

طراحی نرم افزار آنالیز کمی و کیفی عنصری به روش فعالسازی نوترونی با استفاده از شبکه عصبی

حسین خلفی* - فائزه رحمانی - محمد صادق ترمان

پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای - پژوهشکده کاربرد پرتوها

چکیده

از روشهای متداول تجزیه در تشخیص و اندازه گیری عناصر موجود در نمونه ها، بویژه عناصر کم مقدار، فعالسازی نوترونی می باشد. در این پژوهش، با استفاده از توانمندی شبکه های عصبی در شناسایی الگوها (Pattern Recognize) و یا جداسازی داده ها، نرم افزاری جهت کمک در آنالیز مواد به روش فعالسازی نوترونی طراحی و پیاده سازی شده است. شبکه عصبی مورد استفاده در این نرم افزار یک شبکه پرسپترون چندین لایه (Multilayer Perceptrons) می باشد که توسط الگوریتم آموزشی لونیبرگ مارکوآرت (Levenberg-Marquardt) آموزش داده شده است. از جمله مزایای این نرم افزار، دقت قابل قبول آن در پیش بینی عناصر به ازای داده های ورودی ناقص و یا نویزی می باشد.

کلید واژه: فعالسازی نوترونی، شبکه عصبی، شناسایی عنصری، انرژی قله گاما، الگوریتم آموزشی لونیبرگ مارکوآرت

مقدمه

یکی از روشهای تجزیه مورد استفاده در شناسایی عنصری نمونه ها، فعالسازی نوترونی می باشد. در این روش نمونه مورد بررسی با نوترونهای حاصل از یک چشمه نوترونی (قلب راکتور، شتاب دهنده و یا چشمه های رادیو ایزوتوپی) بمباران شده و فعال می شود. طیف گامای حاصل از رادیوایزوتوپ های پدید آمده با استفاده از طیف نگاری ثبت شده و قله های انرژی گامای گسیل شده مشخص می گردند (انرژی و قله). با توجه به منحصر بفرد بودن انرژی های مربوط به گامای عناصر، با استفاده از اطلاعات مربوط به انرژی گاماها ساطع شده و مقایسه آن با بانک اطلاعاتی گاماها منتشره از ایزوتوپهای مختلف، عناصر موجود در ماده مشخص می شوند. مرحله شناسایی عنصری، آنالیز کیفی نامیده می شود. در این مرحله با توجه به نوع اندرکنش، نیمه عمر محصولات، مدت زمان پرتودهی و سایر اطلاعاتی که کاربر درباره نمونه دارد، درباره هسته های گسیلنده گاما تصمیم گیری می شود. مرحله بعدی تعیین مقادیر درصد وزنی عناصر تشکیل دهنده نمونه می باشد که از آن به عنوان آنالیز کمی یاد می شود. در فعالسازی نوترونی به منظور انجام آنالیز کمی،



به همراه هر نمونه مجهول (عناصر با درصد وزنی نامعین)، نمونه استاندارد نیز ارسال می‌شود. نمونه استاندارد حاوی عناصر مورد نظر در نمونه مجهول با مقادیر درصد وزنی معین است. در صورتی که شرایط پرتودهی (شار پرتودهی، محل پرتودهی، زمان آغاز و پایان پرتودهی) برای هر دو نمونه یکسان باشد، بر اساس سطح زیر قله انرژی گامای حاصل از رادیوایزوتوپ مربوط به عنصر مجهول و مقایسه آن با شمارش قله متناظر در نمونه استاندارد، مقدار وزنی عنصر مورد نظر در نمونه قابل محاسبه است. با استفاده از شبکه عصبی و اتصال آن به بانک داده‌های هسته‌ای مربوط به فعالسازی نوترونی، تصمیم‌گیری در شناسایی عناصر موجود در نمونه و آنالیز کمی به آسانی و با سرعت بیشتری انجام می‌شود.

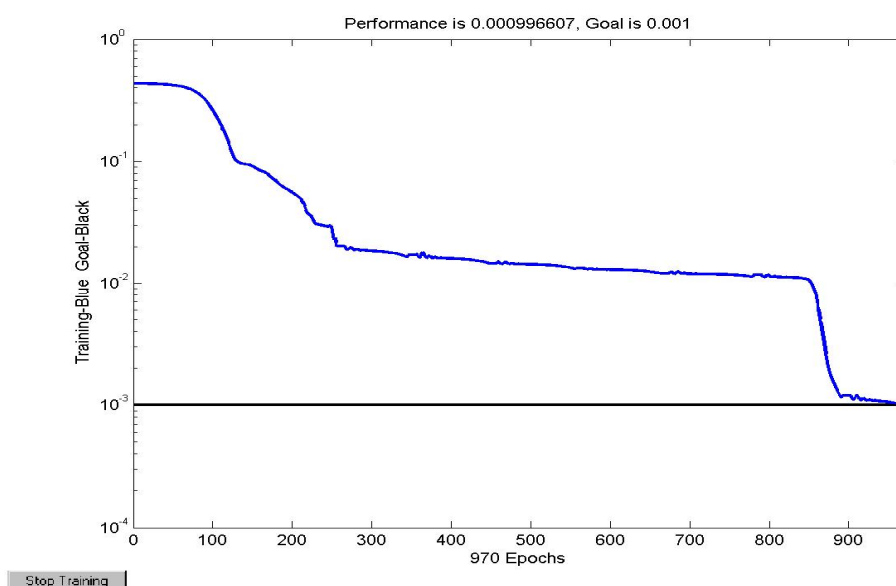
روش کار

یکی از کاربردهای مهم شبکه‌های عصبی، شناسایی الگو (Pattern Recognize) و یا به عبارت دیگر جداسازی داده‌ها یا الگوهای مختلف از همدیگر [۱] می‌باشد. ساختار کلی فرآیند شناسایی الگو، شامل سه مرحله ذیل می‌باشد:

- فرآیند کد گذاری و تبدیل عناصر مورد شناسایی به الگوها و یا بردارهای ورودی بدست آمده از طریق اندازه‌گیریها و مشخصات آنها؛ هر کمیت اندازه‌گیری شده یک ویژگی از عنصر مورد نظر را بیان می‌کند.
 - استخراج مشخصه‌های مهم از روی داده‌های اندازه‌گیری شده و کاهش ابعاد بردار الگو (در اصطلاح به این کار استخراج شاخص گویند) مشخصه‌های یک طبقه‌بندی هستند که در تمامی الگوهای متعلق به آن طبقه خاص مشترک می‌باشند؛ ویژگیهایی از بردار مشخصه که در تمامی طبقات مشترکند حذف می‌شوند.
 - بدست آوردن روندی جهت تصمیم‌گیری بهینه و خودکار برای طبقه‌بندی الگوها.
- با توجه به مراحل فوق، برای پیاده‌سازی فرآیند شناسایی و یا طبقه‌بندی الگوی عناصر با استفاده از شبکه عصبی، در ابتدا باید ویژگیهای قابل تعریف و اندازه‌گیری در یک جدول لیست شده و سپس این جدول به ازای آزمایشهای مختلف تکمیل شود. این آزمایشها بگونه‌ای انتخاب می‌شوند که عناصر مدنظر حداقل در یکی از این آزمایشها شناسایی شوند. در ادامه با استفاده از جدول نتایج آزمایشات، جدول ویژگیها استخراج می‌شود. هر سطر در جدول ویژگیها، مربوط به یک عنصر بوده و هر ستون آن نیز شامل ویژگیهای آن عنصر خواهد بود. در صورتی که یک ویژگی به ازای تمام عناصر مقدار یکسانی داشته باشد از لیست ویژگیها حذف می‌شود.

با توجه به تئوری کار، برای پیاده سازی فرآیند شناسایی و یا طبقه بندی الگوی عناصر با استفاده از شبکه عصبی، ابتداء ویژگی‌های قابل تعریف و اندازه گیری شامل نام عنصر، محصول ناشی از واکنش (n, γ) ، مشخصات مربوط به انرژی و فراوانی گامای ساطع شده، نیمه عمر و سطح مقطع واکنش محصول در یک جدول لیست شده [۲] و سپس این جدول به ازای نمونه های آزمایشی مختلف (مواد با ترکیب عناصری مختلف)، تکمیل شده اند. در انتخاب این آزمایشها بگونه ای عمل شده که عناصر مدنظر حداقل در یکی از این آزمایشها شناسایی شوند. در ادامه همانطوری که در تئوری کار بدان اشاره شد، جدول ویژگیها استخراج شده است. در این جدول هر سطر مربوط به یک عنصر بوده و هر ستون جدول نیز شامل ویژگیهای عناصر می باشند. با تشکیل جدول ویژگیها، عناصر نوعی طبقه بندی دستی نیز شده اند. در ادامه، اطلاعات جمع آوری شده، نرمالیزه و کدگذاری شده اند.

گام بعدی پس از جمع آوری و پردازش اولیه اطلاعات، انتخاب ساختار مناسب برای شبکه عصبی مورد استفاده، می باشد. با توجه به توانمندی شبکه های MLP در شناسایی و طبقه بندی الگوها، در این پژوهش از یک شبکه MLP دولایه با تابع تبدیل Log-sigmoid استفاده شده است. با توجه به نیاز این شبکه به هدف، ویژگی عناصر به عنوان ورودی به شبکه اعمال شده و متناظر با ویژگی هر عنصر، آن عنصر به عنوان هدف به شبکه ارایه شده است. با استفاده از اطلاعات بدست آمده از مراحل قبلی مدل عصبی آموزش داده شده [۳] و در نهایت با استفاده از روشهای مختلف آماری ارزیابی و اعتبار بخشی شده است. برای آموزش مدل عصبی طراحی شده از الگوریتم Levenberg – Marquardt استفاده شده است. شکل ۱، نمودار خطای مدل عصبی را در حین آموزش نشان می دهد.



شکل ۱: نمودار خطای مدل عصبی در حین آموزش

پس از پایان آموزش، جواب مدل عصبی به ازای ورودیهای مختلف با خروجی مورد انتظار مقایسه شده است. نتایج نشان دهنده دقت و تقریب خوب مدل عصبی در شناسایی و طبقه بندی عناصر می باشد. در ادامه با استفاده از این مدل عصبی، نرم افزاری هوشمند جهت آنالیز کمی و کیفی مواد به روش فعالسازی نوترونی طراحی و پیاده سازی شده که در ادامه عملکرد آن بررسی می شود.

آنالیز کیفی به منظور تشخیص عنصر

یکی از مراحل روش فعالسازی نوترونی [۴]، شناسایی عناصر نمونه های مجهول (آنالیز کیفی) با توجه به طیف ثبت شده است. به این منظور، بر اساس متفاوت بودن نیمه عمرها و سطح مقاطع اندرکنش (n, γ) عناصر احتمالی موجود در نمونه ها، پرتودهی در سه نوبت کوتاه مدت، میان مدت و بلند مدت انجام می شود. سپس طیف گامای رادیوایزوتوپ های حاصل با طیف نگاری ثبت شده و قله های انرژی گاما در طیف مشخص می شوند. با شمارش هر قله در مدت زمان شمارش، تعداد شمارش مربوط به هر انرژی ساطع شده به همراه اطلاعات پرتودهی شامل مدت زمان پرتودهی، زمان برگشت از قلب، زمان شروع شمارش و زمان پایان شمارش ثبت می شود. بخش آنالیز کیفی نرم افزار در شکل ۲ نشان داده شده است.

No.	Energy
1	846

Name	Target	Cross Section	Half Time	Percent
Ag109	Ag110g	89	24.6	48.17
Mg26	Mg27	0.0382	567	11.01
Mn55	Mn56	13.3	9295.2	100

شکل ۲: شمای بخش آنالیز کیفی نرم افزار

با وارد نمودن اطلاعات مربوط به انرژی گاما و با توجه به مدت زمان پرتودهی (دسته بندی پرتودهی به سه دسته کوتاه مدت، بلند مدت و میان مدت) در قسمت آنالیز کیفی نرم افزار و کلیک کلید Search، لیستی از عناصر بر اساس قله های مشخص شده در طیف، تعیین می شوند.

برای محدود نمودن لیست عناصر پیش بینی شده، از حاصلضرب کارایی آشکارساز بر حسب انرژی و میزان فراوانی قله های گاما به عنوان معیار بیشینه درصد فراوانی استفاده می شود، بنحویکه قله های گاما با درصد فراوانی بیشتر با این معیار در طیف جستجو شده و در صورتی که این قله ها در طیف موجود باشند، عناصر در لیست نهایی قرار می گیرند. به عبارت دیگر شرط لازم برای وجود عنصر مذکور در ماده، وجود قله گاما با بیشینه درصد فراوانی می باشد. یکی دیگر از شروطی که توسط مدل طراحی شده، چک می شود شرط نیمه عمر است. در این شرط، براساس نیمه عمر محصولات ناشی از واکنش (n, γ) تصمیم گیری می شود. به طور مثال اگر پرتودهی از مرتبه دقیقه باشد، عناصری با نیمه عمر روز نمی توانند در ماده مورد آنالیز (شناسایی) وجود داشته باشند. به این ترتیب لیست پیشنهادی شامل عناصر محدودی خواهد بود که با احتمال بسیار بالایی در ماده مورد آزمایش وجود دارند. عناصر انتخاب شده به ازای هر قله انرژی گاما در پایان آنالیز طیف در گزارشی بیان می شوند. از آنجا که کالیبراسیون سیستم طیف نگاری برای بازه انرژی مورد نظر، دارای خطایی خواهد بود لذا ممکن است چند کانال انرژی جابجایی وجود داشته باشد، لذا برای دنبال کردن عنصر بر اساس انرژی گامای ساطع شده، انرژی مورد نظر براساس انتخاب کاربر با انحراف معیاری حول انرژی گامای داده شده دنبال می شود.

آنالیز کمی برای تعیین در صد وزنی عناصر داخل نمونه ها

در آنالیز کمی فرض بر این است که عناصر داخل نمونه شناخته شده اند و یا در طی آنالیز کیفی شناسایی شده اند. برای تعیین در صد وزنی عناصر داخل نمونه ها، براساس نوع عناصر داخل نمونه، نمونه های استاندارد مربوطه نیز به همراه نمونه، جهت پرتودهی ارسال میشوند. عناصر موجود در نمونه استاندارد، درصد وزنی مشخصی دارند. اگر نمونه ای با جرم m به مدت T ثانیه پرتودهی شود، اکتیویته آن برابر است با [۵]:

$$A(T) = \theta m \frac{N_A}{M} < \delta_i \phi > (1 - e^{-\lambda T}) e^{-\lambda t_d} \quad (1)$$

لذا از رابطه فوق می توان مدت زمان پرتودهی لازم برای رسیدن به اکتیویته مورد نظر را محاسبه نمود:

$$T = \frac{-1}{\lambda} \ln \left[1 - \frac{AM \times 1.8 \times 10^{-3} \times e^{\lambda t_d}}{P \theta \sigma m} \right] \quad (2)$$

در روابط بالا m جرم عنصر به گرم، T مدت زمان پرتودهی به ثانیه، θ درصد فراوانی ایزوتوپ به درصد، σ سطح مقطع واکنش مولد ایزوتوپ با وزن اتمی M برحسب بارن، ϕ شار راکتور به n/cm^2s و N_A عدد آووگادرو، λ ثابت واپاشی بر حسب ثانیه، P توان راکتور مورد استفاده برای پرتودهی برحسب مگا وات (برای راکتور تحقیقاتی تهران)، t_d مدت زمان برگشت نمونه (که بطور معمول ۳۰ ثانیه فرض می شود)، A مقدار اکتیویته مورد نظر برحسب میکرو کوری است.

در قسمت Time Calculation نرم افزار امکان محاسبه سریع زمان پرتو دهی برای عنصر مورد نظر بر اساس فرمول های بیان شده وجود دارد. اطلاعات مربوط به مشخصات عناصر از بانک اطلاعات استخراج شده و سایر اطلاعات مورد نیاز توسط کاربر به نرم افزار ارایه می شود. پس از پایان پرتو دهی، با استفاده از طیف نگاری قله های انرژی گامای ساطع شده و شمارش آنها در بازه زمانی معین، مشخص می شوند. اطلاعات مربوط به قله های انرژی و شمارش به همراه اطلاعات پرتو دهی شامل مدت زمان پرتو دهی، زمان خروج از قلب، زمان شروع شمارش، زمان پایان شمارش و شمارش قله ها ثبت می شوند. شکل ۳ بخش آنالیز کمی نرم افزار را نشان می دهد.



شکل ۳: شمای بخش آنالیز کمی نرم افزار

با توجه به فاصله زمانی بین پایان پرتو دهی و شروع شمارش، تصحیح واپاشی نیاز است. جهت تصحیح واپاشی از رابطه زیر استفاده شده است که $P_{cspm} > P_{cstd}$ برابر است با :

$$P_{cspm} = \frac{P_{smp}}{e^{-\lambda T_d} (e^{-\lambda T_{c1}} - e^{-\lambda T_{c2}})} \quad (3)$$

$$P_{cstd} = \frac{P_{std}}{e^{-\lambda T_d} (e^{-\lambda T_{c1}} - e^{-\lambda T_{c2}})} \quad (4)$$

با توجه به اینکه تعداد شمارش هر قله انرژی با جرم عنصر متناسب است، لذا پس از اعمال تصحیحات زمانی مربوط به واپاشی (از لحظه خروج از قلب تا زمان شمارش و نیز در زمان شمارش)، می توان با استفاده از یک رابطه تناسبی مقدار وزنی هر عنصر نمونه موجود در را بدست آورد.

$$m_{smp} = m_{std} \times \frac{P_{csmp}}{P_{cstd}} \quad (5)$$

لازم بذکر است، برای هر عنصر با بیش از یک قله انرژی گاما، معمولاً قله‌ای که بیشترین شمارش (بیشترین درصد فراوانی گامای ساطع شده به ازای یک واپاشی) را دارد انتخاب می‌شود.

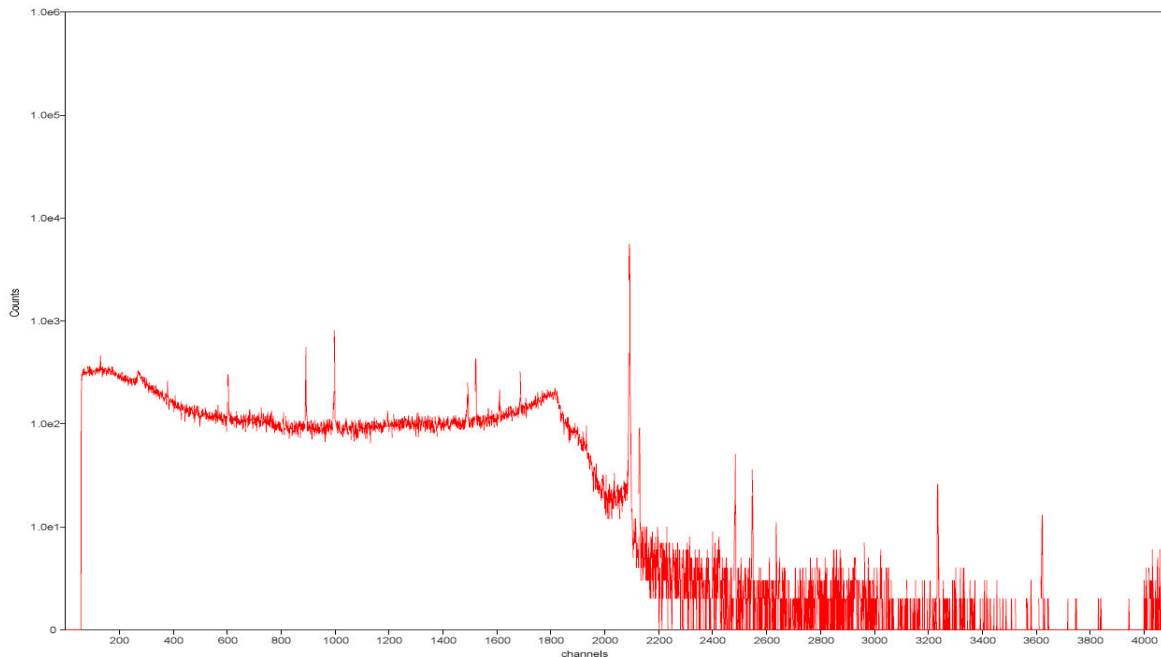
نتایج

در این پژوهش، طیف‌نگاری با یک آشکارساز HPGe نوع P، با حجم 60 cm³ متصل به MCA انجام شده است. قدرت تفکیک این طیف‌نگار در قله 122 keV و 1332 keV بترتیب 0.75 keV و 1.8 keV در FWHM است. قبل از طیف‌گیری کالیبراسیون بازدهی و انرژی با چشمه ¹⁵²Eu انجام گرفته است. برای سنجش دقت نرم افزار، دو نمونه استاندارد SL-1 و SD-N-1/2 به ترتیب به عنوان نمونه استاندارد و مجهول به مدت یک دقیقه پرتودهی شده و به مدت ۵ دقیقه شمارش شده اند. عناصر کوتاه مدت داخل دو نمونه طبق اطلاعات آژانس در جدول (۱) آمده است.

جدول ۱: عناصر کوتاه مدت موجود در نمونه‌های استاندارد SL-1 و SD-N-1/2 با ۹۵٪ قطعیت

مقدار در SL-1 (ppm)	مقدار در SD-N-1 (ppm)	انرژی گاما (keV)	نام عنصر
30	72.2	833.6 1039	Copper (Cu), Cu66
170	77.7	1434	Vanadium (V), V52
-----	2700	320 928.5	Titanium (Ti), Ti51
89000	37500	1778	Aluminium (Al), Al28
3460	777	846 1811 2112	Manganese (Mn), Mn56
10	9040	1642 2167	Chlorine (Cl), Cl38
1720	10400	1368 2754	Sodium (Na), Na24

نمونه طیف عناصر کوتاه مدت و میان مدت در نمونه SD-N-1/2 در شکل ۵ نشان داده شده است.



شکل ۵: طیف مربوط به SD-N-1/2 در ۱ دقیقه پرتودهی و مدت زمان ۵ دقیقه شمارش

با توجه به طیف مشاهده شده انرژی‌های 1432, 847, 2171, 1640, 1779, 2762, 1367, 320 با واریانس انرژی ۵٪ به عنوان ورودی به نرم افزار ارایه شده است (سایر قله‌ها مربوط به انرژی قله‌های تک فراری، دو فراری و تجمعی هستند). نرم افزارهای متداول، به ازای قله‌های انرژی فوق، فهرستی از عناصر را لیست می‌کنند که کاربر بایستی با استفاده از تجربیات خود تصمیم‌گیری کند که این امر مستلزم زمان بسیار و دقت پایینی می‌باشد. در این نرم افزار بر اساس انرژی‌های وارد شده در بخش آنالیز میان مدت، عناصری پیشنهاد می‌شود. جدول ۲ این عناصر را نشان می‌دهد.

جدول ۲: عناصر پیشنهاد شده توسط نرم افزار بر اساس انرژی‌های گامای وارد شده

عناصر پیشنهادی	عناصر انتخابی	قله گاما
Ti51	Ti51	320
Na24	Na24	2762
Na24	Na24	1367
Cl38	Cl38	1640
Al28	Al28	1779
Cl38	Cl38	2171
Mn56, Mg27	Mn56	847
V51	V51	1432

پس از مشخص شدن عناصر موجود در مواد بایستی میزان عناصر نیز مشخص شود. جرم عناصر نمونه مجهول براساس جرم عناصر نمونه استاندارد، مدت زمان پرتودهی، مدت زمان شمارش و سایر اطلاعات قابل محاسبه می‌باشد. در جدول ۳ یک مثال عملی جهت تعیین جرم عناصر در نمونه مجهول نشان داده شده



است. در مقایسه با مقادیر داده شده برای استاندارد در جدول ۲ دیده می شود که مقادیر بدست آمده در محدوده معین شده استاندارد قرار دارند.

جدول ۳: تعیین جرم عناصر در نمونه مجهول براساس نمونه استاندارد و اطلاعات زمان پرتودهی (توسط نرم افزار)

عصر	جرم عنصر در نمونه استاندارد SD-N-1(ppm)	جرم عنصر در نمونه مجهول SL-1(ppm)
Vanadium (V), V52	77.7	172.5
Aluminium (Al), Al28	37500	88170
Manganese (Mn), Mn56	777	3390
Sodium (Na), Na24	10400	1642

بحث و نتیجه گیری

در این پژوهش از یک مدل هوشمند برای طراحی و پیاده سازی نرم افزاری جهت آنالیز کمی و کیفی عناصر موجود در نمونه های مختلف به روش فعالسازی نوترونی استفاده شده است. این مدل با استفاده از شبکه عصبی چندین لایه (MLP) پیاده سازی شده است. با توجه به توانمندی این نوع از شبکه های عصبی در تفکیک و طبقه بندی الگوها، نرم افزار پیاده سازی شده دارای توانمندی بسیار مناسبی در آنالیز کیفی و کمی مواد می باشد. به منظور ارزیابی نرم افزار، دو نمونه استاندارد SL-1 و SD-N-1/2 به ترتیب به عنوان نمونه استاندارد و مجهول پرتودهی شده و مورد ارزیابی قرار گرفته اند که نتایج حاصل نشان از دقت و سرعت مطلوب نرم افزار در آنالیز کمی و کیفی مواد می باشد. پیش بینی های این نرم افزار حتی به ازای داده های ورودی ناقص و یا نویزی که در اثر کالیبره نبودن دستگاههای طیف نگار می تواند اتفاق بیفتد، دقت قابل قبولی دارند.

مراجع

- 1- Y.H. Pao, "Adaptive Pattern Recognition and Neural Networks", Addison- Wesley, 1989.
- 2- Glascock, M.D. (1996), "Tables for Neutron Activation Analysis". The University of Missouri Research Reactor Center: Columbia, MO.
- 3- M.H. Hagan and Menhaj, "Training Feedforward Networks with the Marquardt Algorithm", IEEE Transactions on Neural Networks, Vol. 5, No.6, November 1994.
- 4- De Soete, D., R. Gijbels, and J. Hoste (1972), "Neutron Activation Analysis". John Wiley and Sons: New York, NY.
- 5- N. Tsoulfanidis (1995), " Measurement and Detection of Radiation", Taylor & Francis.