

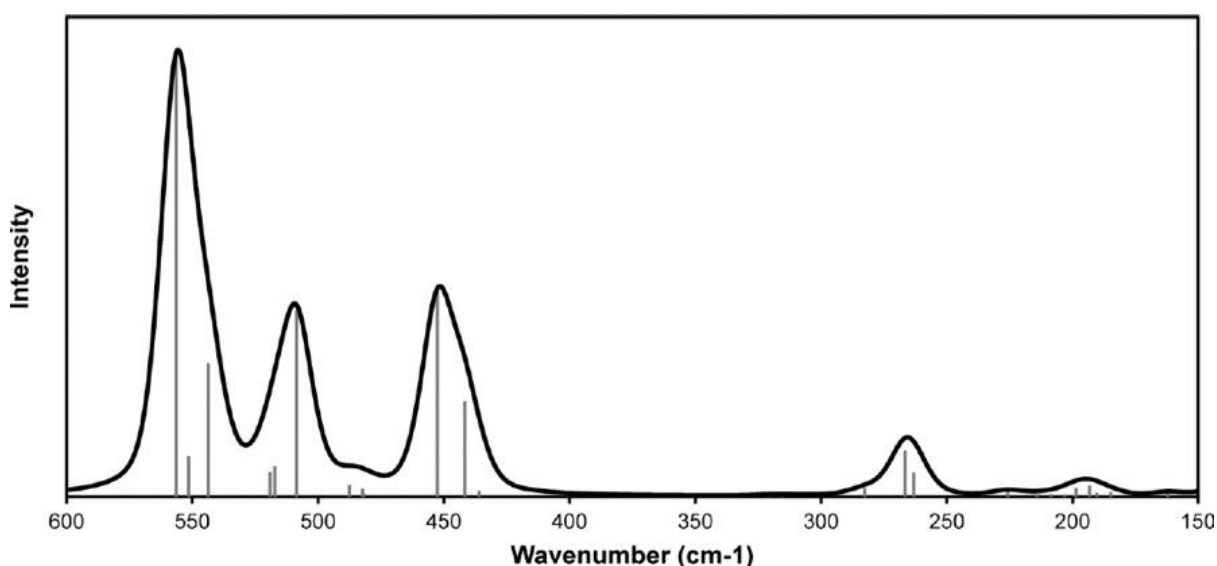
Projektityön yleissuunnitelma: Spektrisimulaatio

Johanna Hakonen

5.3.2020

Yleiskuvaus

Toteutetaan ohjelma, joka lukee tekstitiedostosta molekyylin kvanttikemiallisesti lasketun värähtelyspektrin ja piirtää simuloidun, kokeellista mittausta muistuttavan spektrin, jossa piikit on levennetty erilaisilla viivanmuodoilla. Laskennalliset menetelmät antavat spektrin piikkeinä mutta kokeellisesti mitatut piikit ovat leveämpiä johtuen mittalaitteen tarkkuudesta ja näytteestä. Spektrin x-akselilla on värähdyn energia (aallonpituus/taajuus cm^{-1}) ja y-akselilla intensiteetti. Kuvassa 1 on erään yhdisteen Raman-värähtelyspektri, jossa musta viiva on kokeellinen spektri ja harmaat piikit ovat laskennallisen spektrin piikit. Kokeellisen spektrin piikkien leveys on sen verran suuri, että vierekkäiset piikit eivät erotu toisistaan.



Kuva 1. Erään yhdisteen Raman-värähtelyspektri.

Simuloitujen piikkien ajatellaan noudattavan normaalijakauman (Gaussian) yhtälöä (Yhtälö 1) [1], jonka "keskihajonta", σ , saadaan käyttäjän määrittämällä puoliarvovaleveydellä (full width at half maximum, FWHM) (Yhtälö 2) yhtälöllä 3. Arvo x_0 vastaa tekstitiedoston laskennallisen piikin taajuutta X . Yhden piikin simuloitu viivanmuoto saadaan yhtälöstä 4 käyttämällä tekstitiedoston intensiteetin Y arvoja ja koko simuloitu spektri kaikkien simuloitujen piikkien yhtälöiden summasta.

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2}\right] \quad (1)$$

$$FWHM = 2\sigma\sqrt{2\ln 2} \quad (2)$$

$$\sigma = \frac{FWHM}{2\sqrt{2\ln 2}} \quad (3)$$

$$y = Yf(x) \quad (4)$$

Ohjelmaan kuuluu käyttöliittymä, jolla käyttäjä voi säätää kuvaajan asetuksia. Lisäksi ohjelman toimivuutta testataan. Näitä on kuvattu tarkemmin seuraavissa kappaleissa. Ohjelma toteutetaan keskivaikeana.

Käyttöliittymän luonnos

Tehtävänannon esimerkkikäyttöliittymän (Kuva 2) mukaisesti graafiseen käyttöliittymään tulee kuvaaja piikin intensiteetistä taajuuden funktiona: laskennalliset piikit näkyvät piikkeinä ja simuloitu kokeellinen spektri käyränä. Käyttäjä lataa tekstitiedoston käyttöliittymän Load-linkin kautta ja voi muuttaa piikin puoliarvoleveyttä, x- ja y-akselien rajoja ja otsikoita sekä kuvaajan otsikkoa tekstikenttien avulla. Spektri päivittyy, kun käyttäjä painaa tekstikentässä Enter. Käyttäjä voi myös päättää valintaruudun avulla, näkyvätkö alkuperäiset leventämättömät piikit. Käyttöliittymän tulee jollain tavalla ilmoittaa, jos tiedosto on virheellinen tai akselien skaalaus ei onnistu.



Kuva 2. Esimerkki tehtävänannosta.

Tiedostot ja tiedostoformaatit

Ohjelmassa ladataan tiedot tekstitiedostosta, kuvassa 3 on esitetty esimerkki SrU2F12_Raman.txt tehtävänannosta. #-Merkillä alkavat rivit ovat kommenttirivejä, taajuus (X) on rivillä ensimmäisenä desimaalimuodossa ja intensiteetti (Y) toisena.

```
# SrU2F12 Raman spectrum
# X = Freq (cm^-1); Y = Polycrystalline Raman intensity (arb. units)
41.75      0.1
84.27      0.95
88.65      0.0
115.74     3.67
120.22     5.44
138.22     10.61
139.80     2.2
144.23     0.9
154.13     6.45
160.08     8.26
180.66     11.22
192.46     0.04
198.86     6.14
215.94     28.08
236.93     44.56
250.66     8.0
270.59     0.48
274.57     110.09
324.32     113.52
453.15     7.39
458.32     44.78
486.40     211.39
494.64     78.15
504.37     181.35
513.02     68.03
534.32     30.33
646.23     1000
653.24     13.5
```

Kuva 3. Esimerkkitekstitiedosto SrU2F12_Raman.txt.

Järjestelmätestaussuunnitelma

Ohjelman tulee pystyä lukemaan tekstitiedostosta rivit, joissa on taajuus (X tai x_0) ja intensiteetti (Y), ohittamaan virheelliset rivit, jotka eivät sisällä taajuutta ja intensiteettiä oikeassa muodossa, sekä ilmoittamaan virheellisestä tiedostosta, jos piikkejä ei löydy ollenkaan. Testauksessa tulisi käyttää tiedostoa, joka on virheetön, tiedostoja, jotka ovat luettavissa mutta joissa on ylimääräisiä tyhjiä merkkejä ja virheellisiä rivejä, ja täysin virheellisiä tiedostoja.

Ohjelman tulee pystyä piirtämään onnistuneesti luetusta tiedostosta kuvaaja. Tätä tulee testata erilaisilla lähtötiedostoilla. Lisäksi ohjelman tulee suorittaa käyttäjän tekstikenttiin syöttämät muutokset ja ilmoittaa virheellisistä syötöistä, mitä tulee testata oikealla ja väärällä (str vs. float) syötteellä. Laskennalliset piikit tulee pystyä poistamaan kuvasta.

Viitteet

[1] Wikipedia 2019, *Full width at half maximum*, Wikimedia Foundation, Inc., viewed 3 March 2020, <https://en.wikipedia.org/wiki/Full_width_at_half_maximum>.