

**Akademia Górniczo - Hutnicza**  
im. Stanisława Staszica w Krakowie

**Wydział Fizyki i Techniki Jądrowej**

**Praca magisterska**

**Sebastian Bożek**

kierunek studiów: fizyka techniczna

specjalność: fizyka komputerowa

**Oznaczanie składu gamma  
promieniotwórczych izotopów metodą  
sztucznych sieci neuronowych**

Opiekun: dr inż. Zdzisław Stęgowski

**KRAKÓW 2003**

# TEMATYKA PRACY MAGISTERSKIEJ I PRAKTYKI DYPLOMOWEJ

studenta V roku studiów  
kierunku fizyka techniczna, specjalności fizyka komputerowa  
**Sebastiana Bożka**

Temat pracy magisterskiej:

## **Oznaczanie składu gamma promieniotwórczych izotopów metodą sztucznych sieci neuronowych**

Opiekun pracy: **dr inż. Zdzisław Stęgowski**

Recenzent pracy: **dr inż. Mirosław Zimnoch**

Miejsce praktyki dyplomowej: Wydział Fizyki i Techniki Jądrowej, AGH

Program pracy magisterskiej i praktyki dyplomowej:

1. Omówienie realizacji pracy magisterskiej z promotorem
2. Zapoznanie się z pakietem do tworzenia sieci neuronowych programu Matlab
3. Praktyka dyplomowa
  - (a) zapoznanie się z problemami dotyczącymi pomiarów i analizy widm
  - (b) opracowanie metody przekształcania widm celem eliminacji efektów niepożądanych
  - (c) opracowanie modelu sieci neuronowej rozpoznającej skład widm
4. Opracowanie wyników
5. Analiza wyników i zatwierdzenie ich przez promotora
6. Opracowanie edytorskie pracy

**Merytoryczna ocena pracy przez opiekuna:**

.....  
.....  
.....  
.....  
.....  
.....  
.....  
.....  
.....  
.....  
.....  
.....  
.....  
.....

**Końcowa ocena pracy przez opiekuna:.....**

Data:.....  
.....  
(podpis opiekuna)

**Merytoryczna ocena pracy przez recenzenta:**

.....  
.....  
.....  
.....  
.....  
.....  
.....  
.....  
.....  
.....  
.....  
.....  
.....  
.....

**Końcowa ocena pracy przez recenzenta:.....**

Data:.....  
.....  
(podpis recenzenta)

*Składam serdeczne podziękowania Panu  
dr inż. Zdzisławowi Stęgowskiemu za cenne wskazówki  
i pomoc przy pisaniu tej pracy.*

# Spis treści

<b>1</b>	<b>Wprowadzenie w tematykę pracy</b>	<b>11</b>
1.1	Cel pracy . . . . .	11
1.2	Zastosowanie pracy . . . . .	13
1.3	Nauka przez doświadczenie . . . . .	14
<b>2</b>	<b>Neuron</b>	<b>15</b>
2.1	Neuron biologiczny . . . . .	15
2.2	Sztuczny neuron . . . . .	16
2.3	Neuron nieliniowy . . . . .	17
2.4	Funkcja aktywacji . . . . .	18
2.5	Zapis symboliczny . . . . .	19
<b>3</b>	<b>Sieć neuronowa</b>	<b>20</b>
3.1	Sieć jednowarstwowa . . . . .	20
3.2	Sieć wielowarstwowa . . . . .	20
3.3	Sygnal wyjściowy sieci . . . . .	21
<b>4</b>	<b>Uczenie sieci neuronowej</b>	<b>25</b>
4.1	Reguła delta . . . . .	26
4.2	Przyspieszanie procesu uczenia . . . . .	28
4.2.1	Metoda momentum . . . . .	28
4.2.2	Metoda zmiennego współczynnika $\eta$ . . . . .	29
4.2.3	Metoda Fletchera-Reevesa . . . . .	29
<b>5</b>	<b>Sieć rozpoznająca skład widma</b>	<b>30</b>
5.1	Wektorowy opis widma . . . . .	30
5.2	Architektura sieci . . . . .	31
5.3	Ciąg uczący . . . . .	32
5.4	Ciąg testujący . . . . .	33
<b>6</b>	<b>Wyniki dla widm generowanych</b>	<b>34</b>
6.1	Metoda momentum . . . . .	34
6.2	Metoda zmiennego współczynnika $\eta$ . . . . .	36
6.3	Metoda Fletchera-Reevesa . . . . .	37
<b>7</b>	<b>Widma laboratoryjne</b>	<b>39</b>

<b>8</b>	<b>Analiza widm laboratoryjnych</b>	<b>41</b>
8.1	Lokalizacja pików . . . . .	41
8.2	Kalibracja . . . . .	44
8.2.1	Skalowanie . . . . .	45
8.2.2	Stabilizacja . . . . .	49
8.3	Wyznaczenie składu widma . . . . .	51
<b>9</b>	<b>Wyniki</b>	<b>53</b>
9.1	Wyznaczenie składu próbki . . . . .	53
9.2	Wyniki dla badanych próbek . . . . .	53
<b>10</b>	<b>Wnioski</b>	<b>58</b>
<b>A</b>	<b>Detektory promieniowania jądrowego</b>	<b>59</b>
A.1	Licznik scyntylicyjny . . . . .	59
A.2	Wady liczników scyntylicyjnych . . . . .	62
A.3	Detektory półprzewodnikowe . . . . .	64
<b>B</b>	<b>Opis programu WIDMOWID</b>	<b>66</b>
B.1	Nowy projekt . . . . .	66
B.2	Ciąg uczący . . . . .	68
B.3	Nowa sieć . . . . .	69
B.4	Testowanie sieci . . . . .	69
B.5	Skład widma . . . . .	69
B.6	Dostosowanie widma . . . . .	70
B.7	Problem lokalizacji pików . . . . .	70

## Spis tabel

1.1	Wielkości charakterystyczne zastosowanych izotopów . . . . .	11
6.1	Błąd średniokwadratowy - metoda momentum . . . . .	34
6.2	Porównanie składu widma wyznaczonego przez sieć z wartościami teoretycznymi - metoda momentum . . . . .	35
6.3	Błąd średniokwadratowy - metoda zmiennego współczynnika $\eta$ . . . . .	36
6.4	Porównanie składu widma wyznaczonego przez sieć z wartościami teoretycznymi - metoda zmiennego współczynnika $\eta$ . . . . .	36
6.5	Błąd średniokwadratowy - metoda Fletchera-Reevesa . . . . .	37
6.6	Porównanie składu widma wyznaczonego przez sieć z wartościami teoretycznymi - metoda Fletchera-Reevesa . . . . .	38
8.1	Procentowe zawartości poszczególnych izotopów w widmach - porównanie wartości wyznaczonych detektorem półprzewodnikowym z wartościami wyznaczonymi przez program na podstawie analizy widm z licznika scyntylicyjnego . . . . .	52
9.1	Wartości udziałów procentowych poszczególnych izotopów w wpróbkach wyznaczone detektorem półprzewodnikowym . . . . .	54
9.2	Wartości udziałów procentowych poszczególnych izotopów w próbkach wyznaczone przez program WIDMOWID w oparciu o widma zmierzone licznikiem scyntylicyjnym . . . . .	54
9.3	Aktywności wyznaczone detektorem półprzewodnikowym . . . . .	56
9.4	Aktywności wyznaczone przez program na podstawie widm zmierzonych licznikiem scyntylicyjnym . . . . .	56
B.1	Wartości w pliku zawierającym ustawienia przeszukiwania widma . . . . .	67

## Spis rysunków

1.1	Przykładowe widma próbek z podanym składem izotopowym . . . . .	12
1.2	Idea wyznaczania współczynnika dyfuzji składników stali manganowo-chromowej	13
2.1	Uproszczony schemat neuronu biologicznego . . . . .	15
2.2	Uproszczony schemat sztucznego neuronu . . . . .	16
2.3	Schemat sztucznego neuronu z wagami . . . . .	16
2.4	Ogólny schemat sztucznego neuronu . . . . .	17
2.5	Funkcje aktywacji neuronu . . . . .	18
2.6	Symbole neuronów . . . . .	19
3.7	Schemat prostej sieci jednowarstwowej . . . . .	20
3.8	Schemat prostej sieci dwuwarstwowej . . . . .	21
3.9	Architektura sieci rozpoznającej litery . . . . .	23
4.1	Ideowy schemat uczenia neuronu . . . . .	26
4.2	Minimalizacja funkcji błędu . . . . .	27
5.1	Schemat sieci rozpoznającej skład widma . . . . .	31
5.2	Baza elementów ciągu uczącego . . . . .	32
5.3	Elementy bazowe oraz ich kombinacja . . . . .	32
6.1	Minimalizacja funkcji błędu - metoda momentum . . . . .	35
6.2	Minimalizacja funkcji błędu - metoda zmiennego współczynnika $\eta$ . . . . .	37
6.3	Minimalizacja funkcji błędu - metoda Fletchera-Reevesa . . . . .	38
7.1	Efekt „pływania”. Piki z różnych pomiarów nie pokrywają się . . . . .	39
7.2	Widmo podstawowe . . . . .	40
8.1	Podział widma . . . . .	41
8.2	Lokalizacja pików . . . . .	42
8.3	„Fałszywy” pik . . . . .	44
8.4	Widma podobnych próbek zmierzone licznikami o różnej liczbie kanałów . . . . .	45
8.5	Wyznaczenie stosunku części zerowej do części właściwej . . . . .	45
8.6	Skrócenie widma . . . . .	46
8.7	Przeskalowanie widma . . . . .	47
8.8	Podział liczby zliczeń z danego kanału pomiędzy dwie energie . . . . .	48
8.9	Widmo energii . . . . .	49
8.10	Stabilizacja widma . . . . .	50
8.11	Widmo przed i po stabilizacji . . . . .	51
8.12	Podział widma . . . . .	51
9.1	Widma badanych próbek . . . . .	55
9.2	Rozkład koncentracji znacznika wzdłuż osi walca . . . . .	57
A.1	Licznik scyntylicyjny . . . . .	59
A.2	Pasmowa teoria półprzewodnictwa . . . . .	60



A.3	Mechanizm powstawania impulsów świetlnych w scyntylatorze . . . . .	61
A.4	Donorowy poziom talu . . . . .	62
A.5	Szerokość połówkowa piku . . . . .	63
A.6	Złącze p-n spolaryzowane zaporowo - element czuły detektora półprzewodnikowego	65
B.1	Podział widma . . . . .	67

## Wstęp

Praca ta została poświęcona problemowi określania składu izotopowego próbek na podstawie ich widm promieniowania gamma zmierzonych licznikiem scyntylacyjnym. Określanie stężenia substancji promieniotwórczej w oparciu o widmo promieniowania znajduje zastosowanie w wielu dziedzinach nauki i techniki - wszędzie tam, gdzie stosowane są znaczniki izotopowe.

W niniejszej pracy do rozwiązania problemu interpretacji widm zastosowane zostały sieci neuronowe. Obecnie, ze względu na swoją uniwersalność i szybkość działania, są one szeroko wykorzystywane w wielu dziedzinach. Najlepiej sprawdzają w sytuacjach, w których nie ma możliwości zastosowania wzorów i algorytmów. Wiele spośród takich problemów dotyczy rozpoznawania i klasyfikacji obrazów. Jednym z tego typu zagadnień jest interpretacja widma promieniowania.

W pracy przedstawione zostały podstawy teoretyczne dotyczące sieci neuronowych, problemów związanych z analizą widm oraz wyniki eksperymentu, którego celem było stworzenie sieci neuronowej zdolnej do prawidłowej interpretacji widm.

# 1 Wprowadzenie w tematykę pracy

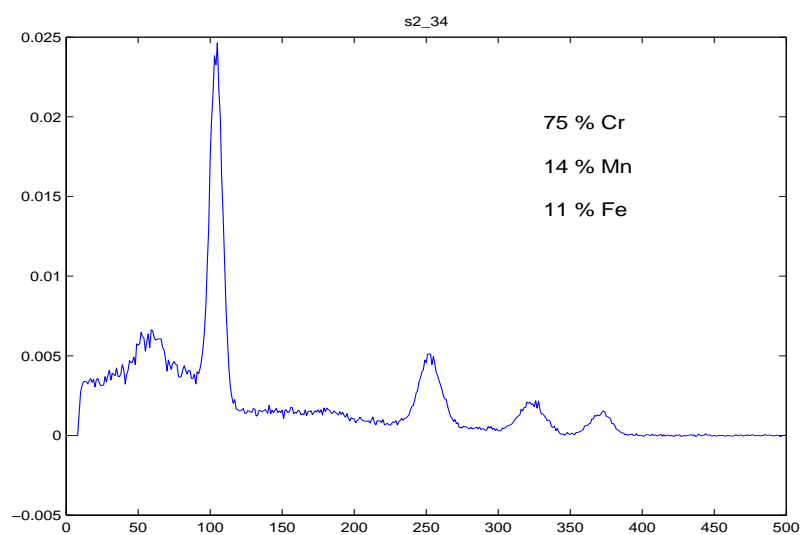
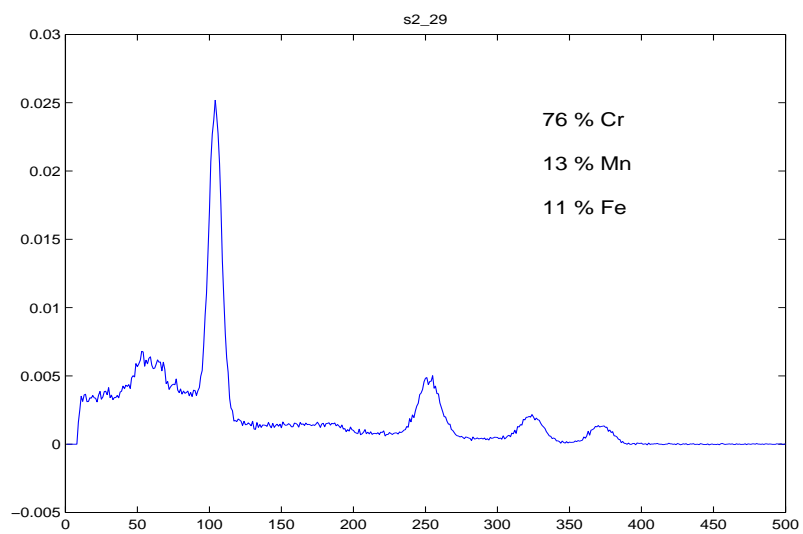
## 1.1 Cel pracy

Celem pracy jest stworzenie metody umożliwiającej wyznaczanie ilościowych stosunków gamma promieniotwórczych izotopów w badanej próbce, na podstawie jej widma promieniowania zmierzonego licznikiem scyntylicyjnym. Obecnie dostępne są liczniki półprzewodnikowe, których zdolność rozdzielcza pozwala na bezpośrednie wyznaczenie ilości danego izotopu na podstawie widma próbki. Liczniki te są jednak bardzo drogie w stosunku do powszechnie używanych liczników scyntylicyjnych. Zdolność rozdzielcza tych drugich jest, niestety, znacznie gorsza, co w większości wypadków uniemożliwia bezpośrednie oznaczanie składu próbki na podstawie zmierzonego widma.

W pracy zostały wykorzystane widma próbek zawierających sztuczne gamma promieniotwórcze izotopy  $Cr^{51}$ ,  $Mn^{54}$  oraz  $Fe^{59}$ , otrzymane metodą aktywacji neutronowej. W tabeli 1.1 zamieszczone zostały ich wielkości charakterystyczne: energie kwantów gamma oraz czasy połowicznego rozpadu. Wykresy na rysunku ref2wykresy poniżej przedstawiają przykładowe widma próbek zawierających te izotopy, z podanym ich składem procentowym.

Tabela 1.1: Wielkości charakterystyczne zastosowanych izotopów

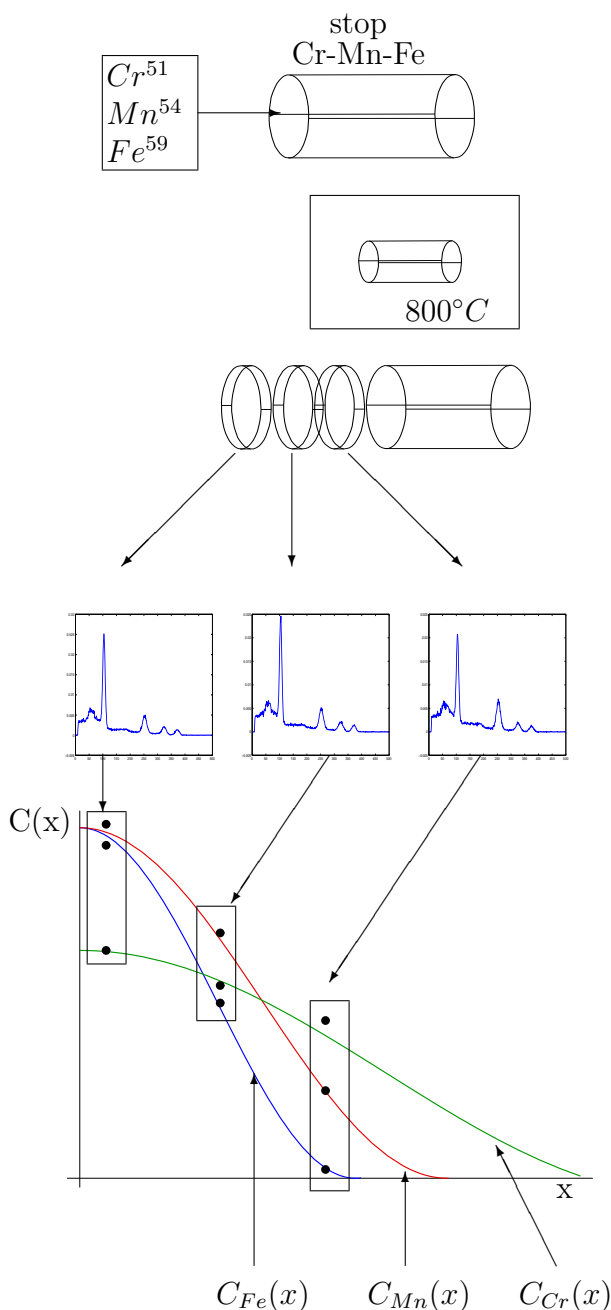
izotop	$E_\gamma [keV]$	$T_{1/2} [dni]$
$Cr^{51}$	320	27.7
$Mn^{54}$	835	312.2
$Fe^{59}$	1099 1292	44.6



Rysunek 1.1: Przykładowe widma próbek z podanym składem izotopowym

## 1.2 Zastosowanie pracy

Widma laboratoryjne wykorzystane w tej pracy zostały zmierzone w konkretnym celu, jakim jest wyznaczenie współczynnika dyfuzji atomów chromu, manganu i żelaza, w stali chromowo-manganowej. Eksperyment przebiegał w następujący sposób:



Rysunek 1.2: Idea wyznaczania współczynnika dyfuzji składników stali manganowo-chromowej

Izotopy  $Cr^{51}$ ,  $Mn^{54}$  i  $Fe^{59}$  nakładane były w postaci cienkiej warstwy na jedną z podstaw walca odlanego ze stopu Cr-Mn-Fe. Walec ten był następnie umieszczany w piecu o temperaturze  $800^{\circ}C$  na pewien czas, w trakcie którego aktywowane izotopy dyfundowały w bryłę stopu.

Po wyciągnięciu z pieca walec był dzielony na cienkie warstewki, które jako próbki umieszczane były w aparaturze licznika scyntylicyjnego.

Zmierzone widmo promieniowania gamma pochodziło od aktywowanych izotopów, które w wyniku dyfuzji znalazły się w obszarach próbek.

Określenie dla każdej z próbek ilości i składu procentowego znaczników izotopowych pozwala na wyznaczenie funkcji koncentracji znaczników w badanym fragmencie stopu.

### 1.3 Nauka przez doświadczenie

Wyznaczenie składu izotopowego próbki na podstawie widma promieniowania należy do pewnej klasy zagadnień, których rozwiązanie polega na prawidłowym rozpoznaniu. Istnieją dwie metody podejścia do tego typu problemów: poprzez znajomość i zastosowanie pewnych reguł lub w oparciu o doświadczenie.

Stosując pierwszą metodę, procentową zawartość każdego z izotopów można próbować określić na podstawie znajomości pól pod krzywymi pików promieniowania, którego kwanty pochodzą od danego izotopu. Nie jest to zadanie proste, w szczególności gdy pików jest dużo i zachodzą one na siebie.

W metodzie nauki przez doświadczenie znajomość reguł nie jest konieczna. W celu jej zilustrowania posłużę się następującym przykładem: student kursu fotograficznego robi zdjęcia pod okiem doświadczonego fotografa, który za każdym razem podpowiada mu, jakie parametry aparatu należy ustawić, aby uzyskać właściwy efekt. Po wykonaniu tysiąca fotografii z pomocą nauczyciela, student prawdopodobnie sam będzie w stanie dobrać właściwe lub zbliżone do właściwych parametry, wykonując samodzielnie kolejną - tysiąc pierwszą fotografię. Prawdopodobnie nie będzie umiał uzasadnić, dlaczego właśnie takie parametry należy w danej sytuacji ustawić. Po prostu tak ma być.

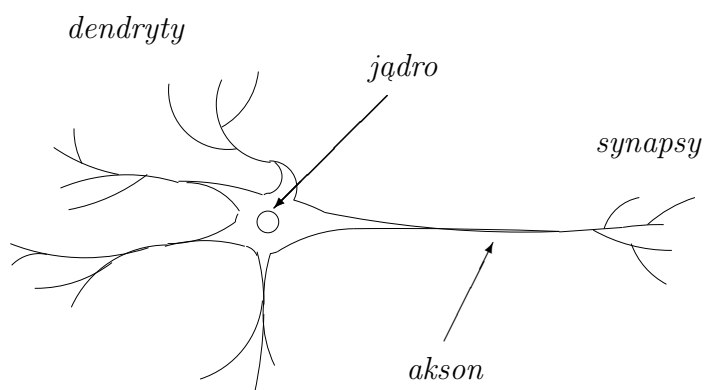
Stosując to rozumowanie do problemu rozpoznawania składu próbek na podstawie widma, nasuwa się następująca propozycja: student kursu fizyki jądrowej, który zapamięta tysiąc widm wraz z podanym składem procentowym, takich jak na ilustracji 1.1, skład procentowy tysiąc pierwszego widma będzie miał szanse „zgadnąć”.

Nauka przez doświadczenie jest de facto uczeniem się danych. Z powyższych rozważań wynika, że mózg radzi sobie z tym bardzo dobrze. Powstaje pytanie, czy maszyna, taka jak komputer, także może nauczyć się danych i dzięki temu np. rozpoznawać obrazy na podstawie niewielkiego ich fragmentu. Skoro mózg potrafi uczyć się danych, to należy stworzyć coś takiego, co w działaniu będzie go naśladować. Mózg zbudowany jest z komórek nerwowych zwanych neuronami, które wspólnie tworzą skomplikowaną sieć. Stąd wzięła się koncepcja sztucznych sieci neuronowych, która stanowi podstawę prezentowanej tu metody oznaczania składu próbek.

## 2 Neuron

### 2.1 Neuron biologiczny

Podstawowym elementem biologicznej sieci neuronowej jest komórka nerwowa zwana w skrócie neuronem. Podobnie jak każda żywa komórka, neuron posiada ciało oraz jądro. Cechą charakterystyczną neuronu jest duża liczba wypustek wyrastających z ciała komórki. Małe wypustki, zwane dendrytami, przekazują do komórki impulsy pochodzące od innych komórek nerwowych. Jedną z wypustek, zwana aksonem, jest znacznie większa od pozostałych. Przenosi ona sygnał wyjściowy neuronu powstały wskutek impulsów wejściowych. Akson neuronu rozgałęzia się na końcu na szereg synaps, które łączą się z dendrytami dalszych neuronów. W ten sposób odpowiedź neuronu jest przekazywana dalszym elementom sieci.



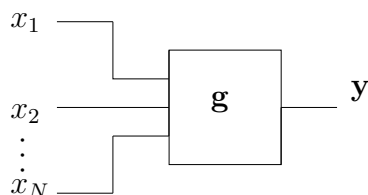
Rysunek 2.1: Uproszczony schemat neuronu biologicznego

Wielkość impulsu przekazana komórce przez dendryt zależy od wielkości sygnału pojawiającego się na odpowiadającej mu synapsie, jak również od właściwości samego złącza dendryt-synapsa zwanego złączem synaptycznym. Decyduje ona o tym, jak bardzo impuls przychodzący z synapsy zostanie zwiększony lub pomniejszony. Właściwość tę możemy w skrócie nazwać czułością danego neuronu na sygnał pochodzący od innego neuronu.

## 2.2 Sztuczny neuron

Podobnie jak neuron biologiczny, sztuczny model neuronu posiada wiele wejść i jedno wyjście. Sygnał pojawiający się na wyjściu neuronu jako odpowiedź na  $N$  impulsów wejściowych można przedstawić w postaci funkcji

$$y = g(x_1, x_2, \dots, x_N) \quad (2.1)$$



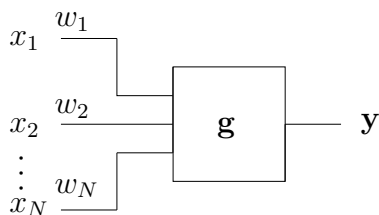
Rysunek 2.2: Uproszczony schemat sztucznego neuronu

Najprostszą funkcją odpowiedzi neuronu jest suma sygnałów wejściowych

$$y = g(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sum_{i=1}^N x_i \quad (2.2)$$

Aby zbliżyć się trochę bardziej do modelu biologicznego, impulsy na wejściach mnożone są przez odpowiadające tym wejściom wagi. Odpowiada to wspomnianej wcześniej czułości neuronu na impulsy docierające do poszczególnych wejść.

$$y = g(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sum_{i=1}^N w_i x_i \quad (2.3)$$



Rysunek 2.3: Schemat sztucznego neuronu z wagami

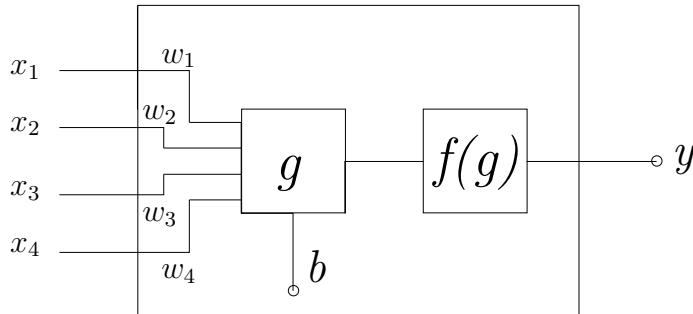


## 2.3 Neuron nieliniowy

Powyższy model opisuje najprostszy typ neuronu, jakim jest neuron liniowy. Ogólny schemat odpowiedzi neuronu możemy przedstawić w postaci

$$g(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sum_{i=1}^N w_i x_i + b \quad (2.4)$$
$$y = f(g) ,$$

gdzie  $f$  jest pewną charakterystyczną funkcją przejścia, zwaną funkcją aktywacji, natomiast  $b$  jest to tzw. próg aktywacji.



Rysunek 2.4: Ogólny schemat sztucznego neuronu

$$y = f\left(\sum w_i x_i + b\right)$$

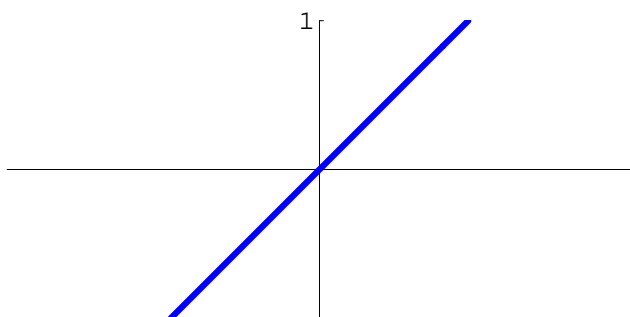
$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} \quad \mathbf{w} = \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \\ w_4 \end{bmatrix}$$

$$\sum w_i x_i + b = [w_1 \quad w_2 \quad w_3 \quad w_4] \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} + b = \mathbf{w}^T \mathbf{x} + b$$

$$y = f(\mathbf{w}^T \mathbf{x} + b) .$$

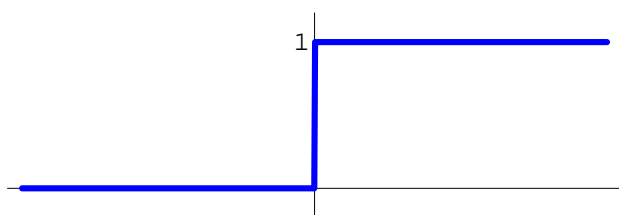
## 2.4 Funkcja aktywacji

Funkcja aktywacji określa typ neuronu. Wyróżniamy neurony liniowe, sigmoidalne oraz perceptrony.



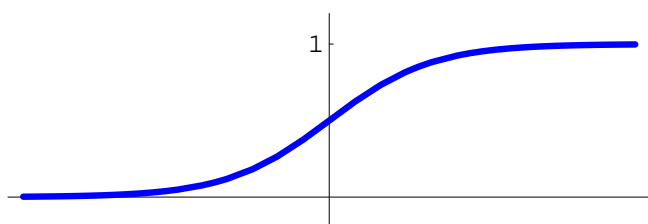
**neuron liniowy**  
funkcja liniowa

$$f(g) = g$$



**perceptron**  
funkcja skoku jednostkowego

$$f(g) = \begin{cases} 1 & \text{gdy } g > 0 \\ 0 & \text{gdy } g \leq 0 \end{cases}$$



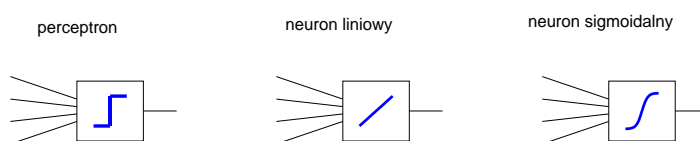
**neuron sigmoidalny**  
funkcja sigmoidalna

$$f(g) = \frac{1}{1 + \lambda \exp(-g)}$$

Rysunek 2.5: Funkcje aktywacji neuronu

## 2.5 Zapis symboliczny

W trakcie procesu uczenia neuronów, który zostanie opisany w dalszej części, wartości wag i progów zmieniają się. Nie zmienia się natomiast liczba wejść neuronu oraz funkcja aktywacji określająca jego rodzaj. Szczegółowy schemat neuronu, przedstawiony na rysunku 2.4 na stronie 17, można zatem zastąpić jednym z trzech możliwych symbolicznych „klocków”.



Rysunek 2.6: Symbole neuronów

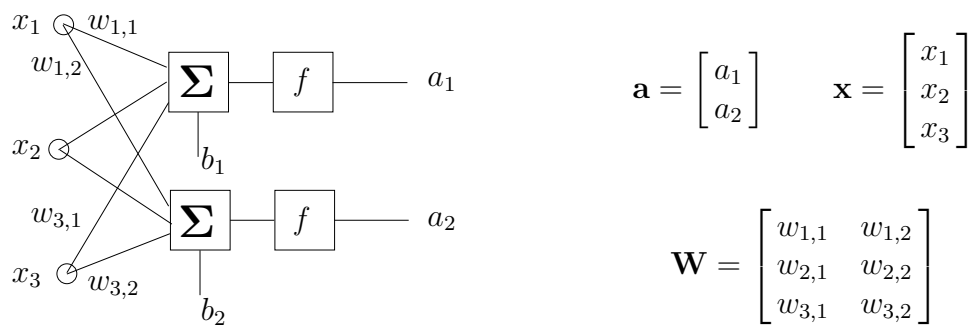
Do pracy dołączony został pakiet funkcji programu Matlab, umożliwiających szybkie tworzenie schematów sieci neuronowych.

### 3 Sieć neuronowa

Sieć neuronowa jest zbiorem neuronów. Wyróżniamy sieci jedno i wielowarstwowe. Neuronów w sieciach jednowarstwowych połączone są ze sobą przez wspólne wejścia. W sieciach wielowarstwowych sygnał wyjściowy jednej warstwy trafia na wejście warstwy kolejnej.

#### 3.1 Sieć jednowarstwowa

Rysunek 3.7 przedstawia schemat prostej sieci jednowarstwowej składającej się z dwóch neuronów.



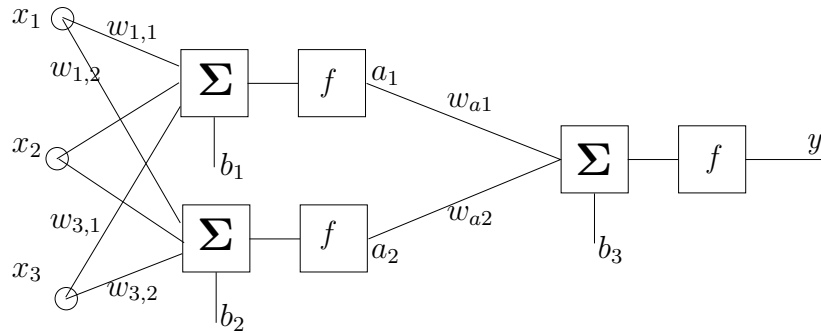
Rysunek 3.7: Schemat prostej sieci jednowarstwowej

$$\mathbf{a} = f(\mathbf{W}^T \mathbf{x} + \mathbf{b})$$

$$\begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = f \left( \begin{bmatrix} w_{1,1} & w_{2,1} & w_{3,1} \\ w_{1,2} & w_{2,2} & w_{3,2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} \right) \quad (3.5)$$

#### 3.2 Sieć wielowarstwowa

Dołączając do poprzedniej sieci jeden neuron, na którego wejście trafiają sygnały wyjściowe neuronów tej sieci, otrzymujemy prostą sieć dwuwarstwową (rys. 3.8).



Rysunek 3.8: Schemat prostej sieci dwuwarstwowej

$$y = f \left( [w_{a1} \quad w_{a2}] \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} + b_3 \right) \quad (3.6)$$

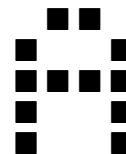
### 3.3 Sygnał wyjściowy sieci

Sieci neuronowe najczęściej są stosowane do rozpoznawania lub klasyfikacji sygnałów wejściowych. W przypadku rozpoznawania, jeżeli sieć na dany sygnał wejściowy  $\mathbf{x}_1$  odpowiada sygnałem  $\mathbf{y}_1$ , to oczekujemy, że na sygnał  $\mathbf{x}_2$  zbliżony do  $\mathbf{x}_1$  sieć odpowie sygnałem  $\mathbf{y}_2$  zbliżonym do  $\mathbf{y}_1$ . Korzystając z własności iloczynu skalarnego wektorów, możemy to zapisać jako

$$\mathbf{x}_1 \circ \mathbf{x}_2 \approx 1 \Leftrightarrow \mathbf{y}_1 \circ \mathbf{y}_2 \approx 1 .$$

W przypadku klasyfikacji rolą sieci jest przydzielenie obiektu, przedstawionego jej w postaci sygnału wejściowego do jednej z grup. Przykładem takiej sieci może być np. sieć rozpoznająca litery alfabetu [4]. Każdy obraz bitowy sieć próbuje zinterpretować jako jedną z 24 liter. Każdą z liter możemy przedstawić w postaci macierzy bitowej o rozmiarach np.  $5 \times 4$ . Litera A ma wtedy postać:

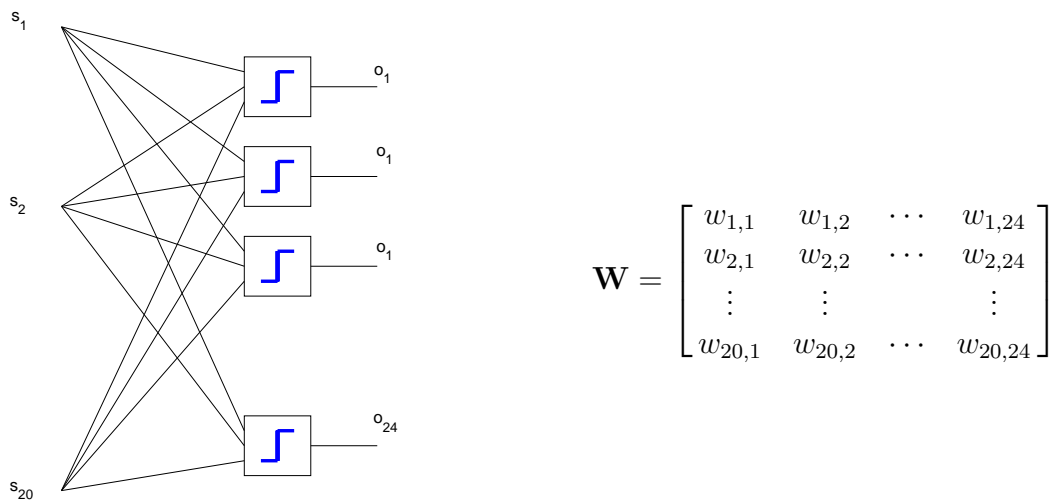
$$A_{mac} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$



Aby obraz mógł być przedstawiony sieci jako sygnał wejściowy, macierz jest zamieniana na wektor, np. przez połączenie wierszy

$$A_{wek} = [0 \ 1 \ 1 \ 0 \ 1 \ 0 \ 0 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 0 \ 0 \ 1 \ 1 \ 0 \ 0 \ 1]^T$$





Rysunek 3.9: Architektura sieci rozpoznającej litery

Odpowiedzi sieci możemy zapisać jako

$$\begin{cases} A_{odp} = f(\mathbf{W}^T A_{wek} + \mathbf{b}) \\ B_{odp} = f(\mathbf{W}^T B_{wek} + \mathbf{b}) \\ \vdots \\ Z_{odp} = f(\mathbf{W}^T Z_{wek} + \mathbf{b}) \end{cases} \quad (3.7)$$

gdzie  $f$  jest w tym wypadku funkcją perceptronową (sekcja 2.5).

Działanie powyższej sieci perceptronowej polega na tym, że każdy z neuronów rozpoznaje czy dana litera jest tą jemu przypisaną. Odpowiedź perceptronu to 1 lub 0 - *tak* lub *nie*: *tak*, jeżeli suma sygnałów wejściowych mnożonych przez odpowiadające im wagi jest większa od progu aktywacji (np. 0.9), *nie* w przeciwnym wypadku.

Innym rodzajem sieci neuronowej jest sieć składająca się z neuronów sigmoidalnych lub liniowych. Odpowiedź każdego z takich neuronów określa, jak bardzo dany sygnał wejściowy jest podobny do tego, który jemu został przyporządkowany. Neuron sigmoidalny, któremu przyporządkowana została litera B, na jej obraz może odpowiedzieć sygnałem np. 0.95. Oznaczałoby to, że rozpoznawana litera to na 95% B. Z kolei neuron rozpoznający literę D również może zostać „pobudzony” przez obraz litery B podobnej do D,

i odpowiedzieć np. sygnałem 0.3.

Przy ustalonym rodzaju neuronów (funkcji  $f$ ) odpowiedź sieci na dany sygnał wejściowy  $\mathbf{x}_1$  zależy od macierzy wag  $W$ .

$$\mathbf{y}(\mathbf{x}_1) = f(\mathbf{W}^T \mathbf{x}_1) \quad (3.8)$$

Chcemy, aby odpowiedzią na sygnał  $\mathbf{x}_1$  był sygnał  $\mathbf{y}_1$ , na sygnał  $\mathbf{x}_2$   $\mathbf{y}_2$ , na  $\mathbf{x}_k$   $\mathbf{y}_k$ . Czyli

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{y}(\mathbf{x}_1) = f(\mathbf{W}^T \mathbf{x}_1) = \mathbf{y}_1 \\ \mathbf{y}(\mathbf{x}_2) = f(\mathbf{W}^T \mathbf{x}_2) = \mathbf{y}_2 \\ \vdots \qquad \qquad \qquad \vdots \\ \mathbf{y}(\mathbf{x}_k) = f(\mathbf{W}^T \mathbf{x}_k) = \mathbf{y}_k \end{array} \right. \quad (3.9)$$

Wymaga to odpowiedniego doboru wag neuronów. Iteracyjny proces zmian macierzy wag nazywany jest uczeniem sieci.



## 4 Uczenie sieci neuronowej

Uczenie sieci neuronowej to proces, w wyniku którego zmieniane są wagi neuronów. Istnieją dwie metody uczenia, określane jako uczenie z nauczycielem oraz samouczenie. Pierwsza metoda polega na przedstawieniu sieci tzw. ciągu uczącego, który jest ciągiem par  $(\mathbf{x}^{(n)}, \mathbf{z}^{(n)})$ , gdzie  $\mathbf{x}^{(j)}$  jest  $j$ -tym sygnałem wejściowym, a  $\mathbf{z}^{(j)}$  pożądaną odpowiedzią sieci na ten sygnał. Bieżąca odpowiedź  $\mathbf{y}^{(j)}$  na sygnał wejściowy  $\mathbf{x}^{(j)}$  jest porównywana z odpowiedzią oczekiwaną  $\mathbf{z}^{(j)}$ . Proporcjonalnie do iloczynu wektora błędu  $\delta^{(j)} = \mathbf{z}^{(j)} - \mathbf{y}^{(j)}$  i sygnału wejściowego  $\mathbf{x}^{(j)}$  zmieniane są poszczególne wagi neuronów.

$$\Delta \mathbf{W} \sim \delta^{(j)} \cdot \mathbf{x}^{(j)} \quad (4.1)$$

Uczenie polega na wielokrotnym przedstawieniu sieci ciągu uczącego.

Metoda nauki z nauczycielem może mieć wariant przyrostowy, kiedy wagi zmieniane są po przedstawieniu każdego z elementów ciągu uczącego, oraz całościowy, kiedy wagi zmieniane są po przedstawieniu całego ciągu uczącego. Każde przedstawienie ciągu uczącego nazywane będzie w skrócie iteracją.

Proces uczenia polega na następujących działaniach:

- przedstawienie ciągu uczącego
- obliczenie błędu sieci
- zmiana wag neuronów

Czynności te są powtarzane do momentu, kiedy odpowiedź sieci będzie zbliżona do odpowiedzi pożądanej.

W metodzie samouczenia pożądana odpowiedź nie jest znana. Przykładem metody uczenia bez nauczyciela jest reguła Hebba, w której wagi zmieniane są proporcjonalnie do iloczynu sygnału wejściowego i odpowiedzi sieci na ten sygnał

$$\Delta \mathbf{W} \sim \mathbf{x}^{(j)} \cdot \mathbf{y}^{(j)} \quad (4.2)$$

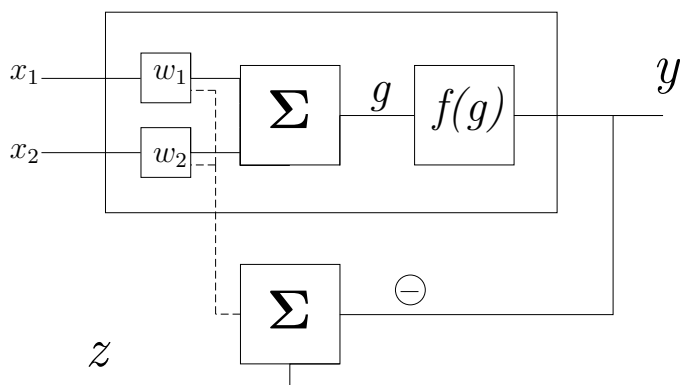
Metoda Hebba jest praktyczną realizacją stwierdzenia z zakresu neurobiologii:

*Jeżeli akson komórki A bierze systematycznie udział w pobudzaniu komórki B powodującym jej aktywację, to wywołuje to zmianę metaboliczną w jednej lub obu komórkach, prowadzącą do wzrostu skuteczności pobudzania B przez A. [5]*

Samouczenie powoduje jedynie utrwalanie się pewnych już istniejących własności sieci, tak więc nie stosuje się do przedstawionego tu problemu. W niniejszej pracy zostały zastosowane tylko algorytmy uczenia z nauczycielem. W dalszej części przedstawiony zostanie podstawowy schemat uczenia z nauczycielem, znany jako reguła delta.

## 4.1 Reguła delta

Podstawowy schemat reguły delta został przedstawiony na przykładzie uczenia jednego neuronu posiadającego dwa wejścia.

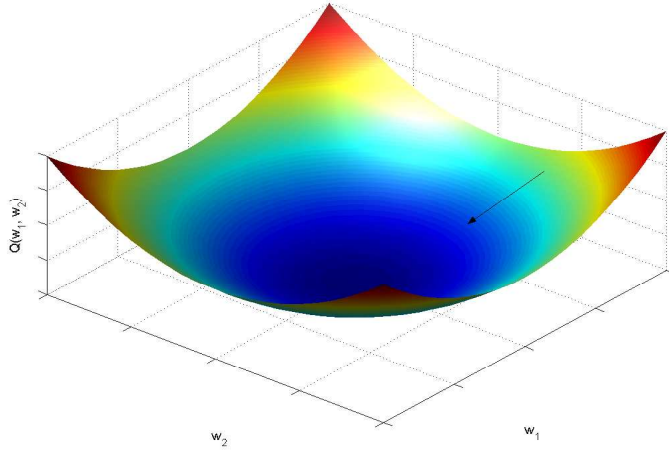


Rysunek 4.1: Ideowy schemat uczenia neuronu

Nauczenie neuronu polega na minimalizacji funkcji błędu, zdefiniowanej zgodnie z regułą najmniejszych kwadratów jako

$$Q = \frac{1}{2} \sum_n (z^{(n)} - y^{(n)})^2 \quad (4.3)$$

Powyższy wzór przedstawia błąd jako funkcję odpowiedzi pożądaných i bieżących odpowiedzi, jakie pojawiają się na wyjściu sieci. Te drugie zależą jednak od wag  $w_1$  i  $w_2$ , przez które mnożone są sygnały wejściowe. Minimalizacja błędu polega na takim dobraniu wag, aby  $Q(w_1, w_2)|_{(x,z)} = \min$ . Wagi są zmieniane przeciwnie do gradientu funkcji błędu  $\left(\frac{\partial Q}{\partial w_1}, \frac{\partial Q}{\partial w_2}\right)$  (rys. 4.2).



Rysunek 4.2: Minimalizacja funkcji błędu

W metodzie przyrostowej, wagi zmieniają się po każdym przedstawieniu elementu ciąg uczącego  $(x^{(j)}, z^{(j)})$  w taki sposób, aby zminimalizować wielkość  $Q^{(j)} = \frac{1}{2}(z^{(j)} - y^{(j)})^2$  [4]. Zmiana  $i$ -tej wagi neuronu jest opisana wzorem

$$\Delta w_i^{(j)} = -\eta \frac{\partial Q^{(j)}}{\partial w_i^{(j)}} \quad (4.4)$$

gdzie  $\eta$  jest pewnym współczynnikiem proporcjonalności. Z kolei

$$\frac{\partial Q^{(j)}}{\partial w_i^{(j)}} = \frac{\partial Q^{(j)}}{\partial y^{(j)}} \frac{\partial y^{(j)}}{\partial g^{(j)}} \frac{\partial g^{(j)}}{\partial w_i^{(j)}} = -(z^{(j)} - y^{(j)}) f'(g^{(j)}) x_i^{(j)} \quad (4.5)$$

ponieważ zgodnie ze wzorem (2.4) ze strony 17

$$\frac{\partial g^{(j)}}{\partial w_i^{(j)}} = x_i^{(j)} \quad (4.6)$$

Podstawiając do wzoru (4.4) otrzymujemy

$$\Delta w_i^{(j)} = \eta (z^{(j)} - y^{(j)}) f'(g^{(j)}) x_i^{(j)} \quad (4.7)$$

Zmiana wszystkich wag neuronu w  $j$ -tym kroku (wektora wag  $\mathbf{w}^j$ ) opisana jest wzorem

$$\Delta \mathbf{w}^{(j)} = \eta (z^{(j)} - y^{(j)}) f'(g^{(j)}) \mathbf{x}^{(j)} \quad (4.8)$$

gdzie  $\mathbf{x}^{(j)}$  jest wektorem  $j$ -tego sygnału wejściowego.

Dla neuronu liniowego  $f'(g^{(j)}) = 1$ . Podstawiając  $\delta^{(j)} = z^{(j)} - y^{(j)}$  wzór upraszcza się do postaci

$$\Delta \mathbf{w}^{(j)} = \eta \delta^{(j)} \mathbf{x}^{(j)} \quad (4.9)$$

W przypadku sieci neuronowej, wzór opisujący regułę delta zasadniczo nie zmienia się. Wartości odpowiedzi  $y$  oraz odpowiedzi pożądaney  $z$  zamieniają się na odpowiadające im wektory  $\mathbf{y}$  i  $\mathbf{z}$ , a wektor wag  $\mathbf{w}$  zastępowany jest przez macierz wag  $\mathbf{W}$ . Konstrukcja macierzy wag została zilustrowana w poprzednich rozdziałach. Wzór opisujący regułę delta ma wtedy ogólną postać

$$\Delta \mathbf{W} = \eta f'(\mathbf{g}) \mathbf{x} \delta^T \quad (4.10)$$

a w szczególnym przypadku neuronu liniowego

$$\Delta \mathbf{W} = \eta \mathbf{x} \delta^T \quad (4.11)$$

## 4.2 Przyspieszanie procesu uczenia

W praktycznych zastosowaniach istotną rolę odgrywa szybkość, a co za tym idzie, efektywność procesu uczenia. W metodzie delta opisanej wzorem (4.11) można ją zwiększać poprzez zwiększenie współczynnika  $\eta$ . Jednak wzór ten jest rzadko stosowany w czystej postaci, ze względu na małą efektywność uczenia. Nauczenie sieci czystą regułą delta, tak aby dawała ona dobre wyniki, wymaga tysięcy iteracji.

W praktyce stosuje się metody polegające na daleko idącej modyfikacji wzoru (4.11). Istnieje kilka takich metod, spośród których w niniejszej pracy zostaną przedstawione i przetestowane: metoda momentum [4], metoda zmiennego współczynnika  $\eta$  oraz metoda Fletchera-Reevesa [6].

### 4.2.1 Metoda momentum

Metoda momentum polega na wprowadzeniu do wzoru (4.11) dodatkowego składnika, uwzględniającego bezwładność procesu uczenia. Ze względu na analogię fizycznym pędem jest on nazywany składnikiem momentum. Macierz wag w  $j$ -tym kroku uczenia jest obliczana według wzoru

$$\mathbf{W}^{(j+1)} = \mathbf{W}^{(j)} + \eta_1 \mathbf{x}^{(j)} [\delta^{(j)}]^T + \eta_2 \mathbf{M}^{(j)} \quad (4.12)$$

gdzie czynnik momentum  $\mathbf{M}^{(j)}$  jest obliczany ze wzoru

$$\mathbf{M}^{(j)} = \mathbf{W}^{(j)} - \mathbf{W}^{(j-1)} \quad (4.13)$$

Wzór (4.12) można w skrócie zapisać jako

$$\Delta \mathbf{W}^{(j)} = \eta_1 \mathbf{x}^{(j-1)} [\delta^{(j-1)}]^T + \eta_2 \Delta \mathbf{W}^{(j-1)} \quad (4.14)$$

Znana jest również zaproponowana przez Sejnowskiego i Rosenberga [4] modyfikacja wzoru (4.12) do postaci

$$\Delta \mathbf{W}^{(j)} = \eta_1 \left[ (1 - \eta_2) \mathbf{x}^{(j-1)} [\delta^{(j-1)}]^T + \eta_2 \Delta \mathbf{W}^{(j-1)} \right] \quad (4.15)$$

### 4.2.2 Metoda zmiennego współczynnika $\eta$

Metoda ta stosuje wzór (4.11), zmieniając w kolejnych krokach uczenia współczynnik  $\eta$  w oparciu o bieżącą analizę funkcji błędu. Jeżeli bieżąca wartość błędu  $Q^{(j)}$  jest większa niż wartość błędu w kroku poprzednim  $Q^{(j-1)}$  oraz ich stosunek jest większy od pewnego ustalonego współczynnika  $\eta_{gr}$

$$\frac{Q^{(j)}}{Q^{(j-1)}} > \eta_{gr} ,$$

to aktualny współczynnik  $\eta$  jest zmniejszany i macierz wag  $\mathbf{W}^{(j)}$  jest obliczana na nowo. Jeżeli natomiast

$$\frac{Q^{(j)}}{Q^{(j-1)}} < \eta_{gr} ,$$

to macierz wag  $\mathbf{W}^{(j)}$  jest zachowywana, natomiast współczynnik  $\eta$  jest zwiększany w kolejnym kroku. Zmiany współczynnika  $\eta$  polegają na mnożeniu go przez pewne ustalone wartości  $\eta_{zm}$  i  $\eta_{zw}$ . W przypadku wzrostu błędu wartość poprawiona wynosi

$$\eta_{popr}^{(j)} = \eta_{zm} \eta^{(j)} ;$$

w przypadku malenia

$$\eta^{(j+1)} = \eta_{zw} \eta^{(j)} .$$

Standardowo przyjmuje się  $\eta_{gr} = 1.04$ ,  $\eta_{zm} = 0.7$ ,  $\eta_{zw} = 1.05$  [6].

### 4.2.3 Metoda Fletchera-Reevesa

W pierwszym kroku znajdowany jest gradient funkcji błędu

$$\mathbf{g}_0 = \left( \frac{dQ}{dw_1}, \frac{dQ}{dw_2}, \dots, \frac{dQ}{dw_n} \right)$$

i ustalany jako pierwszy krok w iteracji

$$\mathbf{p}_0 = -\mathbf{g}_0 ,$$

Wagi zmieniane są kolejno według zależności

$$\Delta w_k = \alpha_k \mathbf{p}_k \tag{4.16}$$

gdzie

$$\mathbf{p}_k = -\mathbf{g}_k + \beta_k \mathbf{p}_{k-1}$$

$$\beta_k = \frac{\mathbf{g}_k^T \mathbf{g}_k}{\mathbf{g}_{k-1}^T \mathbf{g}_{k-1}} .$$

## 5 Sieć rozpoznająca skład widma

### 5.1 Wektorowy opis widma

Widmo promieniowania gamma pochodzące od próbki zawierającej kilka izotopów promieniotwórczych jest superpozycją widm pochodzących od każdego z izotopów z osobną oraz widma tła promieniowania. Widmo promieniowania zmierzone licznikiem posiadającym  $k$  kanałów możemy potraktować jako  $k$ -wymiarowy wektor liczby zliczeń

$$\mathbf{N}^P = (N_1^P, N_2^P, \dots, N_k^P) , \quad (5.1)$$

gdzie  $N_i^P$  jest liczbą zliczeń zarejestrowanych przez  $i$ -ty kanał. W niniejszej pracy widmo promieniowania najczęściej traktowane jest jako wektor, zatem wektor liczby zliczeń nazywany będzie w skrócie wektorem widmowym.

Wykonując pomiar bez próbki, otrzymamy wektor widmowy tła promieniowania

$$\mathbf{N}^T = (N_1^T, N_2^T, \dots, N_k^T) \quad (5.2)$$

Różnica wektorów  $\mathbf{N}^P$  i  $\mathbf{N}^T$  jest wektorem widmowym  $\mathbf{X}$  badanej próbki

$$\mathbf{X} = \mathbf{N}^P - \mathbf{N}^T \quad (5.3)$$

Z drugiej strony, widmo promieniowania próbki jest superpozycją widm poszczególnych izotopów wchodzących w jej skład. Zatem jej wektor widmowy jest liniową kombinacją  $n$  wektorów widmowych pochodzących od  $n$  składowych izotopów

$$\mathbf{X} = s_1 \mathbf{X}^1 + s_2 \mathbf{X}^2 + \dots + s_n \mathbf{X}^n , \quad (5.4)$$

gdzie  $s_i$  są bezwymiarowymi współczynnikami ilościowymi.

Prawidłowa klasyfikacja wymaga znormalizowania wektorów widmowych

$$\mathbf{x}^j = \frac{\mathbf{X}^j}{\sum_{i=1}^n X_i^j} \quad (5.5)$$

celem uniezależnienia ich od parametrów pomiarowych, takich jak np. czas pomiaru.

Znormalizowany wektor widmowy próbki  $\mathbf{x}$  ma postać

$$\mathbf{x} = c_1 \mathbf{x}^1 + c_2 \mathbf{x}^2 + \dots + c_n \mathbf{x}^n , \quad (5.6)$$

gdzie  $\sum_{i=1}^n c_i = 1$ . Stała  $c_j$  pomnożona przez 100% określa procentowy wkład do widma pochodzący od  $j$ -tego składnika.

## 5.2 Architektura sieci

Podobnie jak do rozpoznawania liter, do analizy widma wystarcza sieć jednowarstwowa. W przypadku sieci neuronów sigmoidalnych rozpoznającej litery, sygnałem wejściowym był obraz litery przekształcony do postaci wektora, a sygnałem wyjściowym wektor podobieństwa obrazu wejściowego do każdego z elementów klasy. Dla sieci rozpoznającej wkład każdego z izotopów do widma sygnałem wejściowym jest znormalizowany wektor widmowy próbki

$$\mathbf{x} = [x_1 \ x_2 \ \cdots \ x_k]^T ,$$

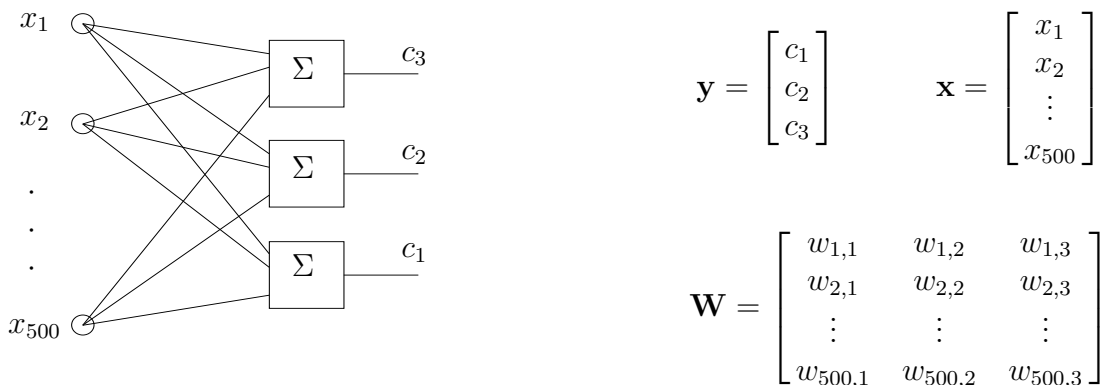
a sygnałem wyjściowym wkład do widma pochodzący od każdego z  $n$  izotopów składowych

$$[c_1 \ c_2 \ \cdots \ c_n]^T .$$

Architektura sieci jednowarstwowej jest zdeterminowana przez wymiary sygnału wejściowego i wyjściowego. Dla widm próbek zawierających trzy izotopy, zmierzonych licznikiem posiadającym 500 kanałów, schemat sieci jest następujący:

- sygnałem wejściowym jest 500-wymiarowy znormalizowany wektor widmowy  $\mathbf{x}$
- pożądaną odpowiedzią na sygnał  $\mathbf{x}$  jest wektor odpowiedzi  $\mathbf{y} = (c_1, c_2, c_3)$ .

Realizacją tak postawionego zadania jest sieć jednowarstwowa, składająca się z trzech neuronów liniowych posiadających 500 wspólnych wejść.



Rysunek 5.1: Schemat sieci rozpoznającej skład widma

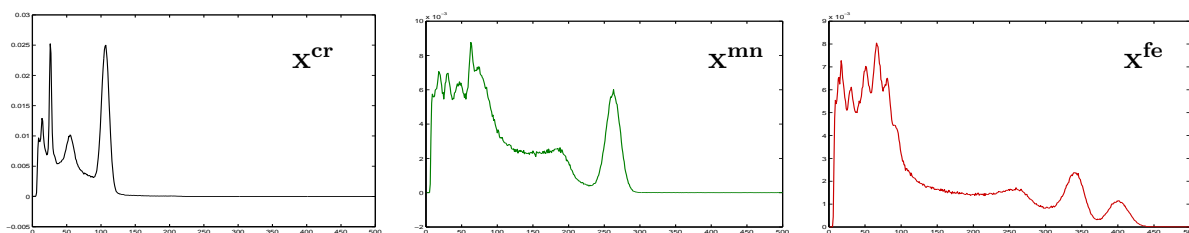
Chcemy, aby

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} c_{cr} \\ c_{mn} \\ c_{fe} \end{bmatrix} = \mathbf{z},$$

gdzie  $[c_{cr} \ c_{mn} \ c_{fe}]^T$  to procentowe udziały izotopów w widmie. Wymaga to nauczenia sieci w oparciu o ciąg uczący składający się z par  $(\mathbf{x}, \mathbf{z})$ .

### 5.3 Ciąg uczący

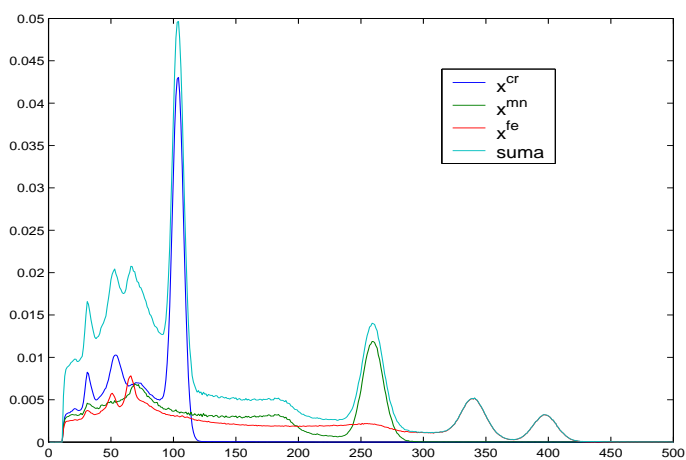
Mając dane widma składowe poszczególnych izotopów oraz znając ich procentowy wkład do widma próbki, można wygenerować widmo promieniowania tej próbki, ponieważ jest ono superpozycją poszczególnych widm składowych. W laboratorium zostały zmierzone widma promieniowania dla każdego z izotopów z osobna. Po odjęciu tła promieniowania i normalizacji otrzymujemy składowe wektory widmowe.



Rysunek 5.2: Baza elementów ciągu uczącego

Wektor znormalizowany widmowy próbki  $\mathbf{x}$  jest ich liniową kombinacją

$$\mathbf{x} = c_{cr}\mathbf{x}^{cr} + c_{fe}\mathbf{x}^{fe} + c_{mn}\mathbf{x}^{mn} \quad (5.7)$$



Rysunek 5.3: Elementy bazowe oraz ich kombinacja



Kontynuując te matematyczne rozważania, współczynniki  $c_{cr}$ ,  $c_{mn}$  i  $c_{fe}$  możemy potraktować jako współrzędne wektora widmowego próbki w znormalizowanej bazie wektorów widm składowych. Oczywiście

$$\begin{aligned} c_{cr} + c_{fe} + c_{mn} &= 1 \\ \sum_{i=1}^{500} x_i^{cr} &= \sum_{i=1}^{500} x_i^{fe} = \sum_{i=1}^{500} x_i^{mn} = 1 \end{aligned}$$

Wyznaczenie wektora widmowego próbki  $\mathbf{x}$  zadanego wzorem (5.7) wymaga jedynie podania współczynników  $c_{cr}$ ,  $c_{mn}$  i  $c_{fe}$ , określających jednoznacznie jego współrzędne w bazie wektorowej  $(\mathbf{x}^{cr}, \mathbf{x}^{mn}, \mathbf{x}^{fe})$ . W procesie tworzenia ciągu uczącego współczynniki te są generowane losowo według następującego algorytmu:

$$\begin{aligned} c_{cr} &= rand \\ c_{mn} &= (1 - c_{cr}) \cdot rand \\ c_{fe} &= 1 - c_{cr} - c_{mn} , \end{aligned}$$

gdzie *rand* oznacza liczbę losową z przedziału  $[0, 1]$ .

Metodę tę można uogólnić na dowolną liczbę  $n$  izotopów:

$$\begin{aligned} c_1 &= rand \\ c_j &= 1 - \sum_{i=1}^{j-1} c_i , \quad j = 2, \dots, n-1 \\ c_n &= 1 - \sum_{i=1}^{n-1} c_i \end{aligned}$$

Ciąg uczący jest zatem ciągiem par  $(\mathbf{x}, \mathbf{z})$ , gdzie

$$\begin{aligned} \mathbf{x} &= [x_1 \ x_2 \ \dots \ x_k]^T , \\ \mathbf{z} &= [c_{Cr} \ c_{Mn} \ c_{Fe}]^T \end{aligned} \tag{5.8}$$

## 5.4 Ciąg testujący

Ciąg testujący generowany jest w taki sam sposób jak ciąg uczący, składający się z par  $(\mathbf{x}, \mathbf{z})$ . Odpowiedź sieci  $\mathbf{y}$  na sygnał wejściowy  $\mathbf{x}$  jest porównywana z odpowiedzią oczekiwaną  $\mathbf{z}$ . Przedstawienie ciągu testującego ma na celu sprawdzenie czy sieć działa poprawnie.

## 6 Wyniki dla widm generowanych

Dokładność, z jaką sieć rozpoznaje składowe widma, zależy od metody, jaką sieć jest uczona oraz parametrów uczenia takich jak liczba iteracji i długość ciągu uczącego. Przy tym ostatnim zakładamy, że elementy ciągu nie powtarzają się.

Sieć była uczona trzema opisanymi wcześniej metodami. Użyty został ten sam ciąg uczący i ten sam  $n$ -elementowy ciąg testujący. Miarą dokładności oszacowania jest błąd średniokwadratowy, zdefiniowany jako

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_{j=1}^n (z^{(j)} - y^{(j)})^2}{n}}$$

gdzie  $z^{(j)}$  to elementy ciągu testującego, a  $y^{(j)}$  bieżące odpowiedzi sieci.

W tabelkach przedstawione są wartości błędu średniokwadratowego dla wszystkich trzech składników. Kolejne tabelki zawierają porównanie wartości wyznaczonych przez sieć z teoretycznymi. Wykresy przedstawiają błąd w funkcji kroków uczenia. Dokumenty L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X-a z wynikami testów są automatycznie generowane przez program, przez co w kolumnie *izotop* znajdują się nazwy plików z widmami składowymi.

### 6.1 Metoda momentum

Procedura uczenia : *traingdm* [6]

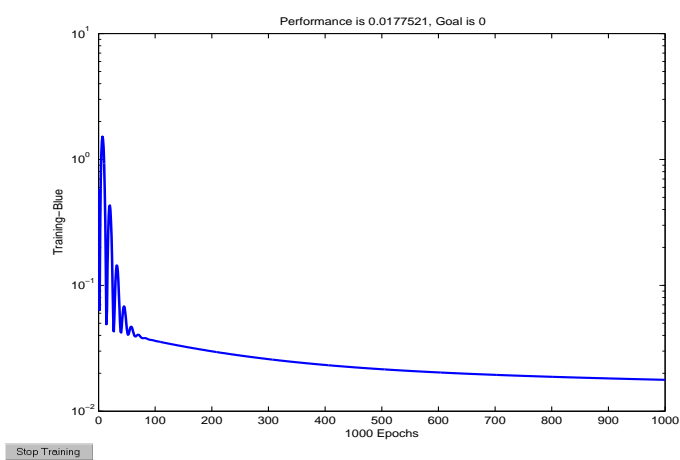
liczba kroków uczenia: 1000

Tabela 6.1: Błąd średniokwadratowy - metoda momentum

izotop	błąd $\sigma$
<i>cr<sub>2</sub>.skl</i>	3.24e-002
<i>mn<sub>2</sub>.skl</i>	2.29e-001
<i>fe<sub>2</sub>.skl</i>	1.96e-001

Tabela 6.2: Porównanie składu widma wyznaczonego przez sieć z wartościami teoretycznymi - metoda momentum

izotop	sieć	teoretyczne
$cr_2.skl$	0.044341	0.015867
$mn_2.skl$	0.512634	0.618303
$fe_2.skl$	0.436276	0.365831
$cr_2.skl$	0.787563	0.812467
$mn_2.skl$	0.082209	0.040815
$fe_2.skl$	0.132341	0.146717
$cr_2.skl$	0.407731	0.405441
$mn_2.skl$	0.302346	0.338851
$fe_2.skl$	0.287300	0.255708
$cr_2.skl$	0.493066	0.490874
$mn_2.skl$	0.241292	0.065885
$fe_2.skl$	0.278752	0.443241
$cr_2.skl$	0.576445	0.590934
$mn_2.skl$	0.213633	0.367529
$fe_2.skl$	0.197935	0.041536



Rysunek 6.1: Minimalizacja funkcji błędu - metoda momentum

## 6.2 Metoda zmiennego współczynnika $\eta$

Procedura uczenia : *trainidx* [6]

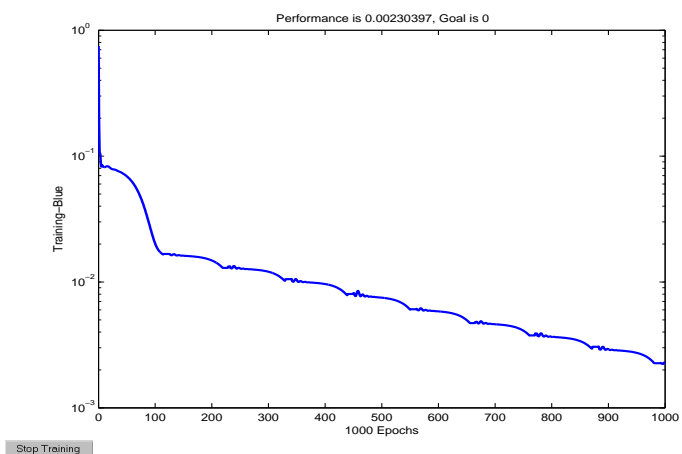
liczba kroków uczenia: 1000

Tabela 6.3: Błąd średniokwadratowy - metoda zmiennego współczynnika  $\eta$

izotop	błąd $\sigma$
<i>cr<sub>2</sub>.skl</i>	1.84e-002
<i>mn<sub>2</sub>.skl</i>	8.05e-002
<i>fe<sub>2</sub>.skl</i>	7.90e-002

Tabela 6.4: Porównanie składu widma wyznaczonego przez sieć z wartościami teoretycznymi - metoda zmiennego współczynnika  $\eta$

izotop	sieć	teoretyczne
<i>cr<sub>2</sub>.skl</i>	0.022454	0.015867
<i>mn<sub>2</sub>.skl</i>	0.578904	0.618303
<i>fe<sub>2</sub>.skl</i>	0.406405	0.365831
<i>cr<sub>2</sub>.skl</i>	0.821689	0.812467
<i>mn<sub>2</sub>.skl</i>	0.043005	0.040815
<i>fe<sub>2</sub>.skl</i>	0.147668	0.146717
<i>cr<sub>2</sub>.skl</i>	0.413259	0.405441
<i>mn<sub>2</sub>.skl</i>	0.318811	0.338851
<i>fe<sub>2</sub>.skl</i>	0.277840	0.255708
<i>cr<sub>2</sub>.skl</i>	0.503115	0.490874
<i>mn<sub>2</sub>.skl</i>	0.120047	0.065885
<i>fe<sub>2</sub>.skl</i>	0.394583	0.443241
<i>cr<sub>2</sub>.skl</i>	0.596164	0.590934
<i>mn<sub>2</sub>.skl</i>	0.303256	0.367529
<i>fe<sub>2</sub>.skl</i>	0.105884	0.041536



Rysunek 6.2: Minimalizacja funkcji błędu - metoda zmiennego współczynnika  $\eta$

### 6.3 Metoda Fletchera-Reevesa

Procedura uczenia : *traincgf* [6]

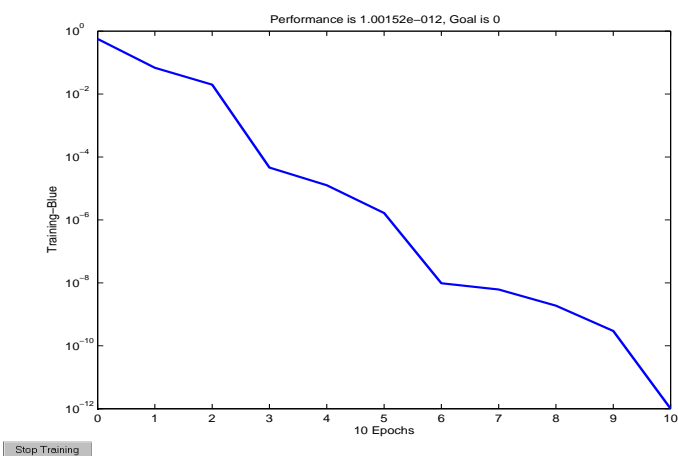
liczba kroków uczenia: 100

Tabela 6.5: Błąd średniokwadratowy - metoda Fletchera-Reevesa

izotop	błąd $\sigma$
<i>cr<sub>2</sub>.skl</i>	5.56e-007
<i>mn<sub>2</sub>.skl</i>	1.41e-006
<i>fe<sub>2</sub>.skl</i>	1.63e-006

Tabela 6.6: Porównanie składu widma wyznaczonego przez sieć z wartościami teoretycznymi - metoda Fletchera-Reevesa

izotop	sieć	teoretyczne
$cr_2.skl$	0.015866	0.015867
$mn_2.skl$	0.618302	0.618303
$fe_2.skl$	0.365831	0.365831
$cr_2.skl$	0.812468	0.812467
$mn_2.skl$	0.040815	0.040815
$fe_2.skl$	0.146717	0.146717
$cr_2.skl$	0.405441	0.405441
$mn_2.skl$	0.338851	0.338851
$fe_2.skl$	0.255708	0.255708
$cr_2.skl$	0.490874	0.490874
$mn_2.skl$	0.065886	0.065885
$fe_2.skl$	0.443240	0.443241
$cr_2.skl$	0.590934	0.590934
$mn_2.skl$	0.367528	0.367529
$fe_2.skl$	0.041538	0.041536



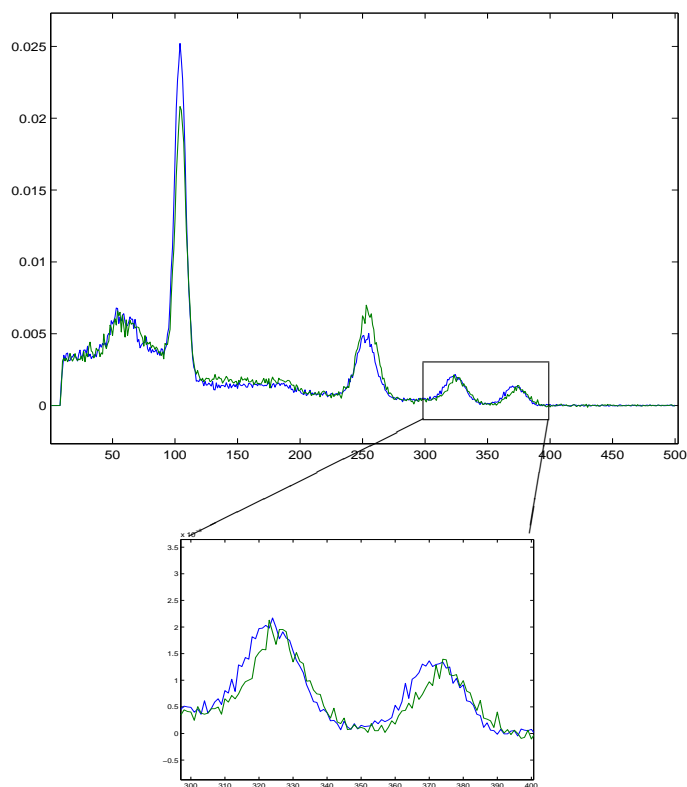
Rysunek 6.3: Minimalizacja funkcji błędu - metoda Fletchera-Reevesa

Sieć uczona metodą Fletchera-Reevesa uzyskała najlepsze rezultaty. Ta metoda została zastosowana w dalszej części pracy przy analizie widm laboratoryjnych.

## 7 Widma laboratoryjne

Powyższe wyniki są dowodem na to, że sieć dobrze rozpoznaje widma generowane komputerowo. Jednak widma te, stanowiące ciąg testujący, są tworzone w taki sam sposób, jak widma ciągu uczącego. Można je zatem nazwać idealnymi. W przypadku widm rzeczywistych sprawa się nieco komplikuje. Na samym początku mamy do czynienia z niekorzystnym efektem pochodzącym od aparatury elektronicznej licznika, zwanym potocznie „pływaniem”. Efekt ten został opisany w dodatku A.

W rezultacie położenia tych samych pików w kolejnych pomiarach mogą być różne, co ilustruje rysunek 7.1.

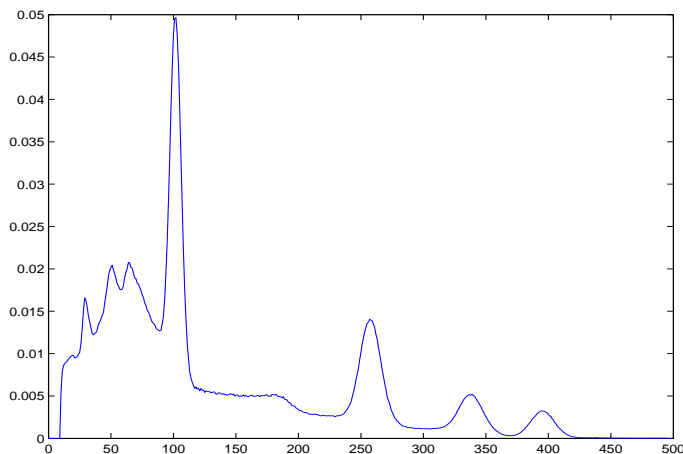


Rysunek 7.1: Efekt „pływania”. Piki z różnych pomiarów nie pokrywają się

W sztucznie generowanych widmach ciągu uczącego maksima tych samych pików zawsze znajdowały się w tym samym miejscu. Prawidłowe rozpoznanie przez sieć wymaga zatem sprowadzenia zmierzonych widm do tego samego układu odniesienia, który w dalszej części nazywany będzie widmem podstawowym.

Widmo podstawowe jest kolejnym pojęciem pomocniczym. Widmem podstawowym izotopów  $Cr$ ,  $Mn$ ,  $Fe$  nazwiemy niefizyczny element ciągu uczącego  $\mathbf{x}$  (wzór 5.7), taki, że

$$\mathbf{x}^p = 1 \cdot \mathbf{x}^{cr} + 1 \cdot \mathbf{x}^{mn} + 1 \cdot \mathbf{x}^{fe} . \quad (7.1)$$



Rysunek 7.2: Widmo podstawowe

**Definicja 1** *Widmo pomiarowe ma postać widma podstawowego, jeżeli wektor widmowy widma pomiarowego ma ten sam wymiar co wektor widmowy widma podstawowego oraz położenia maksimów pików w widmie pomiarowym znajdują się w tych samych położeniach, co w widmie podstawowym.*

Maksima pików w widmie pomiarowym wskutek efektu „pływania” rozrzucone są wokół pewnej wartości średniej. Ponadto widma te mogą zostać zmierzone licznikiem o innej liczbie kanałów niż ten, którym mierzono widma składowe. Natomiast wszystkie elementy ciągu uczącego mają postać widma podstawowego. Zatem prawidłowe rozpoznanie składu widma pomiarowego przez sieć wymaga sprowadzenia go do postaci widma podstawowego.



## 8 Analiza widm laboratoryjnych

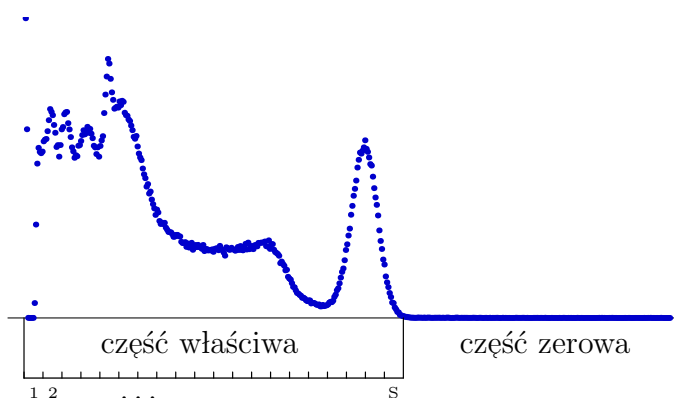
Rozdział ten opisuje algorytm przekształcenia widm, składający się z trzech niezależnych procedur:

1. Lokalizacji pików
2. Kalibracji
  - skalowanie
  - stabilizacja
3. Wyznaczenia składu widma

### 8.1 Lokalizacja pików

Program wczytuje z pliku widmo zmierzone w postaci tablicy. Tablica ta jest następnie przeglądana od końca do momentu, kiedy wartości dwóch kolejnych elementów są większe od zdefiniowanego wcześniej przez użytkownika maksymalnego poziomu szumów. Wtedy, pierwszy z tych elementów jest definiowany jako koniec części właściwej widma. Częścią właściwą nazwiemy niezerową część widma zmierzonego. Jego koniec zazwyczaj pokrywa się z końcem pików o największej energii. Maksymalny poziom szumów jest zdefiniowany jako wysokość najwyższego pików pomnożona przez stałą podaną przez użytkownika.

Szukanie pików odbywa się według następującej procedury: Widmo właściwe jest dzielone na  $S$  fragmentów, które następnie są aproksymowane prostymi (rys. 8.1).



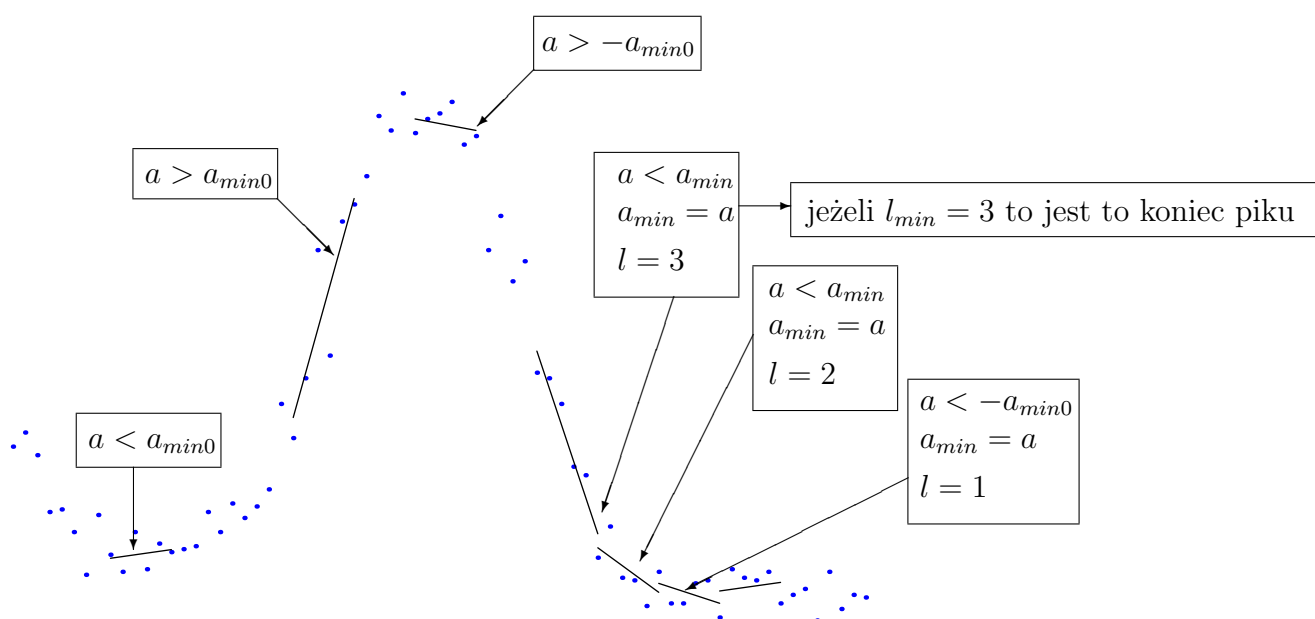
Rysunek 8.1: Podział widma

Fragmenty te są kolejno skanowane od końca pod kątem wartości parametru nachylenia prostej  $a$ .  $a_{min0}$  to minimalna wartość  $a$ , która może być uznana za początek pików (maksymalny gradient szumu). Jest to stała zdefiniowana w podobny sposób, jak maksymalny poziom szumów.

Na początku  $a_{min} = a_{min0}$ . Fragment, dla którego  $a < -a_{min}$  może być końcem pik. Wtedy

$$a_{min} = a$$

Jeżeli w  $l_{min}$  kolejnych krokach przed wystąpieniem szczytu  $a$  będzie maleć, to możemy wstępnie założyć, że mamy do czynienia z prawym skrzydłem pik. Punktem szczytu nazwiemy kolejny element, dla którego  $a > -a_{min0}$ . Następuje wtedy przejście do kolejnego etapu, który kończy się, gdy  $a > a_{min0}$ . Oznacza to, że dany fragment znajduje się już na lewym skrzydle pik. Kolejny element, w którym  $a < a_{min0}$  jest początkiem pik.

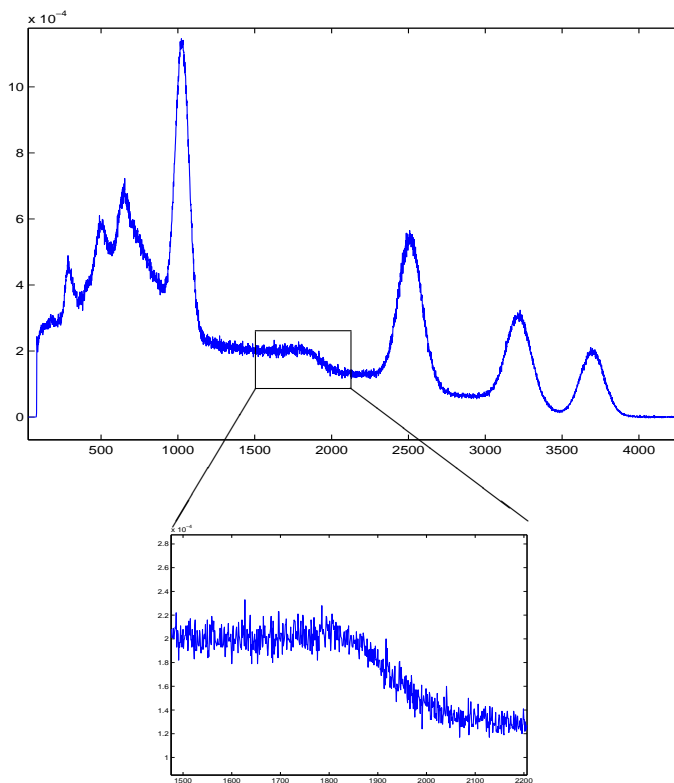


Rysunek 8.2: Lokalizacja pik

Początek i koniec pik są zapamiętywane. Dla elementów leżących pomiędzy nimi przeprowadzana jest aproksymacja wielomianowa, która znajduje maksimum pik. Poniższy schemat przedstawia graficzny opis algorytmu.



Powyższy algorytm może jednak rozpoznać jako pik pewien fragment widma, który pikiem nie jest. Sytuację tę ilustruje rysunek 8.3.



Rysunek 8.3: „Falszywy” pik

Uzupełnienie algorytmu polega na dodaniu warunku maksymalnej liczby fragmentów na szczycie pików, dla których  $-a_{min0} < a < a_{min0}$ . Jeżeli w określonej liczbie kroków nie nastąpi fragment, dla którego  $a > a_{min0}$ , przeglądany fragment widma nie zostanie rozpoznany jako pik. Brane są również pod uwagę gradient lewego skrzydła pików oraz liczba fragmentów wchodzących w jego skład.

## 8.2 Kalibracja

Prawidłowe rozpoznanie składu widma przez sieć wymaga przekształcenia go do postaci widma podstawowego. Liczba kanałów musi być taka sama, maksima pików muszą znajdować się w tych samych położeniach. Przekształcenie składa się z dwóch niezależnych etapów: skalowania i stabilizacji.

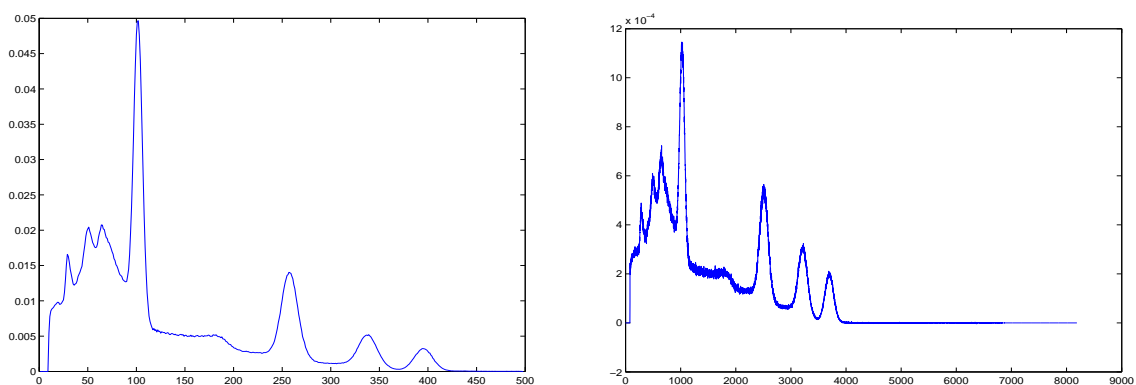
Stabilizacja widma polega na takim jego przekształceniu, aby maksima pików znalazły się w odpowiednich położeniach. Celem stabilizacji jest wyeliminowanie efektu pływania.

Skalowanie natomiast stosuje się tylko wtedy, gdy widmo pomiarowe zostało zmierzone licznikiem o innej liczbie kanałów niż ten, którym zmierzono widma składowe ciągu uczącego. Widmo zostaje sprowadzone do zadanej liczby kanałów tak, aby stosunek części zerowej widma do części właściwej był taki sam jak w widmie podstawowym.

Poniższe procedury przekształcania przypominają kalibrację. Dlatego jednostki widma przekształcanego nazywane będą kanałami, a widma przekształconego energiami.

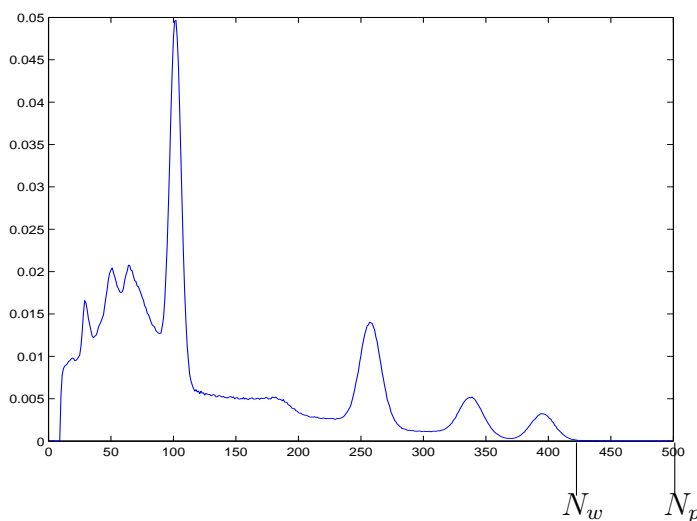
### 8.2.1 Skalowanie

Na poniższych wykresach przedstawione zostało widmo podstawowe oraz widmo pomiarowe zmierzone licznikiem o innej liczbie kanałów.



Rysunek 8.4: Widma podobnych próbek zmierzone licznikami o różnej liczbie kanałów

W trakcie przeszukiwania widma podstawowego zapamiętywana jest całkowita liczba kanałów  $N_p$  oraz koniec widma właściwego  $N_w$  (rys 8.5).



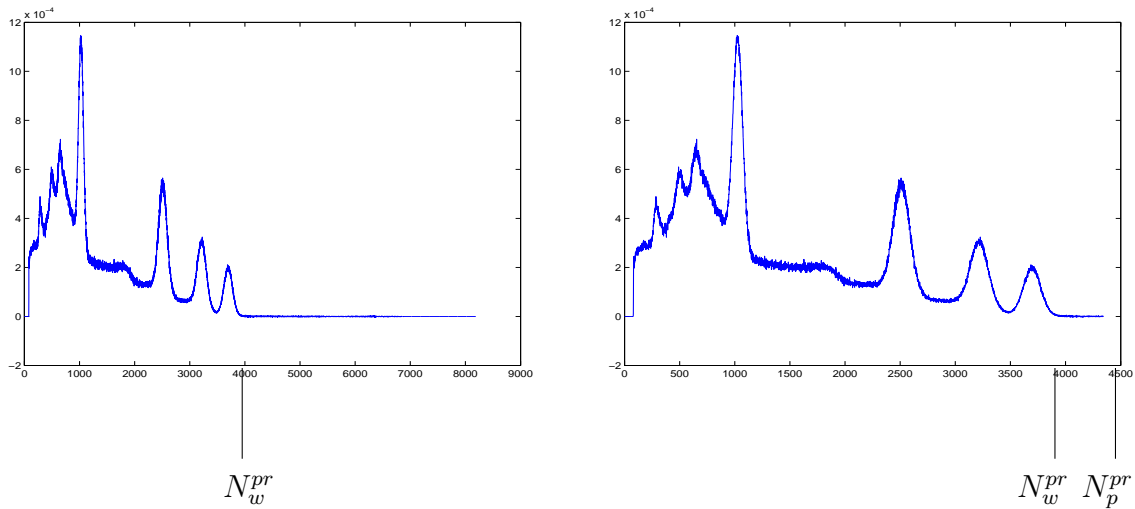
Rysunek 8.5: Wyznaczenie stosunku części zerowej do części właściwej

Na podstawie tych wielkości obliczany jest stosunek części zerowej do części właściwej widma.

$$U_{zer} = \frac{N_p - N_w}{N_w} \quad (8.1)$$

Po wyznaczeniu procedurą znajdującą piki początku widma właściwego w widmie pomiarowym  $N_w^{pr}$ , mierzone widmo jest skracane lub wydłużane do liczby kanałów  $N_p^{pr}$ , według wzoru

$$N_p^{pr} = N_w^{pr} + U_{zer} \cdot N_w^{pr} . \quad (8.2)$$



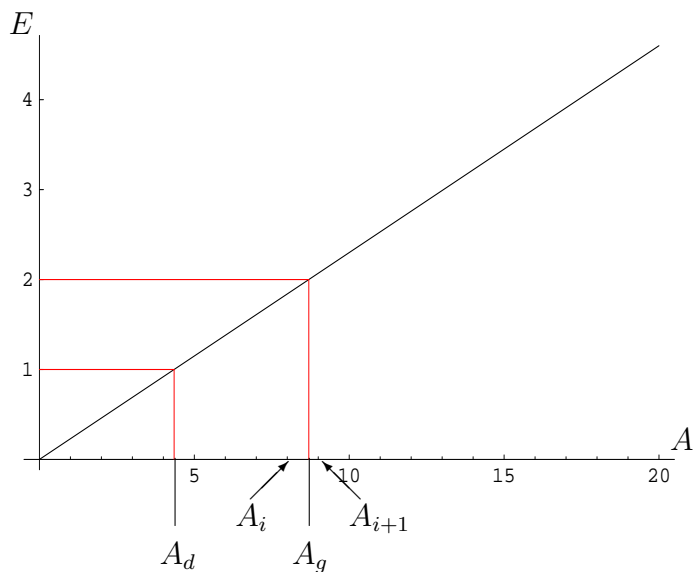
Rysunek 8.6: Skrócenie widma

Kolejnym krokiem jest przeskalowanie jednostek na osi rzędnych (kanałów). Chcemy, aby liczba kanałów była równa 500.

Zakładamy, że „długość” kanału w pierwotnym widmie pomiarowym wynosi 1. Wtedy jednostka  $\Delta_E$  „długości” energii w widmie przekształconym jest stosunkiem liczby kanałów skróconego widma pomiarowego do liczby kanałów widma podstawowego.

$$\Delta_E = \frac{N_p^{pr}}{N_p} \quad (8.3)$$

Właściwe skalowanie polega na wyznaczeniu, ile zliczeń z danych kanałów należy się poszczególnym energiom. Iteracja przebiega po energiach, odcinając za każdym razem na osi rzędnych pewien przedział kanałów pomiędzy ograniczeniami energii.



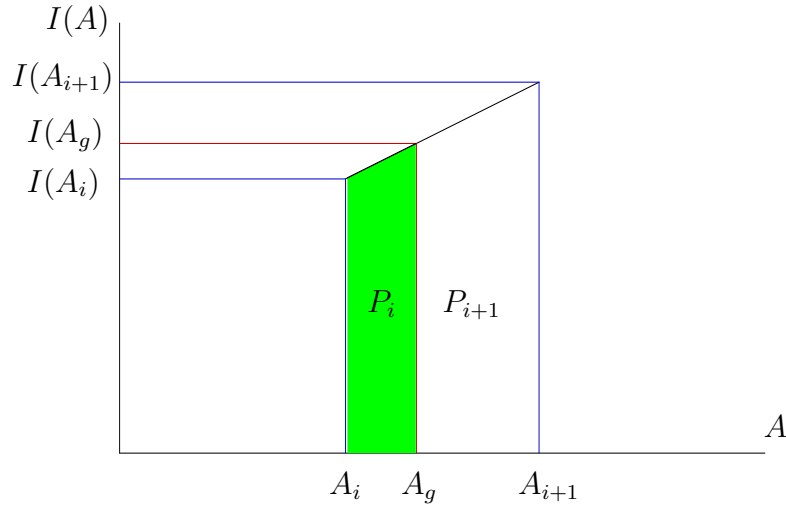
Rysunek 8.7: Przeskalowanie widma

Jeżeli

$$(A_g - A_i) (A_g - A_{i+1}) < 0,$$

to zliczenia z kanału  $i$  muszą zostać podzielone pomiędzy dwie energie. Podział zliczeń z kanałów, przez które przechodzi granica energii, odbywa się w oparciu o analizę tego fragmentu widma.

Analiza fragmentu widma obejmuje kanały  $i$  oraz  $i + 1$ . Fragment znormalizowanej funkcji natężenia promieniowania  $I(A)$  aproksymowany jest prostą. Liczba zliczeń w kanale  $i$ -tym, która ma zostać podzielona pomiędzy dwie energie, jest równa polu trapezu ograniczonego funkcją  $I(A)$  oraz prostymi  $A = i$  i  $A = i + 1$ .



Rysunek 8.8: Podział liczby zliczeń z danego kanału pomiędzy dwie energie

Pole  $P_i$  zielonego trapezu wynosi

$$P_i = \frac{1}{2} [I(A_g) + I(A_i)] (A_g - A_i) \quad (8.4)$$

Wartość  $I(A_g)$  trzeba ekstrapolować, korzystając z przyrostu liczby zliczeń  $\frac{dI}{dA}$  :

$$I(A_g) = I(A_i) + \frac{dI}{dA} (A_g - A_i) = I(A_i) + \frac{I(A_{i+1}) - I(A_i)}{A_{i+1} - A_i} (A_g - A_i) .$$

Zgodnie z założeniem  $A_{i+1} - A_i = 1$ . Podstawiając do wzoru (8.4), otrzymujemy

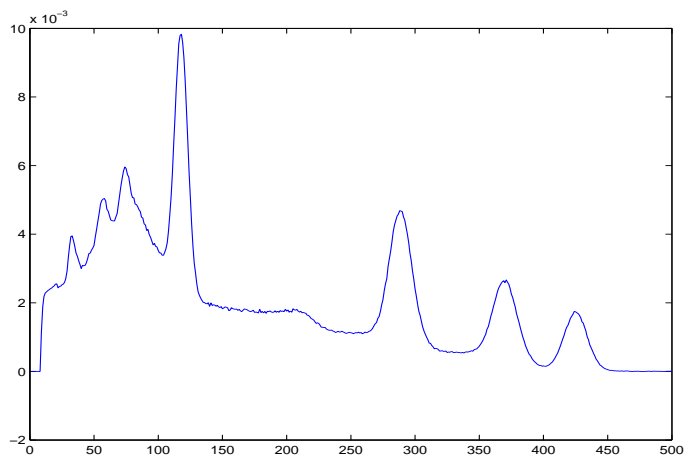
$$P_i = \frac{1}{2} \{ 2 I(A_i) + [I(A_{i+1}) - I(A_i)] (A_g - A_i) \} (A_g - A_i) .$$

$P_i$  zliczeń zostanie dodane do przedziału energii, który odcina kanały poniżej  $A_g$ . Przedział obejmujący kanały powyżej  $A_g$  otrzyma

$$P_{i+1} = \frac{1}{2} [I(A_{i+1}) - I(A_i)] - P_i .$$



Po tych przekształceniach widmo energii przypomina już widmo podstawowe. Różnica polega na tym, że maksima pików znajdują się w innych miejscach.



Rysunek 8.9: Widmo energii

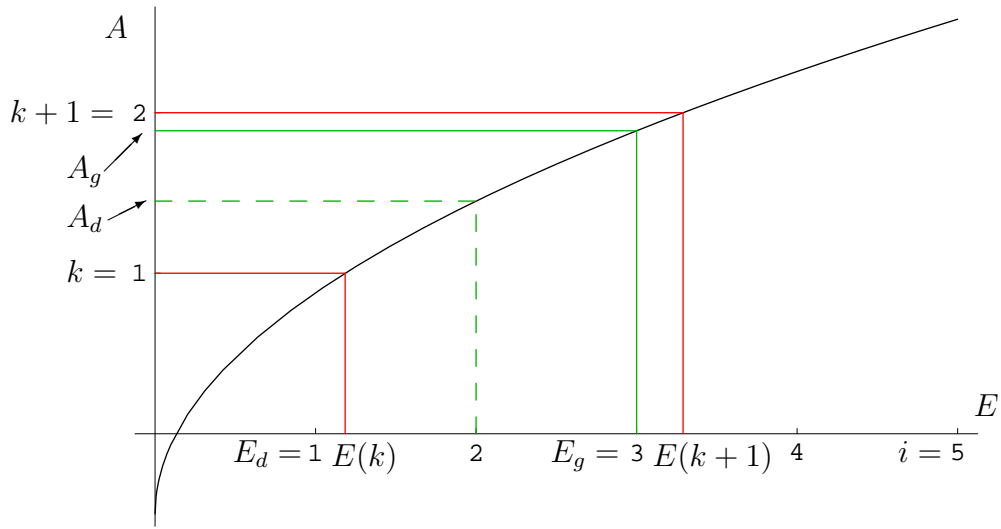
Kolejnym krokiem jest zatem stabilizacja widma.

### 8.2.2 Stabilizacja

W oparciu o położenia maksimów pików wyznaczone przez program oraz wartości teoretyczne, punkty (*położenie\_zmierzzone*, *położenie\_podane*) są aproksymowane wielomianem, którego stopień podaje użytkownik. Położenia podane to położenia maksimów pików w widmie podstawowym. Są one znajdowane przez program w trakcie przeszukiwania tego widma (opis w dodatku B).

Celem stabilizacji, podobnie jak skalowania, jest wyznaczenie, jaki procent liczby zliczeń z danego kanału należy się poszczególnym energiom. W skalowaniu liczba energii była różna od liczby kanałów, za to funkcja kalibracyjna była liniowa. W przypadku stabilizacji liczba przedziałów energii jest taka sama jak liczba kanałów, natomiast funkcja kalibracyjna może być wielomianem dowolnego stopnia.

Na podstawie aproksymacji punktów (*położenie\_zmierzzone*, *położenie\_podane*) wyznaczane są zależności  $E(A)$  oraz  $A(E)$  (energia-amplituda).  $I(A_k)$  oraz  $I(E_i)$  oznaczają odpowiednio liczbę zliczeń w kanale  $k$  oraz liczbę zliczeń przypadającą z tego energii  $i$ . Iteracja przeprowadzana jest po kanałach (rys. 8.10). Jedyneką na osi jest początkiem kanału pierwszego.



Rysunek 8.10: Stabilizacja widma

$$E_d = \inf(E(k)) \quad (8.5)$$

$$A_d = A(\sup(E(k))) \quad (8.6)$$

$$E_g = \inf(E(k+1)) \quad (8.7)$$

$$A_g = A(E_g) \quad (8.8)$$

Przyrosty liczby zliczeń dla energii  $E_g$  i  $E_d$  wynoszą odpowiednio

$$\Delta I(E_g) = (k+1 - A_g) \cdot I(k) \quad (8.9)$$

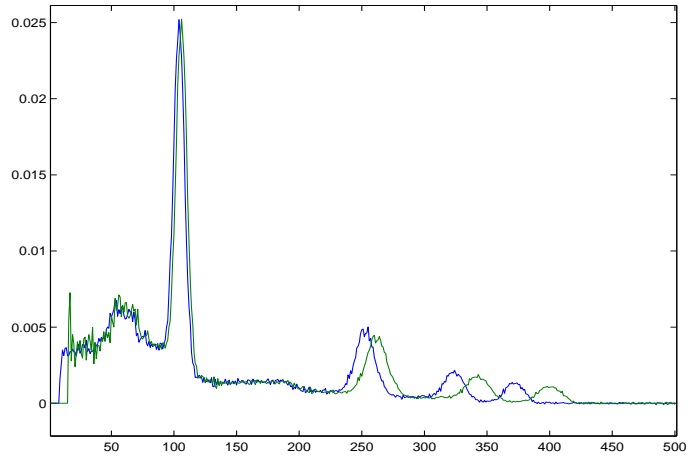
$$\Delta I(E_d) = (A_d - k) \cdot I(k) \quad (8.10)$$

Dla pozostałych energii leżących pomiędzy  $E_d$  i  $E_g$  przyrost ten wynosi

$$\Delta I(E_g - i) = \frac{I(k) - \Delta I(E_g) - \Delta I(E_d)}{n}, \quad i = 1, \dots, n-1, \quad (8.11)$$

gdzie  $n = E_g - E_d$ .

Rezultatem powyższych procedur jest widmo przekształcone do postaci widma podstawowego. Rysunek 8.11 przedstawia widmo przed i po przekształceniu.

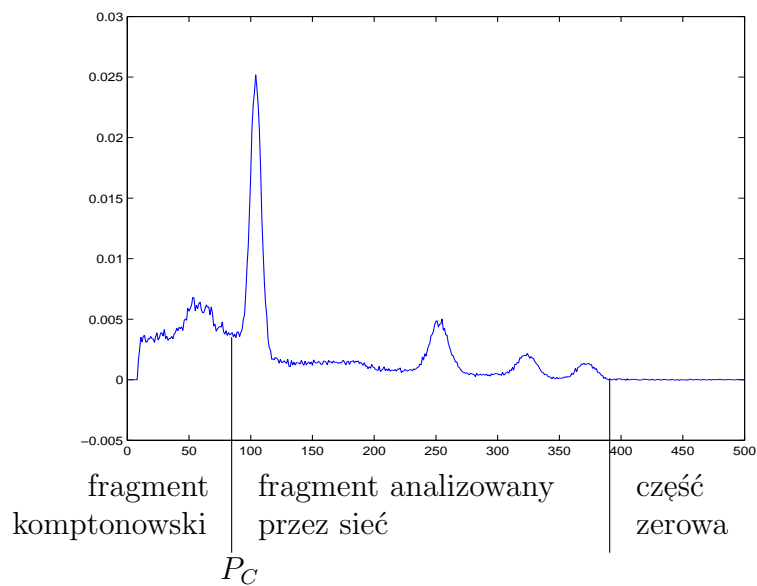


Rysunek 8.11: Widmo przed i po stabilizacji

Widmo przekształcone może już być analizowane przez sieć neuronową nauczoną rozpoznawania składu widm generowanych.

### 8.3 Wyznaczenie składu widma

Na wejście sieci neuronowej trafia wektor widmowy próbki, powstały poprzez sprowadzenie widma pomiarowego do postaci widma podstawowego oraz odcięcie komptonowskiej części widma poniżej progu. Progiem komptonowskim  $P_C$  jest kanał odpowiadający początkowi pierwszego piku w widmie podstawowym. Sieć analizująca 500-elementowy wektor widmowy posiada zatem mniej niż 500 wejść (rys. 8.12).



Rysunek 8.12: Podział widma

Tabela 8.1 poniżej przedstawia porównanie wyznaczonych licznikiem półprzewodnikowym wkładów do widm próbek pochodzących od poszczególnych izotopów oraz tych samych wartości wyznaczonych przez program na podstawie widm zmierzonych licznikiem scyntylacyjnym.

Tabela 8.1: Procentowe zawartości poszczególnych izotopów w widmach - porównanie wartości wyznaczonych detektorem półprzewodnikowym z wartościami wyznaczonymi przez program na podstawie analizy widm z licznika scyntylacyjnego

Pomiary wkładów poszczególnych izotopów do widm próbek						
	detektor półprzewodnikowy			licznik scyntylacyjny + program		
próbka	$c_{Cr}$	$c_{Mn}$	$c_{Fe}$	$c_{Cr}$	$c_{Mn}$	$c_{Fe}$
s2_29	0.327	0.274	0.399	0.301118	0.287780	0.411102
s2_34	0.331	0.283	0.386	0.309985	0.296025	0.393990
s2_44	0.285	0.398	0.317	0.249072	0.421587	0.329341
s2_53	0.228	0.502	0.27	0.198731	0.518674	0.282594
s2_58	0.244	0.509	0.247	0.212026	0.531855	0.256120
s2_68	0.202	0.594	0.204	0.098178	0.665724	0.236098
s2_73	0.191	0.649	0.16	0.131874	0.710030	0.158096

## 9 Wyniki

### 9.1 Wyznaczenie składu próbki

Sieć wyznacza wkład widm poszczególnych izotopów do widma próbki. Jednak udział pochodzący od izotopu w widmie próbki nie zawsze jest taki sam jak udział w próbce.  $c_{Cr} = 0.4$  nie musi oznaczać dokładnie 40% udziału izotopu  $Cr$  w badanej próbce. Spowodowane jest to różną wydajnością licznika scyntylicyjnego dla fotonów o różnej energii, co zostało opisane w dodatku A. Wydajność licznika scyntylicyjnego jest większa dla kwantów o mniejszej energii, tak więc udział chromu prawdopodobnie będzie mniejszy niż 40%. Wyniki  $[c_{Cr} c_{Mn} c_{Fe}]^T$  uzyskane przez sieć należy pomnożyć przez współczynniki, obliczone w oparciu o porównanie wartości wyznaczone przez sieć na podstawie widma z licznika scyntylicyjnego, z wartościami wyznaczonymi na podstawie analizy widma zmierzzonego detektorem półprzewodnikowym.

W oparciu o wyniki dla jednej z próbek, np. s2\_29:

$[u_{Cr}^{29} u_{Mn}^{29} u_{Fe}^{29}]$  - udziały procentowe izotopów w próbce, wyznaczone licznikiem półprzewodnikowym

$[c_{Cr}^{29} c_{Mn}^{29} c_{Fe}^{29}]$  - udziały izotopów w widmie wyznaczone przez sieć

wyznaczane są przeliczniki

$$\psi_{Cr} = \frac{u_{Cr}^{29}}{c_{Cr}^{29}} \quad \psi_{Mn} = \frac{u_{Mn}^{29}}{c_{Mn}^{29}} \quad \psi_{Fe} = \frac{u_{Fe}^{29}}{c_{Fe}^{29}} . \quad (9.1)$$

Dla każdej kolejnej próbki wyznaczone przez sieć wartości udziału w widmie można przeliczyć na udział w próbce:

$$u_{Cr} = \psi_{Cr} c_{Cr} \quad u_{Mn} = \psi_{Mn} c_{Mn} \quad u_{Fe} = \psi_{Fe} c_{Fe} . \quad (9.2)$$

### 9.2 Wyniki dla badanych próbek

Wykorzystane w pracy widma izotopów  $Cr^{51}$ ,  $Mn^{54}$  oraz  $Fe^{59}$  zostały zmierzone w celu określenia dyfuzji składników stali manganowo-chromowej, co zostało opisane w sekcji 1.2. W tabelach 9.1 i 9.2 znajdują się procentowe udziały poszczególnych izotopów w badanych próbkach. Zostały one wyznaczone dwoma sposobami; poprzez bezpośredni pomiar detektorem pół-przewodnikowym oraz poprzez pomiar licznikiem scyntylicyjnym i analizę widma przez program WIDMOWID. Program działa w oparciu o opisane wcześniej procedury. Opis dla użytkownika znajduje się w dodatku B. W tabelach uwzględnione zostały błędy pomiaru detektorów.

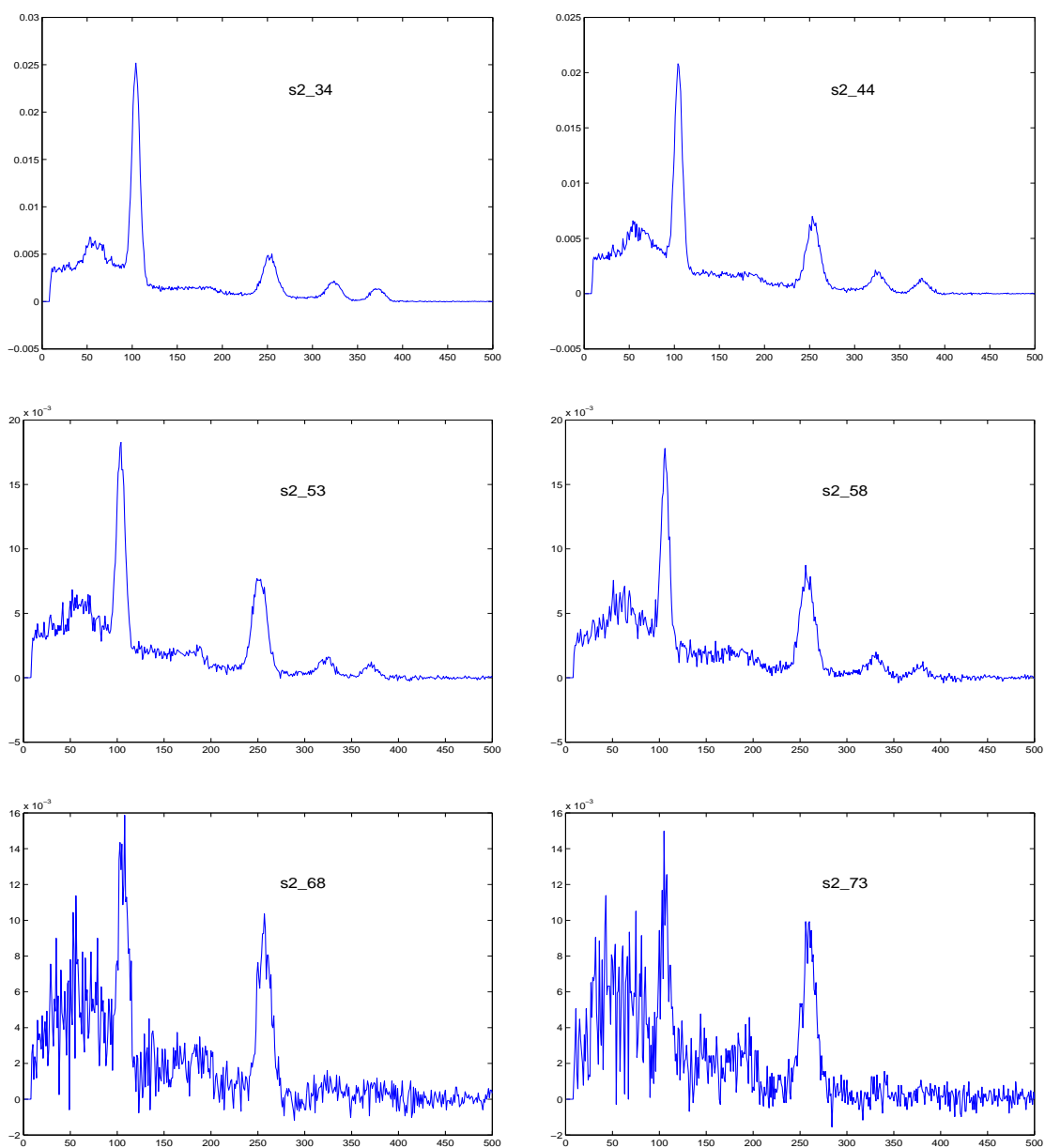
Tabela 9.1: Wartości udziałów procentowych poszczególnych izotopów w próbkach wyznaczone detektorem półprzewodnikowym

próbka	wyniki: licznik półprzewodnikowy		
	$u_{Cr}$	$u_{Mn}$	$u_{Fe}$
s2_29	$0.76 \pm 0.029$	$0.130 \pm 0.006$	$0.109 \pm 0.006$
s2_34	$0.74 \pm 0.031$	$0.141 \pm 0.007$	$0.112 \pm 0.007$
s2_44	$0.70 \pm 0.033$	$0.188 \pm 0.009$	$0.103 \pm 0.007$
s2_53	$0.65 \pm 0.045$	$0.251 \pm 0.014$	$0.092 \pm 0.009$
s2_58	$0.65 \pm 0.055$	$0.253 \pm 0.017$	$0.092 \pm 0.012$
s2_68	$0.60 \pm 0.097$	$0.330 \pm 0.036$	$0.064 \pm 0.017$
s2_73	$0.60 \pm 0.099$	$0.319 \pm 0.036$	$0.074 \pm 0.022$

Tabela 9.2: Wartości udziałów procentowych poszczególnych izotopów w próbkach wyznaczone przez program WIDMOWID w oparciu o widma zmierzone licznikiem scyntylicyjnym

próbka	wyniki: licznik scyntylicyjny + program		
	$u_{Cr}$	$u_{Mn}$	$u_{Fe}$
s2_29	$0.76 \pm 0.024$	$0.13 \pm 0.004$	$0.109 \pm 0.003$
s2_34	$0.75 \pm 0.026$	$0.14 \pm 0.005$	$0.108 \pm 0.004$
s2_44	$0.68 \pm 0.028$	$0.21 \pm 0.009$	$0.095 \pm 0.004$
s2_53	$0.63 \pm 0.04$	$0.28 \pm 0.019$	$0.081 \pm 0.005$
s2_58	$0.60 \pm 0.052$	$0.30 \pm 0.026$	$0.091 \pm 0.008$
s2_68	$0.56 \pm 0.12$	$0.39 \pm 0.084$	$0.043 \pm 0.009$
s2_73	$0.44 \pm 0.11$	$0.48 \pm 0.12$	$0.068 \pm 0.017$

Dla dalszych próbek wyniki są coraz mniej dokładne. Próbki te pochodzą z fragmentów walca położonych dalej od miejsca naniesienia aktywowanych izotopów. W związku z tym ilość izotopów, a równocześnie ich aktywność, jest dużo mniejsza, co sprawia, że stosunek sygnału do szumu maleje i błąd rozpoznawania jest większy. Na rysunku 9.1 przedstawione zostały badane widma pomiarowe.



Rysunek 9.1: Widma badanych próbek

W tabelach 9.3 i 9.4 zostały podane aktywności poszczególnych izotopów, obliczone w oparciu o sumaryczne aktywności wszystkich izotopów oraz ich udziały procentowe. Ilustracją danych z poniższych tabel jest wykres na rysunku 9.2 aktywności w funkcji odległości od początku walca (1.2).

Tabela 9.3: Aktywności wyznaczone detektorem półprzewodnikowym

próbka	$x[cm]$	$A_{Cr}[Bq]$	$A_{Mn}[Bq]$	$A_{Fe}[Bq]$	$A_{suma}[Bq]$
s2_29	0.0028	99224 ± 3780	16985 ± 787	14197 ± 838	130404
s2_34	0.0037	84951 ± 3527	15993 ± 771	12735 ± 784	113707
s2_44	0.0056	68621 ± 3222	18197 ± 837	9971 ± 712	96805
s2_53	0.0078	31350 ± 2135	11969 ± 665	4390 ± 456	47720
s2_58	0.0091	21384 ± 1807	8279 ± 566	3004 ± 390	32659
s2_68	0.0119	7138 ± 1151	3898 ± 429	755 ± 209	11796
s2_73	0.0132	6242 ± 1015	3278 ± 371	761 ± 224	10285

Tabela 9.4: Aktywności wyznaczone przez program na podstawie widm zmierzonych licznikiem scyntylacyjnym

próbka	$x[cm]$	$A_{Cr}[Bq]$	$A_{Mn}[Bq]$	$A_{Fe}[Bq]$	$A_{suma}[Bq]$
s2_29	0.0028	99224 ± 3106	16981 ± 531	14197 ± 444	130404
s2_34	0.0037	84950 ± 2959	15780 ± 545	12280 ± 424	113707
s2_44	0.0056	68639 ± 2673	20933 ± 839	9196 ± 368	96805
s2_53	0.0078	30217 ± 1943	13609 ± 875	3913 ± 251	47720
s2_58	0.0091	19659 ± 1705	10018 ± 869	2971 ± 257	32659
s2_68	0.0119	6671 ± 1433	4616 ± 991	507 ± 108	11796
s2_73	0.0132	4561 ± 1131	5026 ± 1246	699 ± 173	10285



Rysunek 9.2: Rozkład koncentracji znacznika wzdłuż osi walca

## 10 Wnioski

Na podstawie wyników można uznać, iż eksperyment się powiódł i sieć dobrze interpretuje widma. Do pracy dołączony został program działający w oparciu o opisane w pracy algorytm (dodatek B). Aktualnie jest on jeszcze w surowej wersji plikowej, jednak może być już pomocnym narzędziem przy analizie i interpretacji widm z liczników scyntylicyjnych.

Badania i prace poświęcone sieciom neuronowym prowadzą do powstawania nowych, coraz efektywniejszych metod uczenia [6]. Równocześnie rośnie moc obliczeniowa komputerów. Odgrywa ona istotną rolę w trakcie eksperymentów z zastosowaniem sieci neuronowych, które często wymagają wielokrotnych powtórzeń tysięcy operacji arytmetycznych. To sprawia, iż wykorzystywanie tzw. sztucznej inteligencji w wielu różnych dziedzinach techniki, w tym także w technice jądrowej, staje się dziś coraz bardziej powszechne.

Zastosowanie sieci neuronowych wymaga jednak znajomości problemu, do którego są one stosowane. Zdarza się, iż dane pomiarowe, zanim trafią na wejście sieci, muszą zostać odpowiednio przetworzone. Przykładem tego są opisane w pracy algorytmy przekształcania widm.

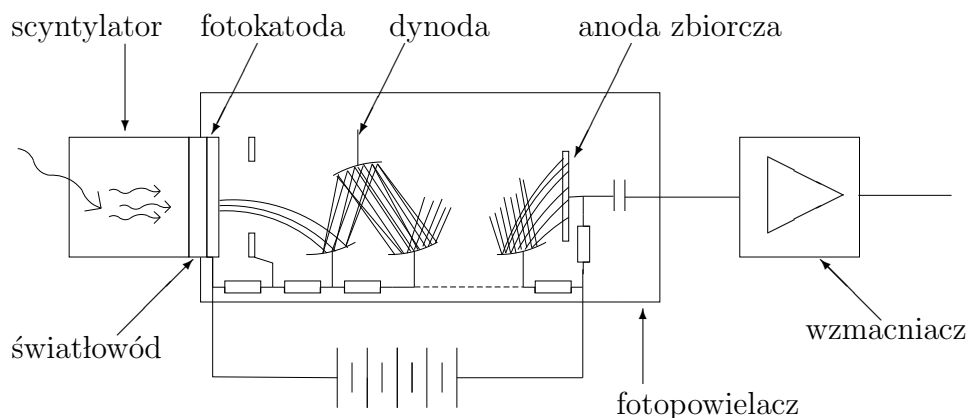
Architektura i schemat działania zastosowanej sieci są bardzo proste, dlatego dane interpretowane przez sieć wymagają uprzedniego przetworzenia. Prawdopodobnie istnieje możliwość stworzenia skomplikowanej sieci, która sama będzie dokonywać lokalizacji pików, przekształcania oraz stabilizacji widma. Temat ten wykracza jednak poza ramy tej pracy.

## A Detektory promieniowania jądowego

Detekcja promieniowania jądowego możliwa jest dzięki jego oddziaływaniu z materia. Oddziaływanie to w aparaturze detektora zostaje przetworzone na sygnał elektryczny. Detektory rejestrują liczbę przelatujących cząstek promieniowania. Jednym z rodzajów detektorów są detektory spektrometryczne, które poza liczbą cząstek rejestrują także ich energie [1]. Pozwala to na wyznaczenie liczby cząstek w funkcji ich energii, czyli widma (spektrum) promieniowania. W niniejszej pracy użyte zostały wyniki pomiarów pochodzące z dwóch detektorów spektrometrycznych: scyntylacyjnego i półprzewodnikowego.

### A.1 Licznik scyntylacyjny

Licznik scyntylacyjny składa się ze scyntylatora, fotopowielacza i układu wzmacniającego. Scyntylator to fragment kryształu półprzewodnikowego. Padający na niego foton o dużej energii generuje w jego objętości strumień fotonów o energii stosunkowo małej. Pomiedzy scyntylatorem a fotokatodą znajduje się światłowód lub warstwa substancji zapewniającej dobry kontakt optyczny. Fotony trafiają na znajdującą się w fotopowielaczu fotokatodę, z której fotony wybijają elektrony. Elektrony te, przyspieszone polem elektrycznym, lecą wzdłuż bańki próżniowej fotopowielacza. Na ich drodze znajduje się pewna liczba dynod. Pomiedzy katodą a dynodami istnieje napięcie przyspieszające. Elektrony, uderzając w dynody, wybijają z nich kolejne elektrony [1] [3].



Rysunek A.1: Licznik scyntylacyjny

Jeden elektron wybija z każdej dynody kilka kolejnych. Współczynniki  $M_f$  wzrostu strumienia elektronów jest zadany wzorem

$$M_f \approx \delta^n, \quad (\text{A.1})$$

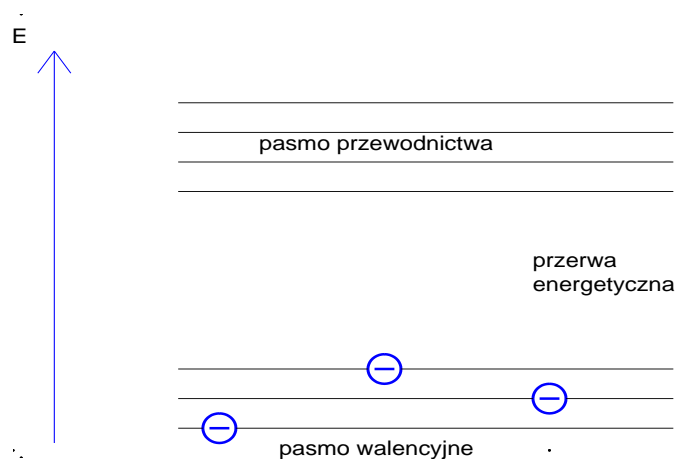
gdzie

- $\delta$  – współczynnik emisji wtórnej
- $n$  – liczba dynod w fotopowielaczu.

Na końcu fotopowielacza elektrony uderzają w anodę zbiorczą, wywołując w obwodzie elektrycznym impuls napięcia. Wielkość impulsu jest proporcjonalna do liczby elektronów na końcu drogi, która zależy od ich liczby wytworzonej przez strumień fotonów na katodzie. Liczba elektronów wybitych z katody zależy od natężenia strumienia fotonów wylatujących ze scyntylatora, a to z kolei zależy od energii fotonu padającego na scyntylator. W ten sposób energia padającego kwantu przekładana jest na amplitudę impulsu elektrycznego. Amplituda ta jest jednak bardzo mała, tak więc impuls z fotopowielacza jest wzmacniany we wzmacniaczu.

## Scyntylator

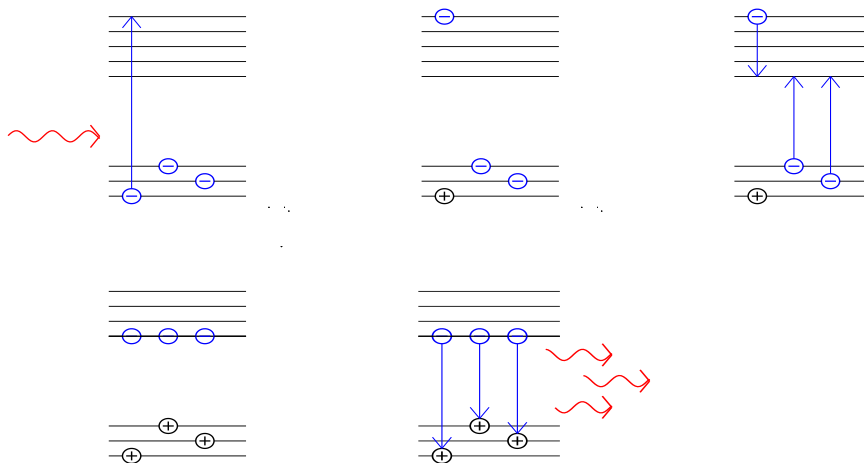
Scyntylator to krystal pólprzewodnika. Zgodnie z pasmową teorią ciała stałego, dozwolone stany elektronowe w tym kryształ są skwantowane i znajdują się w dwóch pasmach - walencyjnym i przewodnictwa. Pasma walencyjne stanowią elektrony związane w atomach, pasmo przewodnictwa - elektrony swobodne. Pomiedzy pasmami znajduje się przerwa energetyczna, gdzie nie ma dozwolonych stanów.



Rysunek A.2: Pasmowa teoria pólprzewodnictwa

Wpadający foton o energii  $E_\gamma$  większej od energii jonizacji atomu  $E_W$ , wybija z pasma walencyjnego jeden elektron, który posiadając energię kinetyczną  $E_k = E_\gamma - E_W$  stopniowo traci ją, jonizując kolejne atomy i wybijając do pasma przewodnictwa kolejne elektrony. Wskutek tego, w paśmie walencyjnym tworzą się dziury, czyli miejsca gdzie powinien znajdować się elektron a go tam nie ma, bo został „wybity”. Po chwili elektrony wskutek zderzeń w paśmie przewodnictwa tracą energię. Wtedy, gdy trafiają w

poblize dziur będących dodatnio naładowanymi punktami przestrzeni, „wpadają” do nich (rekombinują) i powracają do pierwotnego stanu związanego w paśmie walencyjnym. Czas trwania stanu wzbudzonego jest rzędu  $10^{-8}$  s.



Rysunek A.3: Mechanizm powstawania impulsów świetlnych w scyntylatorze

Uwolnienie elektronu wymaga dostarczenia energii. W momencie wpanięcia do dziury elektron oddaje ją w postaci wyemitowanego fotonu promieniowania. Przez kryształ leci tyle fotonów, ile elektronów wybił do pasma przewodnictwa pionier.

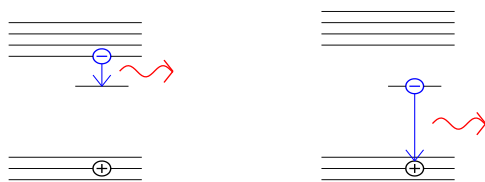
W rezultacie, jeden foton o dużej energii, w scyntylatorze zamienia się na strumień fotonów o małej energii. Patrząc na to z drugiej strony, impuls o małym natężeniu jest zamieniany na impuls o stosunkowo dużym natężeniu, w tym wypadku nazywany scyntylacjami świetlnymi.

### Scyntylator NaI(Tl)

Jednym ze stosowanych scyntylatorów jest krzystal jodku sodu NaI domieszkowany talem (Tl). Sód oddaje swój jedyny swobodny elektron jodowi, który takich elektronów ma siedem. W ten sposób tworzy się oktet elektronowy - najtrwalszy układ. Wybicie elektronu z takiego układu wymaga dostarczenia mu dużej energii przez foton lub inny elektron. To powoduje istnienie przerwy energetycznej pomiędzy pasmami. Przerwa ta, a tym samym energia fotonu pochodzącego od „spadającego” elektronu, odpowiada promieniowaniu w zakresie ultrafioletu.

Największy przekrój czynny na zjawisko fotoelektryczne na katodzie mają fotony światła niebieskiego, których energia jest mniejsza od energii fotonów UV. Tak więc w celu poprawy wydajności, do kryształu NaI wprowadza się tal (Tl), który ma trzy elektrony walencyjne. Jeden z nich oddaje jodowi, natomiast dwa pozostałe są bardzo słabo

związane, co powoduje powstanie pod pasmem walencyjnym dodatkowego poziomu energetycznego.



Rysunek A.4: Donorowy poziom talu

Różnica poziomów energetycznych pomiędzy pasmem przewodnictwa a poziomem utworzonym przez domieszkowany tal odpowiada energii fotonów światła niebieskiego. Taki foton zostanie wyemitowany w momencie „spadnięcia” elektronu z pasma przewodnictwa na donorowy poziom talu. Dla fotonów o energii różnej od szerokości przerwy kryształ jest „przezroczysty”, wskutek czego mogą się one swobodnie z niego wydostać bez wchodzenia w dodatkowe oddziaływania (jak kolejne wybicie elektronu do pasma przewodnictwa).

## A.2 Wady liczników scyntylacyjnych

Wady liczników scyntylacyjnych, takich jak NaI(Tl), to przede wszystkim

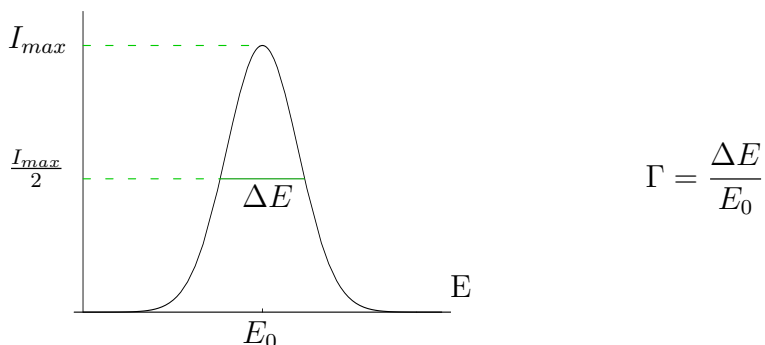
- słaba zdolność rozdzielcza
- silny efekt komptonowski, powodowany rozpraszaniem się fotonów na elektronach w scyntylatorze
- efekt „pływania”
- słaba wydajność detekcji w zakresie wysokich energii

### Zdolność rozdzielcza

Ponieważ fotony pochodzące z rozpadu określonego stanu jądrowego w skali makroskopowej mają tę samą, ściśle określoną energię (z dokładnością do nieoznaczoności Heisenberga i odrzutu Mössbauera), powinniśmy spodziewać się widma składającego się z bardzo wąskich linii. Tymczasem w widmie pojawiają się nie linie, lecz „piki”. Jest to wynikiem tego, iż na skutek działania fotonów o tej samej energii powstają impulsy o różnych amplitudach, rozrzuconych wokół pewnej wartości średniej. Spowodowane jest to zależnością amplitudy impulsu nie tylko od energii fotonu, lecz także od wielu innych czynników, takich jak liczba wybijanych do pasma przewodnictwa elektronów, liczba generowanych przez nie „niebieskich” fotonów, liczba tych fotonów rozpraszanych komptonowsko w

scyntylnatorze oraz liczba elektronów wybijanych z kolejnych dynod fotopowielacza. Zgodnie z twierdzeniami statystyki, fluktuacje wielu niezależnych od siebie wielkości dają w rezultacie normalny rozkład błędów, tak więc pik jest to krzywa Gaussa.

Zdolność rozdzielczą określa się poprzez rozmycie pików  $\Gamma$ , zdefiniowane jako stosunek szerokości pików w połowie jego wysokości do energii odpowiadającej położeniu jego maksimum.



Rysunek A.5: Szerokość połówkowa pików

Zdolność rozdzielcza detektora jest tym lepsza, im mniejsze jest rozmycie pików. Szerokość połówkowa pików jest wyrażona wzorem

$$\Delta E = 2,35\sqrt{F \varepsilon E_0}, \quad (\text{A.2})$$

gdzie

$F$  – współczynnik Fano,

$\varepsilon$  – średnia wartość minimalnej energii potrzebnej na zapoczątkowanie w liczniku procesów prowadzących do powstania impulsu.

W liczniku rośnie ona proporcjonalnie do pierwiastka z energii

$$\Delta E \sim \sqrt{E_0}$$

co widać m.in. na badanych w niniejszej pracy widmach.

Wartość  $\varepsilon$  dla licznika scyntylnacyjnego wynosi 0.3 - 1000 keV [1]. W tym przypadku jest to energia tracona przez foton w scyntylnatorze, przypadająca średnio na jeden elektron wyzwalany z katody. Jest to spowodowane wspomnianym wcześniej oddziaływaniem komptonowskim elektronów w scyntylnatorze. Odpowiednia wartość  $\varepsilon$ , wystarczająca na utworzenie pary elektron-dziura w liczniku półprzewodnikowym, wynosi około 3 eV. Po podstawieniu do wzoru (A.2) widać, że zdolność rozdzielcza licznika półprzewodnikowego jest przynajmniej dziesięciokrotnie lepsza niż scyntylnacyjnego.

## **Efekt „pływania”**

Efekt ten polega na tym, iż w różnych pomiarach położenia tych samych pików w widmie są rozrzucone wokół pewnej wartości średniej, gdzie powinny się znajdować. Jest to wynikiem różnego wzmocnienia sygnałów, na który wpływ mają zjawiska stochastyczne, takie jak fluktuacje liczby nośników ładunku wpływających do bramek tranzystorów układu wzmacniającego, znane w elektronice jako tzw. szum śrutowy. Filozoficznie rzecz ujmując, jest to rezultat występowania ładunku elektrycznego w postaci skwantowanych porcji, jakimi są elektrony.

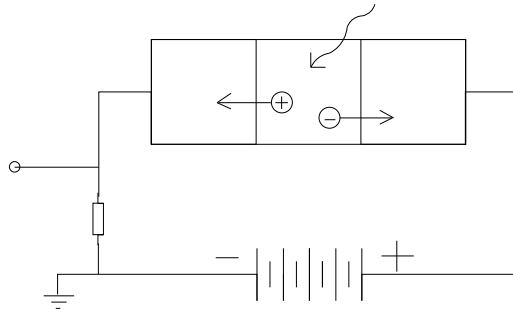
## **Wydajność detekcji**

Wewnętrzna wydajność detekcji licznika zdefiniowana jest jako stosunek liczby impulsów do liczby fotonów padających na element czuły detektora. W przypadku liczników scyntylacyjnych, dla każdej energii rejestrowanych fotonów istnieje optymalna grubość scyntylatora, przy której wydajność osiąga maksimum [2]. Im większa jest energia fotonów, tym grubszy powinien być scyntylator. Dla scyntylatora o grubości 1cm odpowiednia energia fotonów to niecałe 100 keV. Dla izotopów użytych w tej pracy najmniejsza energia kwantów to 320 keV ( $Cr^{51}$ ). Można zatem spodziewać się, że dla badanych widm przy wzroście energii wydajność detekcji będzie maleć. W konsekwencji, wyznaczona przez sieć wartość stężenia procentowego żelaza, którego kwanty mają energię większą od 1 MeV, będzie zaniżona w stosunku do wartości rzeczywistych.

## **A.3 Detektory półprzewodnikowe**

Częścią mierzącą w detektorach półprzewodnikowych jest warstwa zubożona złącza p-n spolaryzowanego zaporowo (rys. A.6). Podobnie jak w scyntylatorze, wpadający foton wybija elektron, który jonizuje dalsze atomy, przenosząc pewną liczbę elektronów do pasma przewodnictwa. W kryształach powstają swobodne nośniki prądu - elektrony i dziury. Wskutek przyłożonej różnicy potencjałów elektrony i dziury przemieszczają się, powodując spadek napięcia na rezystorze, czyli impuls.





Rysunek A.6: Złącze p-n spolaryzowane zaporowo - element czuły detektora półprzewodnikowego

Zaletą detektorów półprzewodnikowych jest ich dobra zdolność rozdzielcza. Jednak ich wykonanie wymaga dużej precyzji, co sprawia, że urządzenia te są bardzo drogie. Kryształ półprzewodnika musi być wyjątkowo czysty i nie zawierać żadnych domieszek (oprócz donora n lub akceptora p). W przeciwnym wypadku będzie następować termiczna generacja nośników, powodując ciągle powstawanie impulsów (szum).

Innym wymogiem stawianym licznikom półprzewodnikowym jest stosunkowo jest duża warstwa zubożona, ponieważ to ona stanowi objętość czynną licznika.

## B Opis programu WIDMOWID

Program *Widmowid* działa w środowisku Matlab. Celem programu jest wyznaczenie procentowego składu izotopowego próbek, na podstawie ich widma promieniowania gamma.

Idea jest następująca: użytkownik podaje zmierzone oddzielnie widma każdego z izotopów składowych, zapisane jako kolumny liczby zliczeń w plikach tekstowych. Po ich przetworzeniu, w oparciu o widmo promieniowania badanej próbki, program jest w stanie określić wkład do widma pochodzący od każdego z izotopów. Uwzględniając poprawkę na różną wydajność licznika na fotony o różnych energiach, opisaną w rozdziale 9 oraz dodatku A, wkłady poszczególnych izotopów do widma można przeliczyć na w oparciu o wzór 9.2 na ich wkłady procentowe w próbce.

Istnieje również możliwość rozpoznawania składu próbek, których widma zostały zmierzone innym licznikiem o innej liczbie kanałów niż ten, którym mierzone były widma izotopów składowych.

### B.1 Nowy projekt

Projekt jest zdefiniowany przez zbiór izotopów składowych w badanych próbkach. Jeżeli program ma rozpoznawać widma próbek zawierających jakieś dodatkowe izotopy, których nie było wcześniej, należy utworzyć nowy projekt.

Nowy projekt należy zacząć od utworzenia pliku tekstowego, w którym podane będą w kolumnie nazwy plików zawierających oddzielnie zmierzone widma izotopów składowych. Nazwa tego pliku jest równocześnie nazwą projektu.

Wszystkie wejściowe pliki tworzone przez użytkownika muszą mieć rozszerzenie `.txt`. Projekt `nowy`, w którym wyznaczamy ilości chromu  $Cr^{51}$ , manganu  $Mn^{54}$  i żelaza  $Fe^{59}$ , zaczniemy od utworzenia pliku `nowy.txt` i zapisania w nim nazw plików `cr_2.txt`, `mn_2.txt` i `fe_2.txt` z widmami składowych izotopów. Zawartość pliku `nowy.txt`:

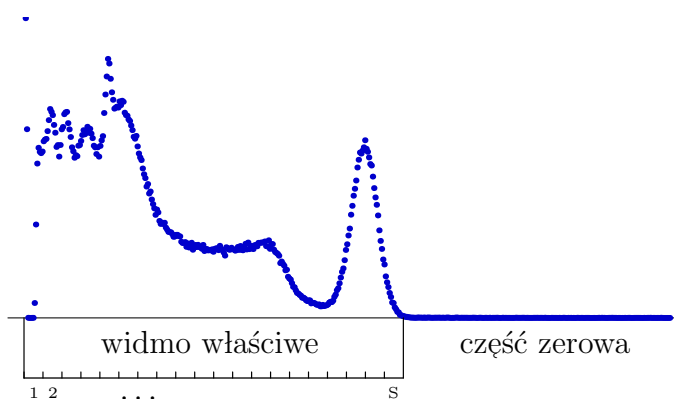
```
cr_2
mn_2
fe_2
```

Drugi plik zawiera ustawienia przeszukiwania widma. Jego nazwa może być dowolna np. `ust_wd.txt`. Poniższa tabelka przedstawia przykładową zawartość takiego pliku oraz opis zmiennych.

Tabela B.1: Wartości w pliku zawierającym ustawienia przeszukiwania widma

wartość	zmienna	opis
4.0e-4	maxszum	współczynnik maksymalnego szumu
1.0e-5	mingrad	współczynnik minimalnego gradientu
100	wezly	liczba węzłów siatki (fragmentów)
3	l_min	minimalna liczba kroków malejącego gradientu prawego skrzydła piku
6	ls_max	maksymalna liczba kroków nierosnącego gradientu na szczycie piku
2	lp_min	minimalna liczba kroków rosnącego gradientu lewego skrzydła piku
5	przewid	przewidywana liczba pików

W pierwszym etapie program sumuje podane widma składowe tworząc ich pierwszą kombinację (widmo podstawowe). Celem jest rozpoznanie pików i zlokalizowanie maksimów. Prawidłowe rozpoznanie wymaga podania odpowiednich ustawień przeszukiwania. Program przeszukuje widmo od prawej strony - od największej do najmniejszej amplitudy. Z reguły widmo posiada część zerową w zakresie wysokich amplitud (energii) - w wysokich kanałach liczba zliczeń jest równa zero. Ta część widma nie jest analizowana przez procedurę szukającą pików. Przeszukiwane jest widmo właściwe - część niezerowa. Jednak widmo zmierzone licznikiem nie jest czystą linią zerową, ze względu na szum aparatury elektronicznej. Należy zatem podać współczynnik maksymalnego szumu. Współczynnik `maxszum` pomnożony przez największą wartość natężenia (po znormalizowaniu) w widmie wyznacza maksymalny poziom szumu. Jeżeli dwie kolejne wartości w tablicy z widmem przekroczą ten próg, to pierwsza z nich jest końcem widma właściwego, który zazwyczaj pokrywa się z końcem piku o największej energii.



Rysunek B.1: Podział widma

Widmo właściwe jest pokrywane siatką fragmentów, które aproksymowane są prostymi. Fragmenty te są następnie skanowane pod kątem wartości parametru nachylenia prostej (gradientu). Jeżeli gradient fragmentu jest większy od zdefiniowanej minimalnej wartości ( $g_{min} = \text{mingrad} \times \text{największa wartość w widmie}$ ), to fragment ten jest „podejrzany o bycie końcem pików”. Jeżeli w `l_min` kolejnych krokach gradient będzie maleć, to procedura akceptuje tę część widma jako prawe skrzydło pików i w dalszych krokach szuka szczytu, gdzie gradient jest mniejszy od zdefiniowanej minimalnej wartości. Po szczycie oczekiwany jest fragment, dla którego gradient jest większy od  $g_{min}$ . Jeżeli nie pojawi się on w `ls_max` kolejnych krokach, pik jest anulowany (przykładem jest plateau przed pikiem w powyższym widmie). Podobnie, jeżeli liczba fragmentów na lewym skrzydle pików jest mniejsza od `lp_min`, pik także jest anulowany.

Różne widma mają różny stopień zaszumienia, piki są mniej lub bardziej strome. Program podaje znalezione położenia maksimum pików oraz wykreśla widmo. Wizualnie można ocenić czy wynik jest poprawny. Jeżeli nie, trzeba odpowiednio zmienić parametry przeszukiwania lub podać położenia maksimum samodzielnie, co zostanie opisane w dalszej części.

Projekt nowy z parametrami przeszukiwania widma `ust_wd` tworzymy wpisując w oknie dialogowym Matlab

```
kombinator('nowy', 'ust_wd');
```

Widma składowe są sumowane i normalizowane, a następnie przepisywane do plików o tych samych nazwach z rozszerzeniami `.sk1`. Pełne nazwy tych plików są zapisywane do pliku `nowy.baza`. Tworzone jest widmo podstawowe, które jest zapisywane do pliku `nowy.kom`. Program wyświetla wykres widma, tablicę położenia maksimum znalezionych pików oraz koniec komptonowskiej części widma i koniec widma właściwego. Wartości te są zapisywane do plików: położenia maksimum do pliku `nowy.max`, pozostałe wielkości do pliku `nowy.prg`. Wszystkie wyznaczone przez program wartości można poprawić, edytując odpowiednie pliki.

## B.2 Ciąg uczący

Mając gotowy projekt (`nowy`) generujemy ciąg widm, które posłużą do nauczania sieci. Niech ciąg nazywa się np. `ciag1`, i składa się ze 100 generowanych widm. Tworzymy go wpisując

```
pregenucz('ciag1');  
uczgenerator('nowy', 100);
```

Utworzone zostaną dwa pliki: `ciag1_inp.mat` i `ciag1_tar.mat`.

### B.3 Nowa sieć

Architektura sieci jest zdeterminowana przez ciąg uczący. Liczba kanałów widma właściwego po odcięciu komptonowskiej części widma jest liczbą wejść sieci, natomiast liczba izotopów składowych to liczba neuronów. Mając projekt i ciąg uczący możemy utworzyć sieć.

Najpierw należy utworzyć plik tekstowy o nazwie takiej jak sieć, np. `siec1.txt`. W pliku tym znajdują się parametry uczenia sieci: procedura ucząca i liczba powtórzeń ciągu uczącego (iteracji). Przykładowa zawartość pliku `siec1.txt`:

```
traincgf
100
```

Sieć aktywujemy wpisując

```
przygotuj('siec1','ciag1');
aktywuj('siec1');
```

Sieć jest zapisywana na dysku jako plik `siec1.mat`, i gotowa do rozpoznawania widm próbek.

### B.4 Testowanie sieci

Sieć można przetestować na widmach generowanych. Należy utworzyć ciąg testujący np. `ciag2`, i wpisać

```
pretest('siec1','ciag2');
testuj('siec1','ciag2','nowy');
```

Wyniki tego testu zostaną zapisane do pliku `siec1_test.tex`. Można go otworzyć i przekompilować w programach PCTeX32 lub WinEdt.

### B.5 Skład widma

Najpierw należy przygotować odpowiednią sieć, np. `siec1`

```
ustaw('siec1');
```

W celu rozpoznania składu widma, np. s2\_29 zapisanego w pliku s2\_29.txt , należy wpisać

```
ilosc=probki('s2_29','siec1','nowy','ust_wd');
```

Widmo jest przekształcane w taki sposób, aby maksima pików znalazły się w tych samych położeniach co w widmie podstawowym. Przekształcone widmo jest zapisywane do pliku s2\_29.wid, a wkłady do widma pochodzące od poszczególnych izotopów do pliku s2\_29.ile.

## B.6 Dostosowanie widma

Widma zmierzone licznikiem o innej liczbie kanałów trzeba najpierw przeskalować. Skalowanie przykładowej próbki probka1:

```
przeskaluj('nowy','probka1','ust_wd')
```

Przeskalowane widmo zapisywane jest do pliku probka1\_p.txt. Skład widma można już wyznaczyć, wpisując

```
ilosc=probki('probka1_p','siec1','nowy','ust_wd');
```

Należy zwrócić uwagę na ustawienia przeszukiwania w pliku ust\_wd.txt. Dla innej liczby kanałów może być np. inny współczynnik minimalnego gradientu.

## B.7 Problem lokalizacji pików

Najczęściej pojawiającym się problemem jest złe rozpoznanie położenia maksimów pików w badanym widmie. Można to korygować zmieniając ustawienia przeszukiwania, co zostało opisane powyżej. Dobranie właściwych ustawień odbywa się tzw. metodą prób i błędów, przez co często wymaga wielokrotnego uruchomienia procedury. Istnieje również możliwość ominięcia tego problemu poprzez ręczne podanie programowi położenia maksimów pików w badanym widmie. Kiedy program wyświetla komunikat o niezgadzącej się liczbie pików, wyświetla również widmo badanej próbki. Wizualnie można oszacować położenia maksimów. Jeżeli chcemy podać położenia maksimów pików ręcznie, należy utworzyć odpowiedni plik tekstowy, który będzie je zawierał. Nazwa pliku musi być powiązana z nazwą badanej próbki. Przykładowo, jeżeli badanym widmem jest 's2\_34', to nazwa pliku powinna być

```
s2_34piki.txt
```

W trakcie badania widma program sprawdza, czy taki plik istnieje. Jeżeli nie, sam wyznacza maksima. W pliku `s2_34piki.txt` ich położenia muszą być podane w kolumnie, od największej do najmniejszej energii. Przykładowa zawartość takiego pliku to :

375

325

254

104

## Bibliografia

- [1] *B. Dziunikowski*: Podstawy rentgenowskiej radioizotopowej analizy fluorescencyjnej, Skrypty uczelniane AGH, Kraków 1979.
- [2] *B. Dziunikowski*: Zastosowania izotopów promieniotwórczych, Wydawnictwa AGH, Kraków 1995.
- [3] *B. Dziunikowski, S.J. Kalita*: Ćwiczenia laboratoryjne z jądrowych metod pomiarowych, Wydawnictwa AGH, Kraków 1995.
- [4] *R. Tadeusiewicz*: Sieci neuronowe, Akademicka Oficyna Wydawnicza, Warszawa 1993.
- [5] *J. Żurada, M. Barski, W. Jędruch*: Sztuczne sieci neuronowe, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 1996.
- [6] Pomoc programu *Matlab*.