

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

خلاصه

مقدمه: با نوشتین 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 مطالعه طیفهایی که از برهمنکنش لیزر با سلول‌ها و اجزاء مختلف انسانی به دست می‌آید، به کار برد. طیف میکروامان لنزهای چشمی برآششده توسط De.Mul و طیف زمانی De.Mul 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 Na^{22} به کار برد شده است.

روش بررسی: برای برآش یک معادله به داده‌های اندازه‌گیری شده ابتدا شکل نمودار داده‌ها در هر نرم‌افزار ممکن مشاهده و سیس معادله مناسبی حدس زده می‌شود و ضرایب آن به صورت دستی تغییر می‌کند تا نمودار معادله برآش شده با داده‌ها مطابقت داشته باشد. بعد از این مرحله با استفاده از یک کد نوشته شده بر اساس تکنیک Grid search معرفی شده اندازه‌گیری داده‌های ناشی از معادله معرفی می‌شود و داده‌های اندازه‌گیری شده با توجه به چگونگی تغییر^۲ با یکدیگر مقایسه می‌شوند. در صورت اختلاف زیاد بین آن‌ها با معرفی پله‌هایی که میزان تغییرات ضرایب معادله برآش شده را مشخص می‌کند، سعی می‌شود χ^2 کاهش یابد. این عمل تا جایی تکرار می‌شود که^۲ به کمترین مقدار ممکن برسد.

یافته‌ها: با این روش می‌توان طیف انرژی هر ماده‌ای را فرمول‌بندی کرد. بهطور مثال معادله توصیف کننده طیف انرژی Na^{22} که با کمترین خطای بر داده‌های اندازه‌گیری شده برآش شده است، به صورت زیر خواهد بود:

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

شروع عملیات برآش با پارامتر $1107.6 = \chi^2$ شروع شده و بعد از یک هفتۀ با پارامتر $44.16 = \chi^2$ 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.

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

محمد رضا رضایی^۱
سعید محمدی^۱
علی نگارستانی^۲
سید مهدی هاشمی^۲
داریوش افضلی^۲

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

نویسنده مسئول: محمد رضا رضایی، تلفن: ۰۶۱۱۳۵۵۸
پست الکترونیک: mohamadreza45@gmail.com

مقدمه

تمام پارامترها با پله‌های اولیۀ معرفی شده همزمان تغییر می‌کنند و در مراحل بعدی با توجه به نحوه تغییر^۲ مقدار پله‌ها تغییر می‌کند تا در نهایت^۲ χ^2 کاهش یابد. ولی روش Grid search قابل اطمینان‌تر و سریع‌تر است [۱۶]. در روش Analytical برآش ماتریس $n \times n$ تغییرات^۲ نسبت به پله‌ها تشکیل می‌شود و با استفاده از عملیات Marquardt ماتریسی چگونگی تغییر^۲ بررسی می‌شود. در روش Marquardt برآش عناصر ماتریس روش Analytical برآش با یک ضریب ثابت افزایش می‌یابند و تغییرات^۲ بررسی می‌شود. De.Mul در سال ۱۹۹۰ کدی را بر اساس تکنیک Grid search و gradient search معرفی کرد و با استفاده از آن طیف میکروامان لنزهای چشمی را برآش کرد [۱۷].

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

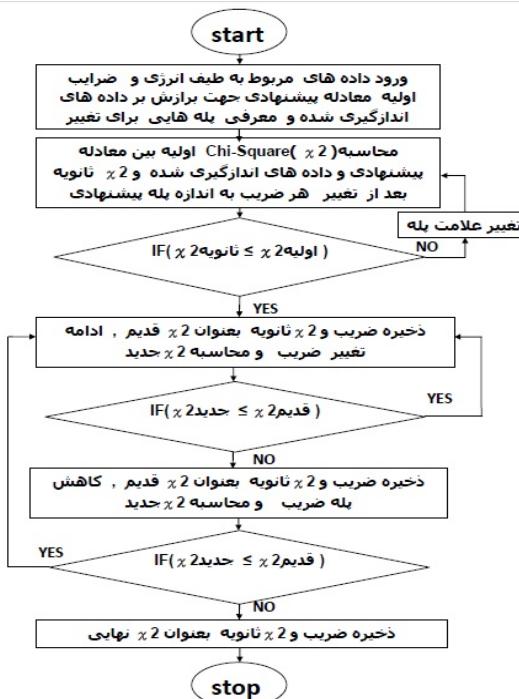
تکنیک‌های زیادی برای برآش کردن یک نمودار به داده‌های اندازه‌گیری شده وجود دارد. استفاده از معادله برآش شده در فیزیک پیشکشی، لیزر، هسته‌ای، اتمی و ... کاربرد زیادی دارد [۱۱-۱۴]. قریب به اتفاق این روش‌ها در کتاب معروف Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences آورده شده است [۱۵].

چهار روش برای برآش کردن وجود دارد [۱۶]:

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

این الگوها بر اساس مینیمم کردن پارامتر (χ^2) استوارند. در روش Grid search ابتدا پارامترهای اولیه‌ای معرفی می‌شوند. سپس هر پارامتر جداگانه با پله‌هایی که معرفی می‌شود طوری تغییر می‌کند که^۲ کاهش یابد. در روش gradient search

نوشته شده بر اساس تکنیک های معرفی شده داده های ناشی از معادله معرفی می شود و داده های اندازه گیری شده با توجه به چگونگی تغییر χ^2 با هم مقایسه می شوند. با معرفی پله هایی که میزان تغییرات ضرایب معادله برازش شده را مشخص می کند، سعی می شود χ^2 کاهش یابد. این عمل تاجیگی تکرار می شود که χ^2 به کمترین مقدار ممکن برسد. فلوچارت کد Gridsearch تعمیم یافته در شکل ۱ چگونگی عملکرد برنامه را در برون یابی ضرایب نشان می دهد.



شکل ۱- فلوچارت برنامه Gridsearch تعمیم یافته

روش آماری تحلیل داده ها 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 داده های مربوط به طیف ^{22}Na با استفاده از دستگاه تحلیل گر چند کاناله (MCA) و نرم افزار Cassy کامپیوتراست از طیف ^{22}Na شده است (جدول ۱). ۵ قله کوچک و بزرگ در طیف ^{22}Na مشاهده می شود 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 ($5+3+1=16$) نیاز خواهیم داشت. بنابراین معادله توصیف کننده طیف انرژی ^{22}Na به صورت معادله (۱) خواهد بود:

(1)

$$\begin{aligned} N = & A1 + A2 \exp(A3(E-A4)) \\ & + A5 \exp(A6(E-A7)) + A8 \exp(A9(E-A10)) \\ & + A11 \exp(A12(E-A13)) + A14 \exp(A15(E-A16)) \end{aligned}$$

در این مقاله هیچ نمودار برازش شده ای معرفی نشده است تا نحوه عملکرد هر روش مشخص باشد [۱۶].

در مطالعه ای دیگر لیزری با طول موج ۷۸۵ نانومتر برای لایه های 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، رایه نشده است.

روش Grid search یکی از روش های مناسب برازش کردنتابع بر داده ها است [۲۰ و ۲۱]. نرم افزارهای زیادی مثل Matlab, IGORPRO, Gnuplot, Origin, Labplot, Phytron جهت برازشتابع بر داده ها وجود دارد و Gnuplot یکی از قدرتمندترین آنها است که در آنالیز و اسپکتروسکوپی بیومولکول ها و ... کاربرد گسترده ای دارد [۲۱ و ۲۲]. با این نرم افزار تابع بیشتر بر داده ها منطبق می شود ولی مقدار χ^2 افزایش می باید [۲۳ و ۲۴]. با ارائه یک برنامه جدید و متفاوت که می تواند 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 داده ها 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 می شود).

۳- قابل اطمینان و سریع تر از روش های دیگر است.

۴- برنامه نویسی آن ساده تر از روش های دیگر است.

۵- در روش های دیگر که ضرایب همزمان تغییر می کند، امکان اجرای همزمان کدها با کامپیوتراهای دیگر وجود ندارد ولی در این روش به علت اینکه هر ضریب جداگانه تغییر می کند، امکان اجرای همزمان آن با کامپیوتراهای دیگر وجود دارد. از نرم افزارهای Origin Pro8 و PowerStation 4.0 تا ^{22}Na در این بررسی نتایج استفاده شده است. داده های طیف ^{22}Na در این تحقیق از دستگاه Cassy-MCA استخراج شده است [۲۵ و ۲۶].

روش بررسی

برای برازش یک معادله به داده های اندازه گیری شده ابتدا با استفاده از نرم افزار origin pro8 یا نرم افزارهای مناسب دیگر شکل نمودار داده ها مشاهده می شود. در صورت عدم تبعیت داده ها از معادلات برازش معرفی شده در این نرم افزارها معادله مناسبی حدس زده می شود و ضرایب آن به صورت دستی تغییر می کند تا نمودار برازش شده به داده ها مطابقت داشته باشد. بعد از این مرحله با استفاده از یک کد

.... Grid search طیف عنصر ^{22}Na بروش

۱ در اولین مرحله اجرا توسط برنامه Grid search معرفی می‌شوند. ضرایب سعی ۹, ۷, ۵, ۳ و ۱۲۳, ۱۱۹, ۱۱۵, ۹, ۷, ۵, ۳ از مراحل مختلف اجرای برنامه ۴ انتخاب شده‌اند. ضرایب خروجی نهایی بعد از ضرایب سعی ۱۲۳ در جدول ۳ آورده شده است.

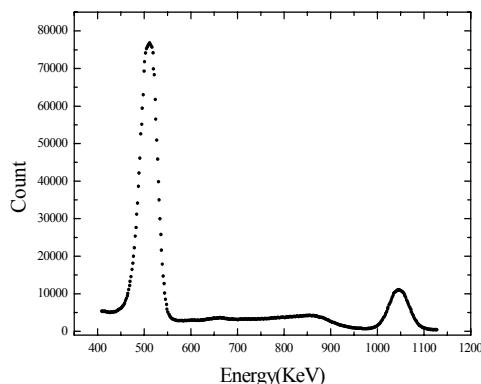
درنتیجه معادله (۲) با کمترین خطأ توصیف‌کننده طیف انرژی ^{22}Na خواهد بود.

(2)

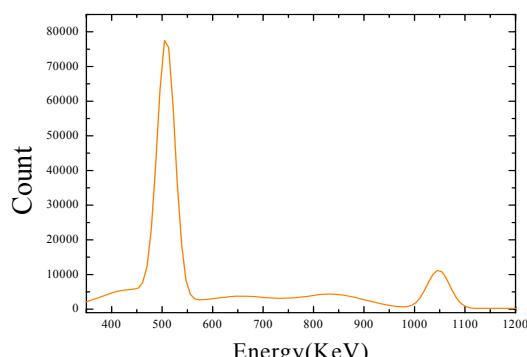
$$\begin{aligned} N = & 199.0477 + 76100 \exp(0.00167(E - \\ & 508.7539)) \\ & + 75100 \exp(0.00168(E - 509.2428)) \\ & + 3450.8070 \exp(0.0000831(E - 655.356)) \\ & + 4002.813 \exp(0.0001431(E - 839.401)) \\ & + 11000 \exp(0.00105(E - 1048.0230)) \end{aligned}$$

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

نمودار تغییرات زمانی شکل ۵ 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 برآششده طیف انرژی ^{22}Na بر اساس برنامه Grid search معرفی شده

ورویی‌های این برنامه را ابتدا با ۱۶ ضریب حدسی آغاز می‌کنیم. ضریب A1 تقریباً مقدار N را در کمترین نشان می‌دهد. ضرایب A11 بهترتیپ متناسب با ارتفاع هر قله مشاهده شده در طیف از چپ A15 بهترتیپ متناسب با پهنای هر قله مشاهده شده در طیف از چپ A16 بهترتیپ است. ضرایب A13, A10, A7, A4 بهترتیپ متناسب با موقعیت هر قله مشاهده شده در طیف از چپ به راست است. عمل مینیمم کردن χ^2 درنهایت بعد از یک زمان دلخواه با معرفی ۱۶ ضریب جدید پایان می‌پذیرد. مینیمم مقدار χ^2 بستگی به زمان عمل برآشش دارد.

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

یافته‌ها

برنامه در دو مرحله و با ۱۶ 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، ۱۶ ضریب با پارامتر توصیف‌کننده $\chi^2 = 1107.6$ معرفی می‌شود. سپس برنامه به مدت ۴ روز اجرا می‌شود و ۱۶ 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 ۱۶ ضریب جدید با پارامتر توصیف‌کننده $\chi^2 = 56.9$ شروع و بعد از ۳ روز ۱۶ ضریب نهایی با پارامتر توصیف‌کننده $\chi^2 = 44.16$ استخراج می‌شود (جدول ۲).

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

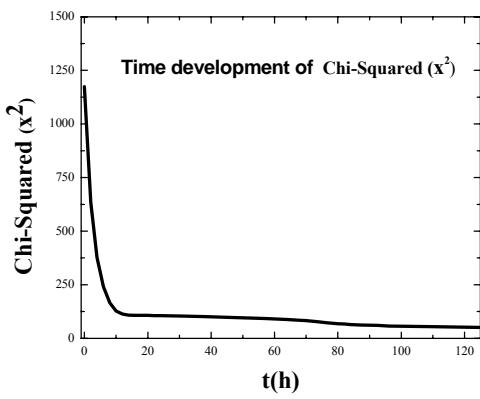
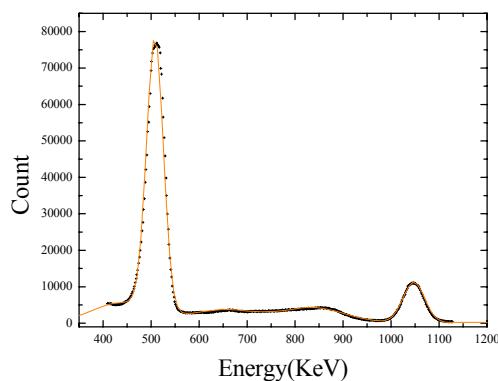
چند نمونه از ضرایب خروجی برنامه Grid search در زمان‌های مختلف اجرای برنامه در جدول ۳ نشان داده شده است. ضرایب سعی

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	
۶۶۲۴	۶۲۷۶	۶۱۰۸	۵۹۸۱	۵۸۰۵	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	۷۶۸۸۵	۷۴۴۷۰	۷۶۰۷۹	۷۵۶۸۹	۷۵۲۸۶	۷۴۱۳۸	۷۱۸۱۸	
۳۹۸۲۸	۴۵۸۹۷	۵۰۹۳۰	۵۶۵۱۵	۶۱۷۸۴	۶۸۳۲۳	۶۹۹۱۹	۷۴۱۸۶	۷۵۶۸۶	
۸۵۱۸	۱۰۱۸۱	۱۲۶۸۷	۱۴۶۹۳	۱۷۸۸۳	۲۱۶۲۴	۲۵۷۷۳	۲۹۹۸۴	۳۴۹۸۳	
۳۲۵۰	۳۳۵۶	۳۵۸۹	۳۸۷۷	۴۱۵۳	۴۰۱۷	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	۳۵۲۱	۳۵۰۹	۳۴۱۷	۳۳۴۱	۳۳۸۴	۳۳۸۴	۳۳۰۰	
۳۶۰۹	۳۵۲۳	۳۵۲۰	۳۶۰۷	۳۶۸۲	۳۶۰۰	۳۵۷۵	۳۴۹۱	۳۵۵۵	
۳۲۱۶	۳۳۰۱	۳۲۲۸	۳۲۸۸	۳۳۷۵	۳۴۰۵	۳۳۷۷	۳۴۵۱	۳۵۳۳	
۳۰۹۸	۳۱۷۴	۳۲۲۹	۳۱۶۵	۳۱۷۴	۳۲۵۳	۳۲۱۶	۳۲۲۷	۳۳۰۲	
۳۲۵۸	۳۲۳۶	۳۲۵۱	۳۲۸۱	۳۲۱۰	۳۲۶۸	۳۲۳۹	۳۲۳۷	۳۱۵۶	
۳۳۲۱	۳۲۴۹	۳۱۹۷	۳۲۲۰	۳۲۴۰	۳۲۵۸	۳۱۸۹	۳۲۶۵	۳۲۴۴	
۳۳۴۲	۳۴۰۵	۳۳۳۷	۳۲۲۴	۳۲۲۹	۳۳۱۶	۳۲۲۱	۳۲۲۰	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	۳۷۷۹	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	۴۱۰۵	
۴۰۴۷	۴۱۲۷	۴۰۳۴	۴۱۱۵	۴۱۹۴	۴۲۴۵	۴۱۵۷	۴۱۴۹	۴۲۳۵	
۳۴۷۷	۳۵۶۹	۳۶۵۸	۳۶۹۸	۳۷۷۲	۳۶۸۸	۳۷۸۴	۳۸۷۳	۳۹۰۶	
۲۵۴۶	۲۶۶۲	۲۷۴۸	۲۸۹۲	۳۰۰۴	۳۰۸۱	۳۱۷۰	۳۳۰۴	۳۳۹۰	
۱۸۲۸	۱۸۸۵	۲۰۰۰	۲۰۸۸	۲۱۶۳	۲۲۶۲	۲۳۷۶	۲۲۶۰	۲۴۴۹	
۱۲۹۸	۱۳۴۳	۱۳۹۹	۱۴۵۳	۱۵۱۱	۱۵۶۵	۱۶۲۶	۱۶۹۳	۱۷۶۰	
۹۳۳	۹۸۳	۱۰۲۹	۱۰۴۶	۱۰۸۴	۱۱۳۱	۱۱۸۱	۱۲۰۵	۱۲۰۵	
۷۹۴	۸۳۱	۷۹۲	۸۲۳	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	۵۸۱۷۳	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	۳۲۸۴	۳۷۷۰	۴۳۰۱	۴۶۴۱	۵۱۸۳	
۸۰۷	۸۷۳	۹۵۰	۱۰۰۰	۱۱۵۱	۱۲۹۷	۱۴۵۶	۱۵۹۰	۱۸۲۰	
۴۶۸	۴۹۵	۴۶۹	۵۱۰	۵۴۴	۵۷۵	۶۱۵	۶۵۲	۷۵۶	
۴۱۲	۴۱۲	۴۱۲	۴۱۲	۴۴۳	۴۱۶	۴۳۹	۴۱۵	۴۲۳	
1150 KeV									

جدول ۳- چند مورد از ضرایب خروجی برنامه Grid search

ضرایب	ضرایب ورودی	۱	۳	۵	۷	۹	سعی‌های:
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	
سعی‌های:	۱۱۵	۱۱۷	۱۱۹	۱۲۱	۱۲۳	ضرایب خروجی	ضرایب
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	449.91410	449.00960	449.1922	449.2750	449.32800	
A_5	75100	75100	75100	75100	75100	75100	
A_6	1.67E-03	1.67E-03	1.68E-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 ۵- تغییرات زمانی (χ^2)شکل ۶- نمودار طیف ^{22}Na همراه با نمودار برآذش شده با Chi-Squared (کننده) $\chi^2 = 44.16$ پارامتر توصیف کننده

بحث و نتیجه گیری

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.

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 خطای داده‌های تجربی برآورده شده باشد، امکان‌پذیر است. نرم‌افزارهایی که برای برآورش، کاربرد گسترده‌ای دارند کاملاً قادر به این کار نیستند. به نظر می‌رسد از بین تکنیک‌هایی که براساس روش کمترین مربعات برای برآورش 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 عنصر استخراج شود. این کد برای طیف ^{22}Na به کار گرفته شده است و ضرایب ۱۶ گانه Chi-Squared برآورده شده با کمترین مقدار ممکن (χ^2) معادله برآورده شده با کمترین مقدار ممکن (χ^2) به دست آمده است. ضرایب به دست آمده به دقت اندازه‌گیری و نحوه

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, Geerde 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 Ophthalmology* 1999; 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, Blakespoor 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.

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 Pco_2 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.
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.