



بیست و یکمین کنفرانس هشتای ایران

۶ و ۷ اسفند ماه ۱۳۹۳ دانشگاه اصفهان

روش جدید برای محاسبه پتانسیل برانگیزش متوسط الکترون های اتمی

صالح ، اشرفی*؛ اختای ، جهانبخش ؛ داود ، علیزاده ؛ امیر موحدی فر

*دانشگاه تبریز، دانشکده فیزیک، گروه هسته ای

(۱) چکیده

یک ذره باردار هنگام عبور از داخل ماده، به علت اندرکنش با الکترون ها و هسته اتمی، انرژی خود را در طول مسیر حرکت از دست می دهد. برای یافتن مقدار افت انرژی در واحد طول مسیر باید مقدار پتانسیل برانگیزش متوسط الکترون های اتمی ماده مشخص باشد که برای این منظور از فرمول های نیمه تجربی استفاده می شود. در این مقاله مقادیر پتانسیل برانگیزش متوسط توسط مدل های مصنوعی انفیس و شبکه های عصبی مصنوعی مدل سازی شده و نتایج حاصل با برخی از فرمول های نیمه تجربی مقایسه شده اند. نتایج به دست آمده نشان دهنده کارایی بالای مدل های مصنوعی در این مورد و مناسبتر بودن آنها نسبت به فرمول های نیمه تجربی می باشد.

(۲) کلید واژه

توان ایستاندگی، فرمول بته-بلاخ، پتانسیل برانگیزش متوسط الکترون های اتمی، شبکه های عصبی مصنوعی، انفیس

(۳) مقدمه

مقدار پتانسیل برانگیزش متوسط الکترون های اتمی یک ماده در یافتن توان ایستاندگی برای ذره باردار عبوری از داخل آن اهمیت ویژه ای دارد. این مقدار وابسته به متوسط لگاریتمی بسامد مداری^۱ با ضریب توان نوسانگر ترازهای اتمی^۲ است. اما به دست آوردن این مقادیر به علت معلوم نبودن ضریب توان نوسانگر بسیاری از مواد مشکل و حتی غیرممکن است. یک روش ساده برای محاسبه مقدار پتانسیل برانگیزش متوسط استفاده از فرمول های نیمه تجربی به دست آمده بر اساس مقادیر اندازه گیری شده می باشد [۱، ۲]. با توجه به میزان خطای فرمول های نیمه تجربی موجود ارائه مدل های جدید برای محاسبه مقدار پتانسیل برانگیزش متوسط با خطای کمتر ضروری می باشد. در این مقاله مقادیر پتانسیل برانگیزش متوسط الکترون های اتمی توسط شبکه های عصبی مصنوعی^۳ و سیستم های فازی بر پایه شبکه عصبی تطبیقی (انفیس)^۴ مدل سازی شده و در نهایت نتایج مدل های به دست آمده با مقادیر واقعی و نیز با فرمول های نیمه تجربی مقایسه شده اند.

¹ Logarithmic average of orbital frequency

² Oscillator strengths of the atomic levels

³ Artificial Neural Networks (ANN)

⁴ Adaptive Network-based Fuzzy Inference Systems (ANFIS)



بیست و یکمین کنفرانس هسته‌ای ایران

۶ و ۷ اسفند ماه ۱۳۹۳ دانشگاه اصفهان

(۴) روش کار

۴-۱) پتانسیل برانگیزش متوسط الکترون‌های اتمی

یک ذره باردار با بار Z و انرژی E هنگام عبور از داخل ماده‌ای با بار Z و عدد جرمی A انرژی خود را در طول مسیر حرکت به دلیل اندرکنش با الکترون‌ها و هسته اتم‌های ماده از دست می‌دهد. محاسبات کوانتومی فرایند برخورد، مقدار افت انرژی در واحد طول (توان ایستاندگی) را به صورت زیر بیان می‌کند که به فرمول بته-بلاخ^۵ معروف است:

$$-\frac{dE}{dx} = 4\pi r_e^2 m_e c N_A \frac{Z\rho z^2}{A\beta^2} \left\{ \ln\left(\frac{2m_e c^2 \gamma^2 \beta^2}{I(1+\gamma m_e/M)}\right) - \beta^2 - \frac{\delta}{2} - \frac{C}{Z} \right\} \quad (1)$$

که در آن β سرعت ذره فرودی در واحد c ، M جرم ذره فرودی، x طول مسیر، r_e شعاع کلاسیکی الکترون، m_e جرم سکون الکترون، N_A عدد آووگادرو، ρ چگالی جرمی ماده، δ تصحیح چگالی که از قطبش اتم‌های ماده در طول مسیر توسط میدان الکتریکی ذره ناشی می‌شود، C تصحیح لایه‌برای مقادیری از سرعت ذره فرودی که با سرعت حرکت مداری الکترون‌های مقید قابل مقایسه است. I میانگین پتانسیل برانگیزش الکترون‌های اتمی است و می‌توان آن را با متوسط‌گیری بر روی کلیه فرایندهای یونش و برانگیزش بصورت زیر محاسبه کرد [۲]:

$$\ln(I) = \frac{2}{\pi\omega_p^2} \int_0^\infty d\omega \operatorname{Im}\left(-\frac{1}{\epsilon_R(\omega)}\right) \omega \ln(\hbar\omega) \quad (2)$$

که در آن ω_p فرکانس پلاسما الکترونی $\epsilon_R(\omega)$ ثابت دی‌الکتریک است که مختلط بوده و قسمت مجازی آن جذب انرژی الکترومغناطیسی را توصیف می‌کند. مقادیر واقعی حاصل از اندازه‌گیری برای مواد مختلف در منابع معتبر وجود دارد که برخی از آنها در جدول (۱) ذکر شده است [۱-۴].

جدول (۱): مقادیر پتانسیل برانگیزش متوسط بر حسب الکترون ولت (eV) برای مواد مختلف

عنصر	نماد	عدد اتمی (Z)	پتانسیل برانگیزش متوسط	عنصر	نماد	عدد اتمی (Z)	پتانسیل برانگیزش متوسط
کربن	C	۶	۷۸	مس	Cu	۲۹	۳۲۲
نیتروژن	N ₂	۷	۸۲	تنگستن	W	۷۴	۷۲۷
اکسیژن	O ₂	۸	۹۵	سرب	Pb	۸۲	۸۲۳
آلمینیوم	Al	۱۳	۱۶۶	اورانیوم	U	۹۲	۸۹۰
سیلیسیم	Si	۱۴	۱۷۳	کالیفرنیم	Cf	۹۸	۹۶۶

به دلیل پیچیده بودن محاسبه I ، چندین فرمول نیمه تجربی برای محاسبه مقادیر I پیشنهاد شده است که می‌توان به موارد زیر اشاره کرد:

$$I = 9.1Z(1 + 1.9Z^{-\frac{2}{3}}) \quad Z > 4 \quad (3)$$

⁵Bethe-Bloch



بست و یکمین کنفرانس هشتای ایران

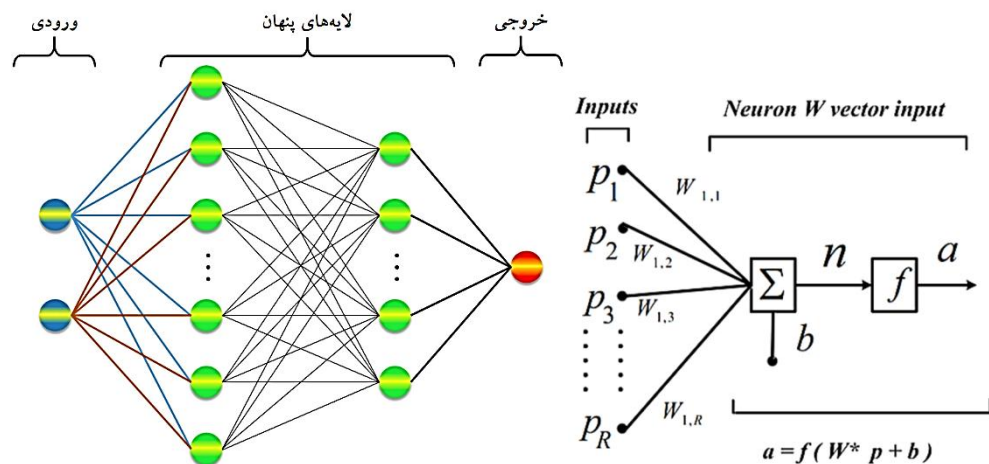
۶ و ۷ اسفند ماه ۱۳۹۳ دانشگاه اصفهان

$$\begin{cases} I = 12Z + 7 & Z < 13 \\ I = Z(9.76 + 58.8Z^{-1.19}) & Z \geq 13 \end{cases} \quad (4)$$

که در آن Z عدد اتمی ماده می باشد [۱،۲].

۴-۲) شبکه های عصبی مصنوعی

شبکه های عصبی مصنوعی را می توان مدل های الکترونیکی از ساختار مغز انسان نامید. مکانیسم فراگیری و آموزش مغز اساسا بر تجربه استوار است مدل های الکترونیکی شبکه های عصبی طبیعی نیز براساس همین الگو بنا شده اند. این شبکه ها معمولا به منظور فراگیری نقشه های ورودی-خروجی مجموعه ای از الگوها و نمونه ها مورد استفاده قرار می گیرند. روابط کاربردی میان متغیرها، بدون اینکه نیازی به تعریف روابط میان تک تک متغیرها باشد، فراگرفته می شوند [۵]. عنصر پردازشی در شبکه های عصبی مصنوعی، نرون است که در آن سیگنال ورودی (p) پس از تقویت یا تضعیف شدن به اندازه پارامتر وزن W به صورت یک سیگنال الکتریکی با اندازه $W \times P$ وارد نرون می شود. مدل ریاضی نرون در شکل (۱) نشان داده شده است.



شکل (۱): مدل ریاضی نرون شکل (۲): ساختار یک شبکه پرسپترون دو لایه

به دلیل ساده سازی مدل ریاضی در هسته سلول عصبی، سیگنال ورودی با سیگنال دیگری به اندازه b جمع می گردد. مجموع حاصل از تابع انتقال f عبور کرده و خروجی سلول به صورت زیر حاصل می شود [۶].

$$a = f(n) = f(W_{1,1} \times P_1 + W_{1,2} \times P_2 + \dots + W_{1,R} \times P_R + b) \quad (5)$$

تعداد زیادی نرون می توانند در یک لایه از شبکه با هم ترکیب شوند. همچنین یک شبکه ممکن است شامل یک یا چندین لایه باشد. در این پژوهش از یک نوع شبکه عصبی مصنوعی موسوم به شبکه پرسپترون چند لایه^۷ با الگوریتم پس انتشار خطا^۸ با تابع انتقال $tansig$ استفاده شده است (شکل (۲)). ورودی شبکه، عدد اتمی هر ماده و خروجی

^۶ Neuron

^۷ Multi-Layer Perceptron

^۸ Back Propagation



بیست و یکمین کنفرانس هفتای ایران

۷ و ۸ اسفند ماه ۱۳۹۳ دانشگاه اصفهان

شبکه، مقدار پتانسیل برانگیزش متوسط مواد می باشد [۶].

۳-۴ سیستم های فازی بر پایه شبکه عصبی تطبیقی (انفیس)

نظریه مجموعه های فازی برای حل مسایلی که وابسته استدلال، تصمیم گیری و استنباط بشری هستند مطرح شده است. سیستم های فازی برخلاف شبکه های عصبی قادر به یادگیری نیستند برای رفع این نقص سیستمی تحت عنوان سیستم فازی بر پایه شبکه عصبی تطبیقی ارائه گردیده که مزایای مجموعه های فازی و شبکه عصبی مصنوعی را در خود جمع کرده است [۷]. غالباً سیستم های انفیس را با استفاده از یک سیستم فازی تاکاگی-سوگنو-تانگ (TSK) به کار می برند که برای دو ورودی (y, x) با دو قانون بصورت زیر است [۸]:

قانون اول: اگر x در مجموعه A_1 و y در مجموعه B_1 قرار دارند آنگاه $f_1 = p_1 x + q_1 y + r_1$

قانون دوم: اگر x در مجموعه A_2 و y در مجموعه B_2 قرار دارند آنگاه $f_2 = p_2 x + q_2 y + r_2$

سیستم های انفیس شامل پنج لایه به شرح زیر می باشد:

لایه اول: داده های ورودی مطابق قوانین TSK فازی شده و با عبور از توابع عضویت، درجه عضویت هر یک مشخص می گردد. توابع عضویت می توانند بصورت گاوسی، زنگوله ای، مثلثی و ... باشند.

لایه دوم: درجه فعالیت هر قانون از رابطه زیر تعیین می گردد:

$$w_k = \mu_{A_k}(x) \times \mu_{B_k}(y) \quad (6)$$

که در آن $\mu_{B_k}(y)$ درجه عضویت y در مجموعه فازی B_k و w_k درجه فعالیت قانون k ام است.

لایه سوم: درجه فعالیت نرمال شده قانون k ام بصورت زیر تعیین می گردد:

$$\bar{w}_k = \frac{w_k}{\sum_k w_k} \quad (7)$$

لایه چهارم: خروجی مربوط به قانون k ام از رابطه زیر به دست می آید:

$$O_k = \bar{w}_k f_k = \bar{w}_k (p_k x + q_k y + r_k) \quad (8)$$

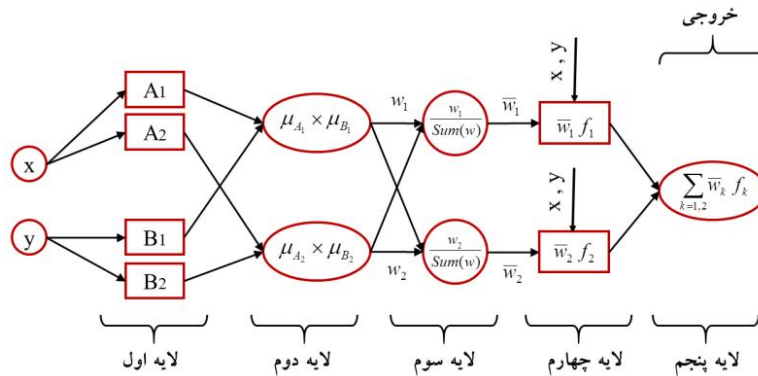
لایه پنجم: خروجی نهایی سیستم انفیس بصورت زیر محاسبه می شود:

$$Output = \sum_k \bar{w}_k f_k \quad (9)$$

در شکل (۳) الگوریتم ساده ای از عملکرد لایه ها در مدل استنتاج عصبی فازی تطبیقی آورده شده است [۸].

بست و یکمین کنفرانس هفتای ایران

۶ و ۷ اسفند ماه ۱۳۹۳ دانشگاه اصفهان

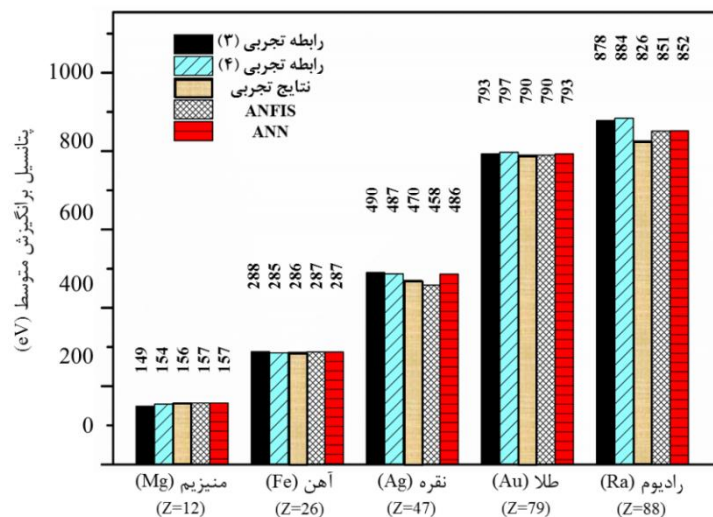


شکل (۳): ساختار شماتیک یک مدل انفیس

در این پژوهش از یک سیستم انفیسبا تابع عضویت گاوسی با قوانین خطیاستفاده شده استکه در آن ورودی مدل، عدد اتمی هر ماده و خروجی مدل، مقدار پتانسیل برانگیزش متوسط مواد می باشد.

۵) نتایج

برای طراحی و آموزش مدل های مصنوعی به کمک جعبه ابزارهای موجود در نرم افزار متلب از داده های جدول (۱) استفاده کردیم و در نهایت توانستیم مقادیر پتانسیل برانگیزش متوسط مواد بر حسب عدد اتمی آنها را توسط شبکه عصبی پرسپترون دولایه با تعداد ۸ و ۱۴ نرون در لایه های اول و دومو سیستم انفیس با تعداد ۷ قانون و تابع عضویت گاوسیمدل سازی کرده و از آنها برای پیش بینی مقادیر پتانسیل برانگیزش متوسط در فاز کاری استفاده کنیم. نتایج حاصل از پیش بینیمدل های انفیس و شبکه عصبی مصنوعی و نیز فرمول های نیمه تجربی (۳) و (۴) برای عناصر دیگری که در آموزش مدل های مصنوعی نقشی نداشته اند بصورت نمودار ستونی در شکل (۴) برای هر عنصر نشان داده شده است.



شکل (۴): مقادیر پتانسیل برانگیزش متوسط در فاز کاری برای مواد با عدد اتمی متفاوت بر حسب (eV)



بیست و یکمین کنفرانس هسته‌ای ایران

۶ و ۷ اسفند ماه ۱۳۹۳ دانشگاه اصفهان

برای مقایسه روش‌های موجود از پارامترهای میانگین مربعات خطا (RMSE) و متوسط درصد خطای نسبی (MPE) با تعاریف زیر استفاده کردیم:

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (I_i - O_i)^2}{n}} \quad (10)$$

$$MPE = \frac{100}{n} \sum_{i=1}^n \frac{|I_i - O_i|}{I_i} \quad (11)$$

که n تعداد داده‌ها، I داده‌های تجربی مربوط به پتانسیل برانگیزش متوسط و O مقادیر حاصل از مدل می‌باشد. کمتر بودن این پارامترها برای هر روش متناظر با کارایی بهتر آن روش است. مقادیر خطاهای RMSE و MPE در فاز کاری برای هر یک از روش‌های مورد استفاده در این پژوهش، محاسبه شده و در جدول (۲) ثبت گردیده‌اند.

جدول (۲) مقادیر خطاهای RMSE و MPE در فاز کاری برای روش‌های مختلف

	پارامتر خطا	رابطه نیمه تجربی (۴)	رابطه نیمه تجربی (۳)	ANFIS	ANN
RMSE		۲۷/۲۳	۲۵/۱۶	۱۲/۴۲	۱۳/۸۳
MPE		۲/۶۳	۳/۲۲	۱/۳۱	۱/۵۸

با توجه به نتایج حاصل در جدول (۲) مشاهده می‌شود که خطای مدل‌های مصنوعی کمتر از روابط نیمه تجربی موجود است که نشان دهنده کارایی بهتر این روش‌ها در پیش‌بینی مقادیر پتانسیل برانگیزش متوسط با تغییرات عدد اتمی می‌باشد. نتیجه دیگری که از داده‌های جدول (۲) قابل مشاهده است کمتر بودن مقادیر خطای سیستم انفیس از مقادیر خطای شبکه عصبی مصنوعی می‌باشد.

۶) بحث و نتیجه‌گیری

در این تحقیقتوانایی مدل‌های مصنوعی برای محاسبه مقدار پتانسیل برانگیزش متوسط الکترون‌های اتمی را برای مواد مختلف بر حسب عدد اتمینشان دادیم. نتایج حاصل بیانگر کارایی بسیار خوب سیستم انفیس در مقایسه با روابط نیمه تجربی موجود برای تخمین مقادیر پتانسیل برانگیزش متوسط می‌باشد همچنین مدل انفیسبه دست آمده خطای کمتری نسبت به شبکه عصبی طراحی شده در این پژوهش دارد.

۷) مراجع

- 1) William R. Leo, Techniques for Nuclear and Particle Physics Experiments, Springer, Berlin, 21-29, 1994
- 2) Brian J. McParland, Nuclear Medicine Radiation Dosimetry: Advanced Theoretical Principles, Springer, London, 245-247, 2010
- 3) Ervin B. Podgorsak, Radiation Physics for Medical Physicists, Springer, McGill, 239-240, 2010
- 4) <http://www.nndc.bnl.gov/>
- 5) Rosenblatt, F. Principles of Neurodynamics, Spartan Press, Washington D.C. (1961)
- 6) Martin, T, Hagan, B. DEMUTH.; Neural Network Design, Mark Beale MHB, Inc. PWS Publishing, 2000.
- 7) Jang J.S.R, ANFIS: Adaptive Network Based Fuzzy Inference System, IEEEtrans on Sys, Man and Cyb, 1993.
- 8) Jang. J. S. R and Sun. C. T, Neuro-Fuzzy Modeling and Control, Proceedings IEEE, 1997.