500.457	3500.33	3500.264	3500.132	3500	A ₁₁
3.18E-05	2.89E-05	2.26E-05	1.95E-05	1.33E-05	7.00E-06	A ₁₂
668.2637	668.2307	668.1648	668.1318	668.0659	668	A ₁₃
4100	4100	4100	4100	4100	4100	A ₁₄
4.06E-04	4.06E-04	3.49E-04	3.19E-04	2.60E-04	2.00E-04	A ₁₅
849.2637	849.2307	849.1648	849.1318	849.0659	849	A ₁₆
100.9	101.7	120.4	155.8	355.5	1107.16	χ^2
سعی‌های:					ضرایب	ضرایب خروجی
۱۲۳	۱۲۱	۱۱۹	۱۱۷	۱۱۵		
196.2064	195.8452	195.6646	195.3048	195.1122	194.7526	A ₁
5461.77	5461.111	5460.795	5460.165	5459.84	5459.193	A ₂
1.81E-04	1.80E-04	1.80E-04	1.79E-04	1.78E-04	1.77E-04	A ₃
449.32800	449.2750	449.1922	449.00960	448.91410	448.7414	A ₄
75100	75100	75100	75100	75100	75100	A ₅
1.68E-03	1.67E-03	1.68E-03	1.67E-03	1.67E-03	1.67E-03	A ₆
509.2428	509.1815	509.1506	509.088	509.0572	508.9941	A ₇
3450.8070	3450.764	3450.7440	3450.7020	3450.6820	3450.639	A ₈
8.31E-05	8.22E-05	8.29E-05	8.26E-05	8.19E-05	8.19E-05	A ₉
655.356	655.2868	655.2524	655.1848	655.1518	655.0833	A ₁₀
4002.813	4002.672	4002.602	4002.461	4002.391	4002.25	A ₁₁
1.431E-04	1.43E-04	1.44E-04	1.44E-04	1.44E-04	1.4E-04	A ₁₂
839.401	839.3312	839.296	839.2257	839.1906	839.1202	A ₁₃
11000	11000	11000	11000	11000	11000	A ₁₄
1.05E-03	1.05E-03	1.05E-03	1.05E-03	1.05E-03	1.05E-03	A ₁₅
1048.0230	1048.0080	1047.997	1047.9740	1047.9590	1047.940	A ₁₆
44.16	44.23	44.25	44.36	44.32	44.6	χ^2

شکل ۵- تغییرات زمانی χ^2 Chi-Squaredشکل ۴- نمودار طیف ^{22}Na همراه با نمودار برازش شده با پارامتر توصیف کننده $\chi^2 = 44.16$

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 اولیه ورودی، ضرایب خروجی یکسانی به دست نمی‌آید. بنابراین بررسی وابستگی ضرایب به یکدیگر پیشنهاد می‌شود. این کد در مطالعه طیف‌هایی که از برهمکنش لیزر با سلول‌ها و اجزاء مختلف انسانی به دست می‌آید، کاربرد زیادی خواهد داشت.

بحث و نتیجه گیری

هدف از این پژوهش مطالعه دقیق طیف‌های مختلف جذبی و گسیلی در حالت‌های مختلف اتمی و هسته‌ای است که با استخراج معادله‌ای که با کمترین خطا بر داده‌های تجربی برازش شده باشد، امکان پذیر است. نرم‌افزارهایی که برای برازش، کاربرد گسترده‌ای دارند کاملاً قادر به این کار نیستند. به نظر 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 معادله توصیف‌کننده طیف انرژی عناصر استخراج شود. این کد برای طیف ^{22}Na به کار گرفته شده است و ضرایب ۱۶ گانه معادله برازش شده با کمترین مقدار ممکن (χ^2) Chi-Squared به دست آمده است. ضرایب به دست آمده به دقت اندازه‌گیری و نحوه

References

- Weimin P, Mark R, Michael M, Zhen H, Li N. Receptor Occupancy and Channel-opening Kinetics. *Journal of Biological Chemistry* 2007; 282: 22731-6.
- 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.
- 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.
- Francesco C, Pier GG, Luca Vigo, Rosario B. Photorefractive keratectomy for hyperopia: Long-term nonlinear and vector analysis of refractive outcome. *Journal of Ophthalmology* 1999; 106 (10): 1976-83.
- Bird DK, Eliceiri KW, Fan C, White JG. Simultaneous Two-Photon Spectral and Lifetime Fluorescence Microscopy. *Appl Opt* 2004; 43: 5173-82.
- 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.
- 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.
- Xiaoxia L, Shifu F, Youquan Z. Bio-tissue temperature measuring for laser medicine. *ProcSPIE* 2006; 6344: 63441.
- Yanli Q, LIU Y, Songning X, Jie H, Zhiyong F, Daiying Z. Detection of subgingival calculus by Gaussian curve fitting of laser-induced fluorescence emission. *Journal of Optoelectronics Laser* 2009; 07.
- Stefan AE, Charlotta E, Claes K, Sune SD. *Laser Applications in Medicine and Biology. Progress Report of Atomic Physics, LTH, Lund, Sweden* 1997.
- Pifferi A, Taroni P, Valentini G, Andersson ES. Real time method for fitting time- resolved reflectance and transmittance measurements with a Monte Carlo model. *Appl Opt* 1998; 37: 2774-80.
- Kota I, Ryuzaburo T, Moriaki W. Laser ablation of adipose tissue. *Tokai J Exp Clin Med* 2006; 31(4): 136-40.
- 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.
- 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).
- Bevington PR, Keith RD. *Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences. 3rd edition* McGraw- Hill New York 2003.

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 microirradiation and laser- photobleaching. *Fakultät für Biologie* 2003; 19:14588.
23. [Physics.ut.ac.ir/~shafiei/pub/gnuplot.doc](http://physics.ut.ac.ir/~shafiei/pub/gnuplot.doc).
24. Michalet X, Colyer RA, Antelman J, Siegmund OH, Tremsin A, Vallery 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>.