

۱۶ و ۱۷ اسفندماه ۱۳۹۴ دانشگاه یزد

تخمین توان ایستاندگی و برد یون‌ها با استفاده از شبکه‌های عصبی مصنوعی و کد SRIM

جواد جامعی اسکویی^۱، محسن خردمند سعدی^۱

^۱دانشگاه آزاد اسلامی، واحد علوم و تحقیقات، گروه مهندسی هسته‌ای، تهران-ایران

چکیده:

محاسبه توان ایستاندگی و برد یون‌های مختلف به دلیل اهمیت ویژه آنها در مباحث حفاظ سازی و فیزیک بهداشت بسیار مهم می‌باشد. در این مقاله از تکنیک شبکه‌های عصبی مصنوعی به منظور شبیه‌سازی تغییرات توان ایستاندگی بر حسب تغییرات انرژی یون فرودی و برد در اهداف مختلف استفاده شده است. مقایسه نتایج حاصل از مدل مصنوعی با نتایج محاسبات کد SRIM و نیز داده‌های تجربی موجود نشان دهنده کارایی بالای روش پیشنهادی برای تغییرات توان ایستاندگی و برد و معتبر بودن مدل مصنوعی به دست آمده می‌باشد.

واژه‌های کلیدی: توان ایستاندگی، برد، شبکه‌های عصبی، کد SRIM

مقدمه:

دو پارامتر توان ایستاندگی^۱ و برد^۲ از مهمترین پارامترهای مورد بررسی در مباحث حفاظت در برابر اشعه و حفاظ سازی می‌باشد [۱،۲]. توان ایستاندگی برای یونها و ذرات باردار به صورت آهنگ خطی افت انرژی $\left(\frac{dE}{dx}\right)$ تعریف می‌گردد و ضخامتی از ماده که ذره‌ای با انرژی جنبشی E، جرم M و بار Z را کاملاً باز می‌ایستاند برد ذره در آن ماده می‌نامند [۳،۴]. با توجه به اهمیت محاسبه میزان انرژی برجای مانده در ماده هدف از نظر دزیمتری و نیز بررسی افت انرژی پرتابه از منظر حفاظ سازی، بررسی و محاسبه توان ایستاندگی و برد یون‌های مختلف در اهداف متفاوت دارای اهمیت ویژه‌ای است. با محاسبه دقیق توان ایستاندگی یون‌ها می‌توان برد آنها را با دقت خوبی تعیین کرد اما به دلیل مشکلات موجود در تعیین دقیق توان ایستاندگی یون‌ها، که منجر به خطای بیشتر در محاسبه برد آنها می‌گردد، چندین فرمول تجربی برای محاسبه برد ذرات توسط محققین پیشنهاد شده که برای یون‌های سبک مانند پروتون، آلفا نتایج نسبتاً دقیقی ارائه می‌دهند اما برای یون‌های سنگین خطای آنها غیر قابل صرف نظر است [۵]. در این مقاله قصد داریم با استفاده از توانایی شبکه‌های عصبی مصنوعی^۳ در پردازش داده‌های تجربی و پیش‌بینی قانون نهفته در ورای این داده‌ها مدلی جدید برای تخمین توان

¹ Stopping Power

² Range

³ Artificial Neural Network (ANN)

۱۶ و ۱۷ شهریور ۱۳۹۴ دانشگاه یزد

ایستاندگی و برد یون‌ها در مواد مختلف ارائه کنیم. بدین منظور توان ایستاندگی و برد عناصر مختلف در برابر پرتابه آلفا در گستره انرژی $1-10^5 \text{keV}$ توسط شبکه عصبی مصنوعی در نرم افزار MATLAB مدل‌سازی شده و از آن برای تخمین مقدار توان ایستاندگی و برد عناصر کربن آلومینیوم و طلا در انرژی‌های مختلف در برابر پرتابه آلفا استفاده شده است. در نهایت نتایج حاصل از شبکه عصبی مصنوعی با داده‌های تجربی و نتایج حاصل از نرم‌افزار SRIM مقایسه گردید.

توان ایستاندگی

محاسبه توان ایستاندگی مستلزم درک مناسبی از سازوکارهای اتلاف انرژی ذرات باردار در محیط است. این سازوکارها عمدتاً بر مبنای یونش و برانگیزش، تابش ترمزی و گسیل تابش چرنکوف است. در مورد محاسبه توان ایستاندگی دو دسته از روابط موجود می‌باشند. دسته اول بر مبنای دیدگاه کلاسیک از برهمکنش ذرات باردار و محیط است که به روابط بوهر موسوم می‌باشد. دسته دوم روابط بر مبنای مکانیک کوانتومی و نسبیتی است که به معادله بته-بلاخ^۴ منتهی می‌گردد [۲]. به لحاظ تاریخی در ابتدا محاسبات کلاسیکی بوهر ارائه گردید که یک توصیف منطقی از اتلاف انرژی برای بسیاری از ذرات سنگین مثل ذره آلفا یا هسته‌های سنگین را ارائه می‌دهد. مدل بوهر به دلیل نادیده گرفتن اثرات کوانتومی، برای ذرات سبکتر مثل پروتون معتبر نیست. در نهایت پس از تحقیقات گسترده توسط محققین، رابطه بته-بلاخ با در نظر گرفتن اثرات کوانتومی، تصحیح تاثیر چگالی و نیز تصحیح پوسته بصورت زیر مطرح شد:

$$\frac{dE}{dx} = 2\pi N_a r_e^2 m_e c^2 \rho \frac{Z}{A} \frac{z^2}{\beta^2} \left[\ln \left(\frac{2m_e \gamma^2 v^2 w_{max}}{I^2} \right) - 2\beta^2 - \delta - 2\frac{c}{Z} \right] \quad (1)$$

که در آن r_e شعاع کلاسیک الکترون، m_e جرم الکترون، N_a عدد آووگادرو، ρ چگالی ماده جاذب، Z عدد اتمی ماده جاذب، Z عدد اتمی پرتابه، I پتانسیل یونش، A عدد جرمی ماده جاذب، w_{max} ماکزیمم انرژی منتقل شده در یک تک

⁴ Bethe-Bloch

۱۶ و ۱۷ شهریور ۱۳۹۴ دانشگاه یزد

برخورد، δ تصحیح چگالی و C تصحیح پوسته می‌باشد [۲].

یون‌های سنگین به سختی از مسیر شان منحرف می‌شوند، مگر نزدیک به انتهای گذرگاه‌شان که برخوردهای هسته‌ای اهمیت پیدا می‌کنند. بنابراین برد R ، که به صورت عمق نفوذ در راستای فرود تعریف می‌شود تقریباً برابر با طول مسیر یعنی مسافت واقعی پیموده شده به وسیله یون خواهد بود. در نتیجه می‌توان برد ذرات را توسط معادله زیر محاسبه کرد:

$$R = \int_0^E \frac{dE}{\left(\frac{dE}{dx}\right)_e + \left(\frac{dE}{dx}\right)_n} \quad (2)$$

کد SRIM

کد SRIM نخستین بار در سال ۱۹۸۵ به منظور محاسبه توان ایستاندگی و برد یون‌ها توسط زیگلر^۵ و همکاران طراحی گردید و سپس برای اکثر عناصر و برخی از ترکیبات توسعه یافت [۴،۷]. این نرم‌افزار توان ایستاندگی و برد یون‌ها در داخل مواد را با استفاده از رفتار مکانیک کوانتومی برخورد یون-اتم محاسبه می‌کند [۳،۴،۷]. متأسفانه سورس این کد در اختیار نویسندگان نبوده و در منوال‌های آن نیز اشاره‌ای به فیزیک سازوکارهای برهمکنش ذرات باردار با محیط نشده است. بنابراین نسبت به روابط تئوری مورد استفاده در کد SRIM اطلاعاتی در دسترس نیست.

شبکه عصبی مصنوعی

در حالت کلی، یک شبکه عصبی زیستی از مجموعه یا مجموعه‌ای از نرون‌های به صورت فیزیکی به هم متصل یا از لحاظ عملکردی به هم وابسته تشکیل شده است. هر نرون می‌تواند به تعداد بسیار زیادی از نرون‌ها وصل باشد و تعداد کل نرون‌ها و اتصالات بین آن‌ها می‌تواند بسیار زیاد باشد. به همین ترتیب شبکه عصبی مصنوعی یک روش محاسباتی است که از تعداد زیادی نرون تشکیل می‌شود و مجموعه ورودی را به خروجی ربط می‌دهند. شبکه‌های عصبی با توانایی قابل توجه خود در استخراج نتایج از داده‌های پیچیده می‌توانند در استخراج الگوها و شناسایی گرایش‌های مختلفی که برای انسان‌ها و کامپیوتر شناسایی آنها بسیار دشوار است، استفاده شوند. امروزه شبکه‌های عصبی مصنوعی به علت توانایی بالای آن در پیش‌بینی نقاط بدون دانستن هیچ‌گونه رابطه‌ای و همچنین زمان کم آموزش شبکه، کاربرد وسیعی پیدا کرده است [۸،۹]. عموماً هر شبکه عصبی از سه لایه تشکیل شده که عبارتند از:

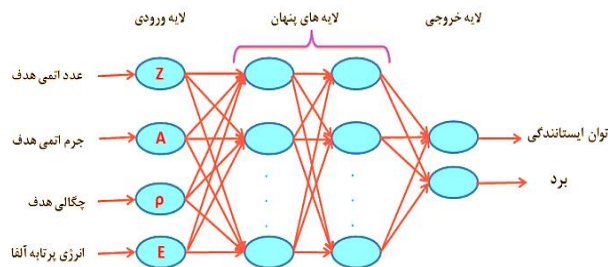
⁵ Ziegler

۱۶ و ۱۷ شهریور ۱۳۹۴ دانشگاه یزد

- (۱) لایه ورودی. داده‌های ورودی به عنوان لایه ورودی شبکه بوده که مستقیماً وارد نرون‌های اولین لایه پنهان می‌شود.
- (۲) لایه‌های پنهان. تعداد لایه‌های پنهان و تعداد نرون در هر لایه پنهان متغیر است.
- (۳) لایه خروجی. که همان خروجی شبکه است.

روش کار

در این مقاله از یک نوع شبکه عصبی مصنوعی موسوم به شبکه پرسپترون چندلایه^۶ با الگوریتم پس انتشار خطا^۷ استفاده شده است، که در آن ورودی شبکه، عدد اتمی، عدد جرمی و چگالی هدف و انرژی پرتابه پروتون و خروجی شبکه توان ایستاندگی و برد ماده هدف می‌باشد (شکل ۱).



شکل (۱): ساختار شماییک شبکه عصبی مصنوعی با دو لایه پنهان

برای مقایسه نتایج حاصل از مدل مصنوعی با مقادیر تجربی از پارامتر ریشه میانگین مربعات خطا (RMSE) و ضریب تعیین (R^2) با تعاریف زیر استفاده شد:

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (t_i - o_i)^2}{n}} \quad (۳)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_i (t_i - o_i)^2}{\sum_i (o_i)^2} \quad (۴)$$

که در آن n تعداد داده‌ها، t داده‌های تجربی مربوط به توان ایستاندگی و برد و o مقادیر توان ایستاندگی و برد بدست آمده از شبکه عصبی مصنوعی می‌باشد [۹، ۱۰، ۱۱].

نتایج :

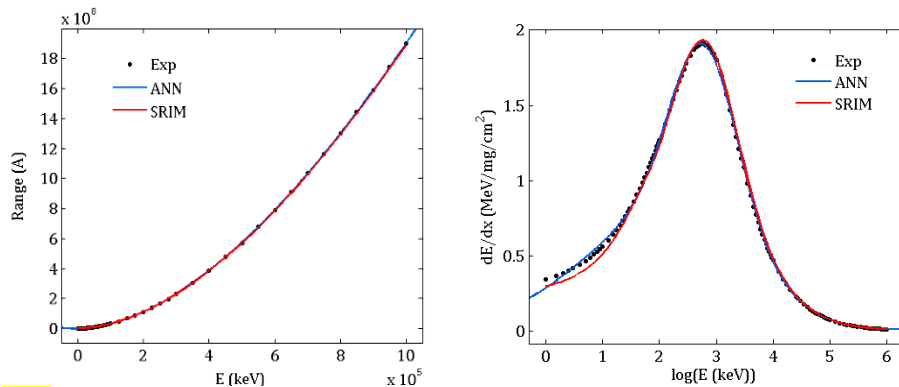
به منظور آموزش شبکه عصبی جهت مدل‌سازی توان ایستاندگی و برد عناصر مختلف، از داده‌های تجربی مربوط به توان

^۶ Multi-Layer Perceptron (MLP)

^۷ Back Propagation

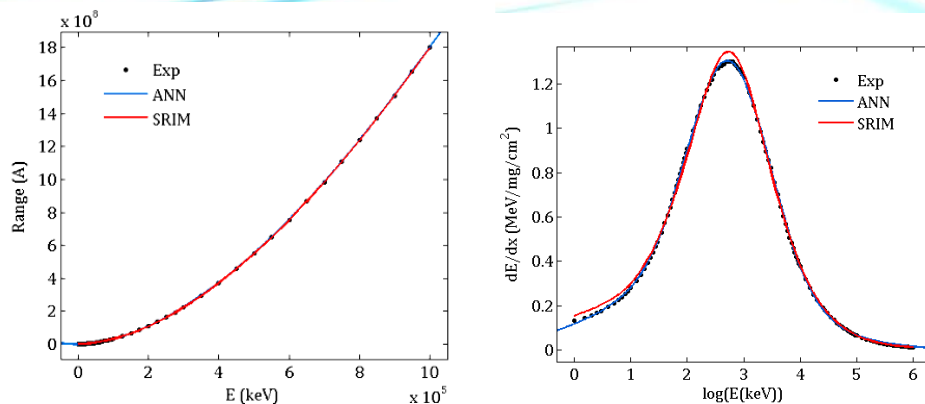
۱۶ و ۱۷ اسفندماه ۱۳۹۴ دانشگاه یزد

ایستاندگی و برد پرتابه آلفا، موجود در منابع معتبر [۴،۶،۱۱] استفاده شد. این توان ایستاندگی و برد توسط یک شبکه عصبی پرسپترون با سه لایه پنهان و با تعداد ۱۴، ۱۷ و ۱۱ نرون به ترتیب در لایه‌های پنهان اول، دوم و سوم مدل سازی شده است. برای اعتبار سنجی مدل در مرحله آموزش شبکه عصبی تعدادی از داده‌های تجربی را برای تست شبکه انتخاب کردیم که این داده‌ها در آموزش شبکه هیچ نقشی نداشتند. پس از اطمینان از مدل به دست آمده این مدل در مرحله کاری برای پیش‌بینی توان ایستاندگی و برد عناصر کربن، آلومینیوم و طلا در برابر پرتابه آلفا در گستره انرژی ۱-۱۰^۵ keV استفاده گردید. در شکل‌های ۲، ۳ و ۴ نتایج حاصل از مدل سازی شبکه عصبی برای توان ایستاندگی و برد به ترتیب برای عناصر کربن، آلومینیوم و طلا با محاسبات حاصل از نرم‌افزار SRIM و داده‌های تجربی مقایسه شده است.

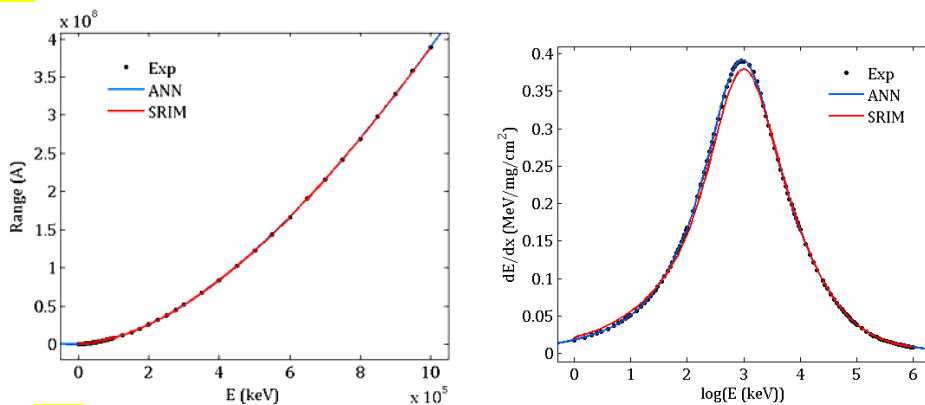


شکل (۲): نتایج حاصل از پیش‌بینی شبکه عصبی مصنوعی و محاسبه نرم‌افزار SRIM برای توان ایستاندگی و برد کربن و مقایسه با نتایج تجربی [۷،۱۱].

۵ و ۶ اسفندماه ۱۳۹۴ دانشگاه یزد



شکل (۳): نتایج حاصل از پیش‌بینی شبکه عصبی مصنوعی و محاسبه نرم‌افزار *SRIM* برای توان ایستاندگی و برد آلومینیوم و مقایسه با نتایج تجربی [۷،۱۱].



شکل (۴): نتایج حاصل از پیش‌بینی شبکه عصبی مصنوعی و محاسبه نرم‌افزار *SRIM* برای توان ایستاندگی و برد طلا و مقایسه با نتایج تجربی [۷،۱۱].

همانگونه که ملاحظه می‌گردد شبکه عصبی مصنوعی پیش‌بینی بسیار مناسبی در تخمین توان ایستاندگی و برد پرتابه آلفا ارائه می‌دهد. این داده‌ها در تطابق بسیار خوبی با نتایج تجربی و نتایج حاصل از کد *SRIM* می‌باشند. همچنین برای مقایسه بهتر نتایج، از پارامتر ریشه میانگین مربعات خطا و ضریب تعیین استفاده شده است. این پارامترها به ترتیب در جدول‌های (۱) و (۲) نشان داده شده است.

جدول ۱: RMSE برای نتایج نرم‌افزار *SRIM* و شبکه عصبی مصنوعی

۱۶ و ۱۷ اسفندماه ۱۳۹۴ دانشگاه یزد

RMSE	خطای	کربن	طلا	آلومینیوم
توان	SRIM	۰/۰۳۲۴	۰/۰۱۱۱	۰/۰۴۷
	ANN	۰/۰۰۵۲	۰/۰۰۱	۰/۰۱۵۱
برد	SRIM	$6/71 \times 10^6$	$1/1.35 \times 10^6$	$1/45.3 \times 10^7$
	ANN	$3/84 \times 10^0$	$3/57 \times 10^0$	$3/81 \times 10^0$

جدول ۲: R^2 برای نتایج نرم افزار SRIM و شبکه عصبی مصنوعی

R^2	خطای	کربن	طلا	آلومینیوم
توان	SRIM	۰/۹۹۹۲	۰/۹۹۸۷	۰/۹۹۹۲
	ANN	۰/۹۹۹۹	۰/۹۹۹۹	۰/۹۹۹۸
برد	SRIM	۱	۱	۰/۹۹۹۹
	ANN	۱	۱	۱

از مقایسه مقادیر RMSE و R^2 ملاحظه می گردد که در هر سه عنصر مورد بحث، نتایج شبکه عصبی مصنوعی تا حدود

۵ و ۶ اسفندماه ۱۳۹۴ دانشگاه یزد

زیادی دقیق‌تر از نتایج کد SRIM می‌باشد.

بحث و نتیجه گیری :

در این مقاله توان ایستاندگی و برد مواد مختلف در برابر پرتابه آلفا فرودی با استفاده از شبکه عصبی پرسپترون با سه لایه پنهان مدل‌سازی گردید. مقایسه نتایج به دست آمده در اهداف مختلف کربن، آلومینیوم و طلا با نتایج حاصل از کد SRIM و نیز داده‌های تجربی نشانگر دقت و کارایی بالای روش ارائه شده برای تخمین توان ایستاندگی و برد عناصر مختلف می‌باشد. همچنین پارامتر ریشه میانگین مربعات خطا و ضریب تعیین حاصل از شبکه عصبی مورد استفاده به طور قابل ملاحظه‌ای کمتر از کد SRIM می‌باشد که بیانگر توانایی بالای شبکه‌های عصبی مصنوعی در مدل‌سازی نتایج تجربی و کاربرد آنها در پیش‌بینی مواردی است که نتایج آزمایشگاهی موجود نیست.

مرجع‌ها :

- [1] Herman Cember, Thomas E. Johnson. INTRODUCTION TO Health Physics. 1976.
- [2] William R. Leo. Techniques for Nuclear and Particle Physics Experiments. Springer-Verlag New York Berlin Heidelberg. 1993.
- [3] J. F. Ziegler, J. P. Biersack, M. D. Ziegler. The Stopping and Range of Ions in Solids. Springer-Verlag Berlin Heidelberg. 1982.
- [4] H. H. Andersen and J. F. Ziegler, Helium Stopping Powers and Ranges in All Elements. Pergamon, New York, 1977.
- [5] Nicholas Tsoulfanidis. MEASUREMENT AND DETECTION OF RADIATION. Taylor & Francis. 1976.
- [6] Robley D. Evans. The atomic nucleus. TATA McGRRAW-HILL PUBLISHING COMPANY LTD. 1955.
- [7] <http://www.srim.org/>
- [8] Martin, T, Hagan, B. DEMUTH.; Neural Network Design, Mark Beale MHB, Inc. PWS Publishing Company, 2000.
- [9] Bart Kosko, Forewords by Lotfi A. Zade.; James A. Anderson.; "Neural Network and Fuzzy Systems", Prentice-Hall Inc., 1992.
- [10] MATLAB 7 (2009) "Neural network toolbox user's guide", Math Works Inc.
- [11] <http://www.nist.gov/>