

ENERJİ DAĞILIM SPEKTROSKOPİSİ KULLANILARAK GERÇEK ZAMANLI OTOMATİK MİNERAL SINIFLANDIRILMASI

Efe Akkaş^a, H. Evren Çubukçu^a ve Harun Artuner^b

^a Hacettepe Üniversitesi, Jeoloji Mühendisliği Bölümü, Beytepe, Ankara

^b Hacettepe Üniversitesi, Bilgisayar Mühendisliği Bölümü, Beytepe, Ankara
(akkasefe@hacettepe.edu.tr)

ÖZ

Hızlı ve doğru mineral analizleri kayaçları inceleyen bütün bilim dallarında bir gereklilik haline gelmiştir. Elektron Mikroskobu ile bütünleşik Enerji Dağılım Spektroskopisi (EDS), örnek yüzeyindeki atomların elektron demeti ile uyarılmasıyla oluşan karakteristik X-ışınlarının enerji miktarını ve incelenen noktanın element içeriğini hesaplar. Minerallerin element içeriklerini EDS ile elde etmek hızlı ve kolaydır ancak veri sayısı arttıkça sınıflandırma süresi uzamaktadır. Aynı zamanda farklı mineral örneklerine ait element verileri benzerlik gösterebilmekte, bu da doğru sınıflandırma yapmayı zorlaştırmaktadır. Bununla birlikte, üretilen X-ışınları, incelenen mineralin yüzey topoğrafyası, elektrik iletkenliği, örnek yüzeyine gönderilen elektron demetinin ivmelendiği gerilim, akım değeri, elektron demetinin çapı gibi; çalışmadan çalışmaya farklılık gösterebilecek özelliklere bağlıdır. Bu özelliklerin değişebilmesi durumunda aynı minerallere ait analizlerde farklılıklar meydana gelmekte, bu da hem hızlı hem de doğru sınıflandırma yapılmasını engellemektedir. Bu çalışmanın amacı farklı minerallere ait kimyasal veriyi, sabit olmayan çalışma koşullarında, otomatik olarak sınıflandırabilecek uzman bir sisteme temel oluşturmaktır. En iyi sonuçlar bir karar ağacı sınıflama algoritması olan C5.0 (Quinlan) kullanılarak elde edilmiştir. Karar ağacı algoritmaları, “if/then” kural setleri kullanılarak kolay anlaşılır ve hızlı sınıflamalar yapabilmektedir.

Sınıflandırma için farklı kayaç örnekleri incelenmiş ve 12 ayrı mineral grubu (klinopiroksen, ortopiroksen, amfibol, kuvars, olivin, biyotit, apatit, zirkon, K-feldspat, plajiyoklaz, manyetit, titanomanyetit) seçilmiştir. Her bir mineral grubu için 240 referans, 200 test EDS verisi sabit olmayan koşullar altında alınmıştır. Referans EDS verileri karar ağacı sınıflamasında eğitim için kullanılmıştır. Eğitim sonrasında oluşturulan karar ağacında mineral gruplarından alınmış olan test verileri her seferinde farklı büyüklükte gruplara bölünerek denenmiş ve en düşüğü %90 oranında olmak üzere, her veri grubu için farklı doğruluk oranları elde edilmiştir. Ayrıca yapılan denemelerde özellikle ortopiroksen ((Mg, Fe)₂[SiO₆]) ve olivin ((Mg, Fe)₂[SiO₄]) gibi kimyasal olarak benzer elementleri farklı oranda içeren mineraller başarılı bir şekilde birbirinden ayırt edilebilmiştir. Elde edilen sonuçlar; minerallere ait EDS analiz verileri üzerinde karar ağacı algoritması uygulanarak, çalışma koşullarından etkilenmeyen, yüksek verimli, otomatik mineral sınıflamalarının yapılabileceğini göstermektedir.

Anahtar Kelimeler: Otomatik mineral sınıflama, enerji dağılım spektrometresi, karar ağacı algoritması, elektron mikroskobu...

REAL TIME AUTOMATED MINERAL CLASSIFICATION USING ENERGY DISPERSIVE SPECTROSCOPY

Efe Akkaş^a, H. Evren Çubukçu^a and Harun Artuner^b

^aHacettepe University, Department of Geological Engineering, Beytepe, Ankara

^bHacettepe University, Department of Computer Engineering, Beytepe, Ankara
(akkasefe@hacettepe.edu.tr)

ABSTRACT

Fast and accurate mineral analysis became a necessity in all branches of science interested in rocks. Energy Dispersive X-ray Spectrometer (EDS) integrated with Scanning Electron Microscope (SEM) measures the energy of characteristic X-rays which are generated due to the excitation of the sample surface, thus calculates the elemental content under the spot. Obtaining elemental contents of a mineral using EDS is fast and easy however time required becomes longer when number of analyzed data increases. At the same time, accurate classification becomes difficult when similar elemental composition is similar in different mineral samples. In addition, the properties of the analyzed minerals (topography, electric conductivity) and electron beam (accelerating voltage, beam current, spot size etc.) can be different in each practice which affect the produced X-rays. These properties may vary from to study to study and make differences in elemental contents of the same mineral. Hence, fast and accurate mineral classification becomes difficult. The main aim of this study is to create a base for an expert system which makes automated, fast and accurate classification of numerous chemical data sets taken from different minerals under non-standard working conditions. Best results have been obtained using C5.0 Decision Tree (Quinlan) algorithm. Decision trees can yield fast and easily understood classification using with "if/then" rule sets.

Twelve distinct mineral groups (olivine, orthopyroxene, clinopyroxene, apatite, amphibole, plagioclase, K-feldspar, zircon, magnetite, titanomagnetite, biotite, quartz) examined and selected from different rock samples. 240 reference, 200 test EDS data for each mineral group have been taken under non-standard working conditions. Reference EDS dataset has been used for training of the decision tree. Consequently, the test data have been divided into different groups and tested in our generated decision tree classifier. Therefore, all generated decision tree classification for each of data group produced different accuracy, being minimum 90%. Besides, successful matches have been obtained for the minerals of having similar elemental content such as olivine ((Mg, Fe)₂[SiO₄]) and orthopyroxene ((Mg, Fe)₂[SiO₆]). All results of this study demonstrate that, highly efficient, automated mineral classifications are possible using decision tree classifier without affected by working conditions.

Keywords: Automated mineral classification, energy dispersive spectroscopy, decision tree algorithms, electron microscope...