

## **Neironu tīkla izmantošana radiālā sadalījuma funkcijas noteikšanai no EXAFS spektra**

Mārcis Lielbārdis, Aleksejs Kuzmins  
*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

Materiāla atomāro struktūru var aprakstīt ar radiālā sadalījuma funkcijām (RSF). Tomēr to eksperimentālā noteikšana ir sarežģīts uzdevums. Praksē informāciju par RSF var iegūt no rentgenabsorbcijas spektriem vai EXAFS spektriem. Pašlaik to precīzai noteikšanai ir jāizmanto dārgas un ilgas simulācijas, kuru pamatā ir apgrieztā Montekarlo metode. Alternatīva pieeja ir izmantot mašīnmācīšanās metodes, piemēram, neironu tīklus, kas varētu nodrošināt diezgan precīzu un ātru RSF rekonstrukciju no EXAFS spektra. Šāda pieeja paver jaunas iespējas kā, piemēram, rentgenabsorbcijas eksperimentu uzraudzība un kontrole reāllaikā.

Šajā darbā uz neironu tīklu balstītā pieeja tika izstrādāta, izmantojot bezmaksas atvērtā koda TensorFlow mašīnmācīšanās pakotni Python vidē. Tiks prezentēts piemērs tā pielietojumam RSF rekonstrukcijai dažādos cinka oksīdos.

## **Use of a neural network to determine the radial distribution function from the EXAFS spectrum**

Mārcis Lielbārdis, Alexei Kuzmin  
*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

The atomic structure of a material can be described in terms of the radial distribution functions (RDF). However, their experimental determination is a difficult task. In practice, the information on RDFs can be obtained from X-ray absorption spectra, or EXAFS spectra. Currently, their accurate determination requires the use of expensive and long simulations based on the reverse Monte Carlo method. An alternative approach is to use the machine learning methods, such as neural networks, which could provide rather accurate and fast RDF reconstruction from the EXAFS spectrum. Such approach opens up new possibilities as, for example, real-time monitoring and control of X-ray absorption experiments.

In this work, the approach based on the neural network was developed using the free open source TensorFlow machine-learning package in Python environment. An example of its application to the reconstruction of RDFs in various zinc oxides will be presented.