

小さいピークの検出について

###次に、上に凸・下に凸である(極大値または極小値を持つ)ピークの数調べる###
###ただし、隣り合うピークの差が0.04以上のもののみ###

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.signal import find_peaks

# ピークの検出
peaks, _ = find_peaks(y)

# 上に凸・下に凸のピークのみを抽出
convex_peaks = []
for i in range(1, len(peaks)-1):
    if (y[peaks[i]] > y[peaks[i-1]] and y[peaks[i]] > y[peaks[i+1]]) or (y[peaks[i]] < y[peaks[i-1]] and y[peaks[i]] < y[peaks[i+1]]):
        convex_peaks.append(peaks[i])

# 隣り合うピークのy座標の差が0.04以上となるピークのみを抽出
filtered_peaks = [convex_peaks[0]] # 最初のピークを追加
for i in range(1, len(convex_peaks)):
    if abs(y[convex_peaks[i]] - y[convex_peaks[i-1]]) >= 0.04:
        filtered_peaks.append(convex_peaks[i])

## ピークの数と位置の表示
## ただし、μが0.5超のもの(つまり、吸収端よりも右側領域)のみとする

#ピークの位置(Energy)
peak_positions = [x[i] for i in filtered_peaks if y[i] > 0.5]

#ピークの位置(μt)
peak_positions_y = [y[i] for i in filtered_peaks if y[i] > 0.5]

#ピークの差異(Energy)(減少も含む)
differences = [peak_positions[i+1] - peak_positions[i] for i in range(len(peak_positions)-1)]

#ピークの差異(μt)(減少も含む)
differences_y = [peak_positions_y[i+1] - peak_positions_y[i] for i in range(len(peak_positions_y)-1)]

#ピークの幅
filtered_differences = [differences[i] for i in range(len(differences)) if 0 < differences_y[i] < 1]

#ピークの高さ(=ピークの差異の増加のみ)
filtered_differences_y = [diff for diff in differences_y if 0 < diff < 1]

#ピークの傾き
small_peak_slope = [filtered_differences_y[i] / filtered_differences[i] for i in range(len(filtered_differences_y))]

#ピークの個数は、len(filtered_differences)と表せる。

print("小ピークの位置x:", peak_positions)
print("小ピークの位置y:", peak_positions_y)
print("小ピークの差異x:", differences)
print("小ピークの差異y:", differences_y)
print("小ピークの幅:", filtered_differences)
print("小ピークの高さ:", filtered_differences_y)
print("小ピークの傾き", small_peak_slope)
print("小ピークの数:", len(filtered_differences_y))

# ピークの位置をグラフにプロット
plt.plot(x, y)
plt.plot(peak_positions, peak_positions_y, 'ro')
plt.show()
```

各ピークの極大値・極小値を検出している。

各ピークのy座標の差が0.04(ハイパーパラメーター)以上のみを抽出
↓
小さすぎるピークを除去

y[i] > 0.5 は、
吸収端の右側の領域
(XANES・EXAFS領域)
のピークのみを抽出するため

小ピークのx座標(Energy)

縦軸：フーリエ変換後の μt , 横軸：Energy [eV]

小ピークの位置x: [13895.625787, 13926.046547, 13961.230422, 14013.201684, 14055.438564]

小ピークの位置y: [1.2698594576435789, 0.9500586427130093, 1.1073385447830073, 0.9907720542113774, 1.032685698381114]

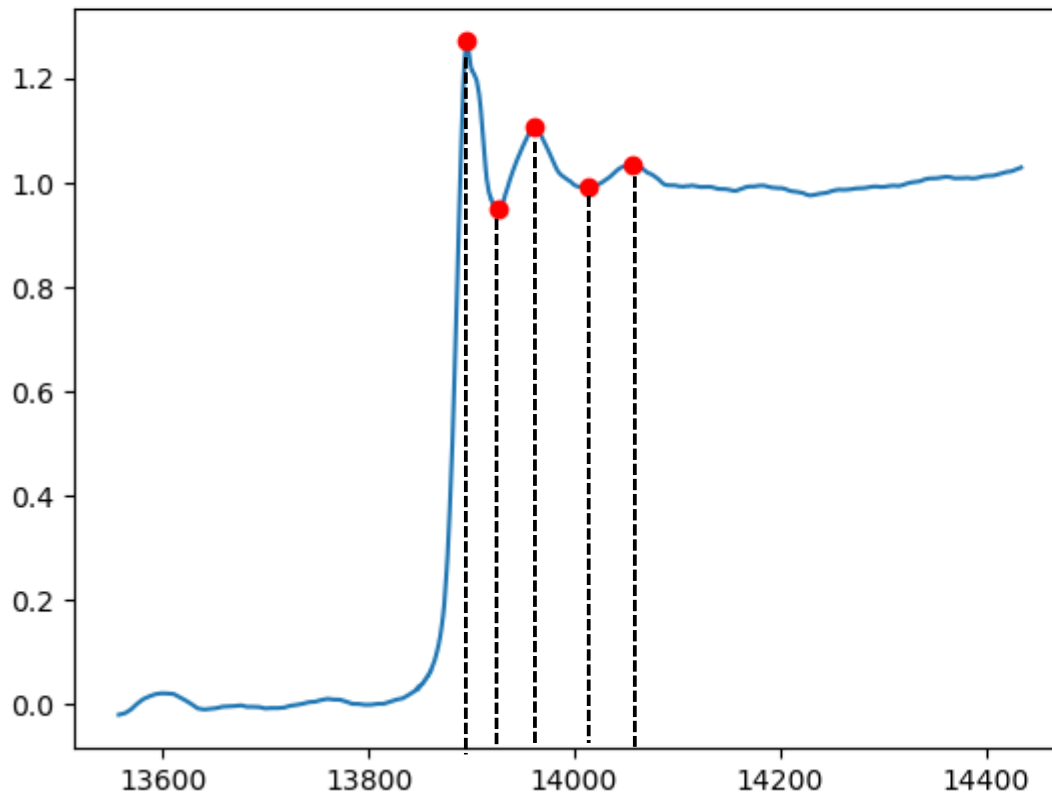
小ピークの差異x: [30.420759999999063, 35.1838750000000626, 51.971261999999115, 42.236880000000038]

小ピークの差異y: [-0.31980081493056955, 0.15727990206999798, -0.11656649057162993, 0.04191364416973653]

小ピークの幅: [35.1838750000000626, 42.236880000000038]

小ピークの高さ: [0.15727990206999798, 0.04191364416973653]

小ピークの数: 2



小ピークのy座標(μt)

縦軸：フーリエ変換後の μt , 横軸：Energy [eV]

小ピークの位置x: [13895.625787, 13926.046547, 13961.230422, 14013.201684, 14055.438564]

小ピークの位置y: [1.2698594576435789, 0.9500586427130093, 1.1073385447830073, 0.9907720542113774, 1.032685698381114]

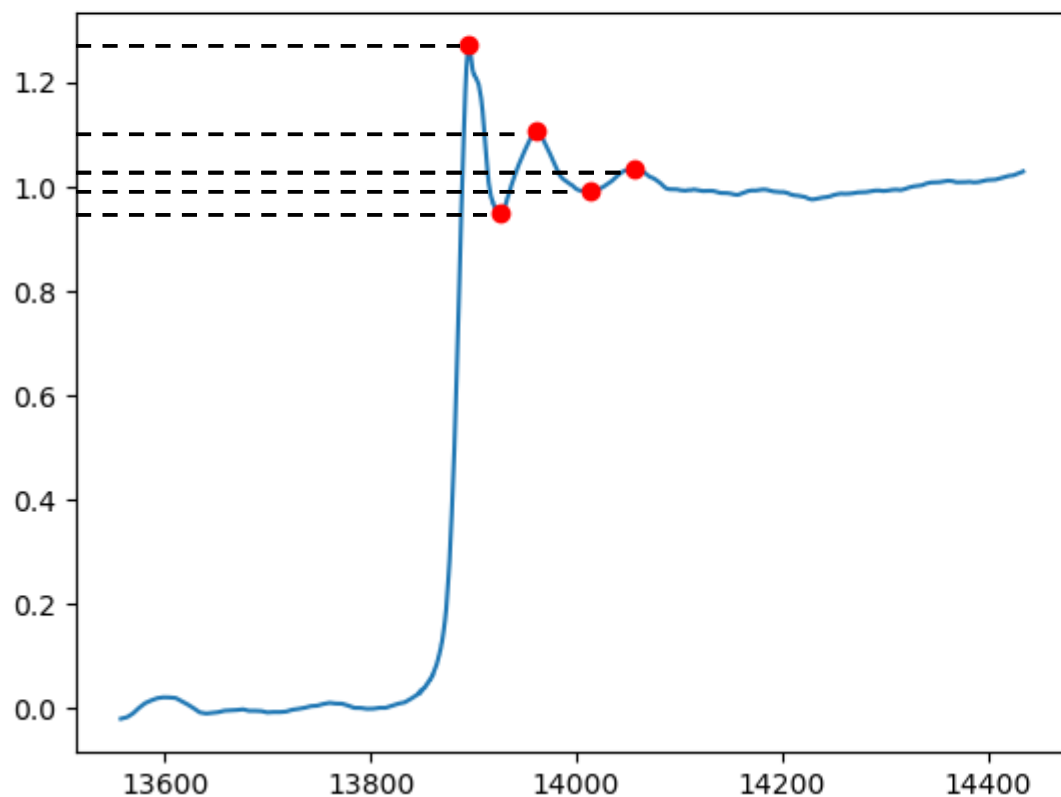
小ピークの差異x: [30.420759999999063, 35.1838750000000626, 51.971261999999115, 42.236880000000038]

小ピークの差異y: [-0.31980081493056955, 0.15727990206999798, -0.11656649057162993, 0.04191364416973653]

小ピークの幅: [35.1838750000000626, 42.236880000000038]

小ピークの高さ: [0.15727990206999798, 0.04191364416973653]

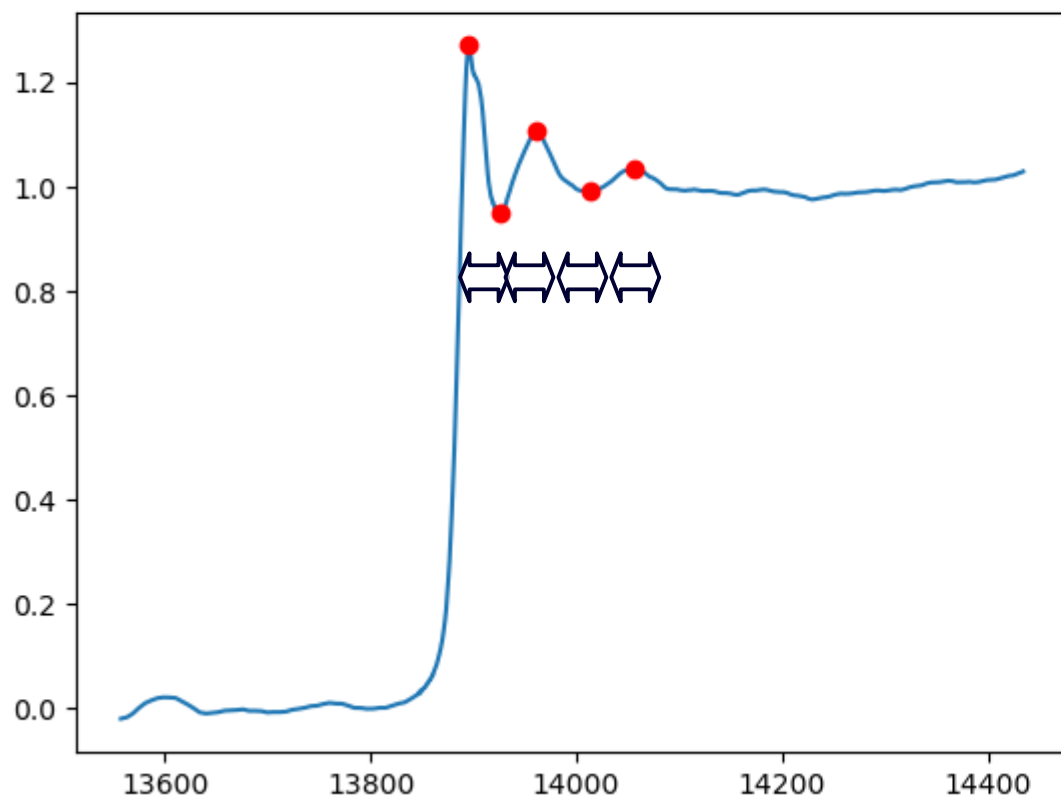
小ピークの数: 2



小ピークのx座標の差(Energy_Difference)

縦軸：フーリエ変換後の μt , 横軸：Energy [eV]

小ピークの位置x: [13895.625787, 13926.046547, 13961.230422, 14013.201684, 14055.438564]
小ピークの位置y: [1.2698594576435789, 0.9500586427130093, 1.1073385447830073, 0.9907720542113774, 1.032685698381114]
小ピークの差異x: [30.420759999999063, 35.183875000000626, 51.971261999999115, 42.23688000000038]
小ピークの差異y: [-0.31980081493056955, 0.15727990206999798, -0.11656649057162993, 0.04191364416973653]
小ピークの幅: [35.183875000000626, 42.23688000000038]
小ピークの高さ: [0.15727990206999798, 0.04191364416973653]
小ピークの数: 2



小ピークのy座標の差(μt _Difference)

縦軸：フーリエ変換後の μt , 横軸：Energy [eV]

小ピークの位置x: [13895.625787, 13926.046547, 13961.230422, 14013.201684, 14055.438564]

小ピークの位置y: [1.2698594576435789, 0.9500586427130093, 1.1073385447830073, 0.9907720542113774, 1.032685698381114]

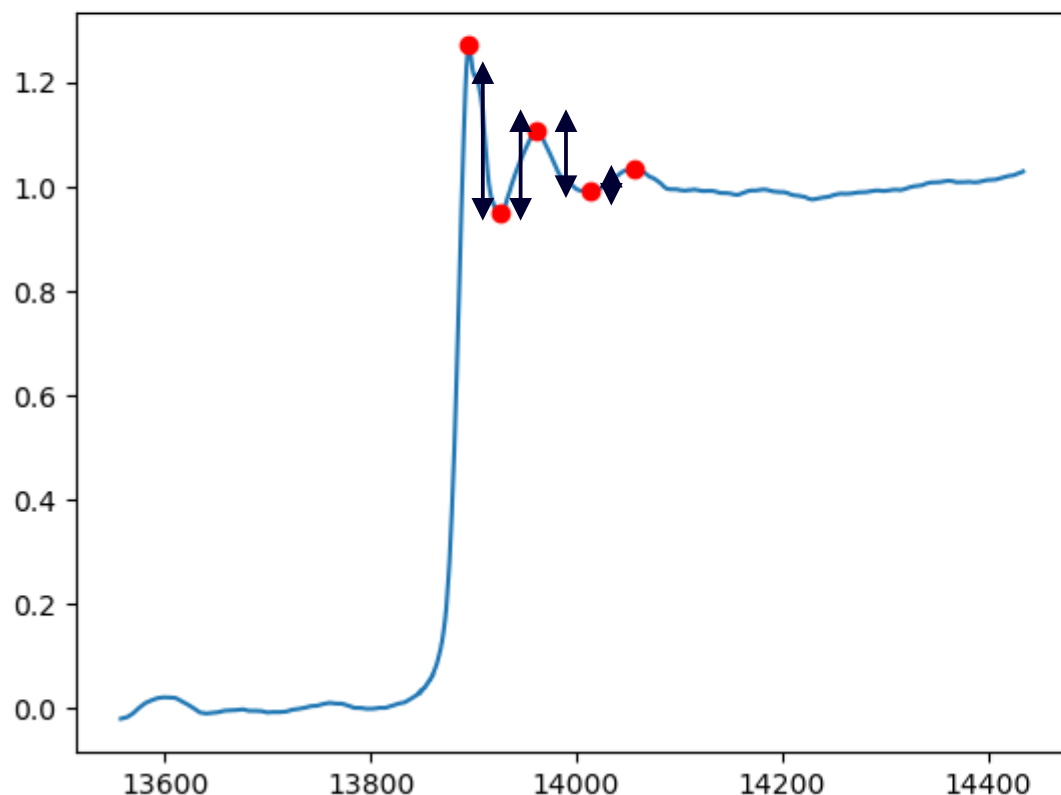
小ピークの差異x: [30.420759999999063, 35.1838750000000626, 51.971261999999115, 42.236880000000038]

小ピークの差異y: [-0.31980081493056955, 0.15727990206999798, -0.11656649057162993, 0.04191364416973653]

小ピークの幅: [35.1838750000000626, 42.236880000000038]

小ピークの高さ: [0.15727990206999798, 0.04191364416973653]

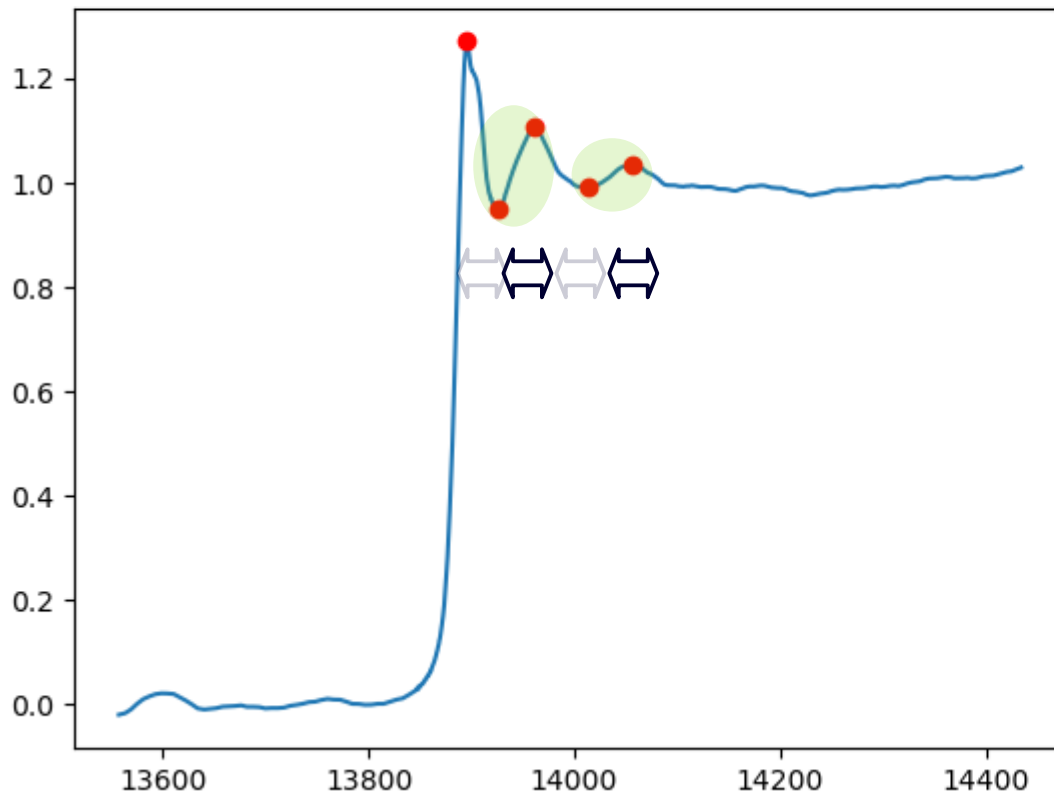
小ピークの数: 2



小ピークの幅(Peak_Width)

縦軸：フーリエ変換後の μt , 横軸：Energy [eV]

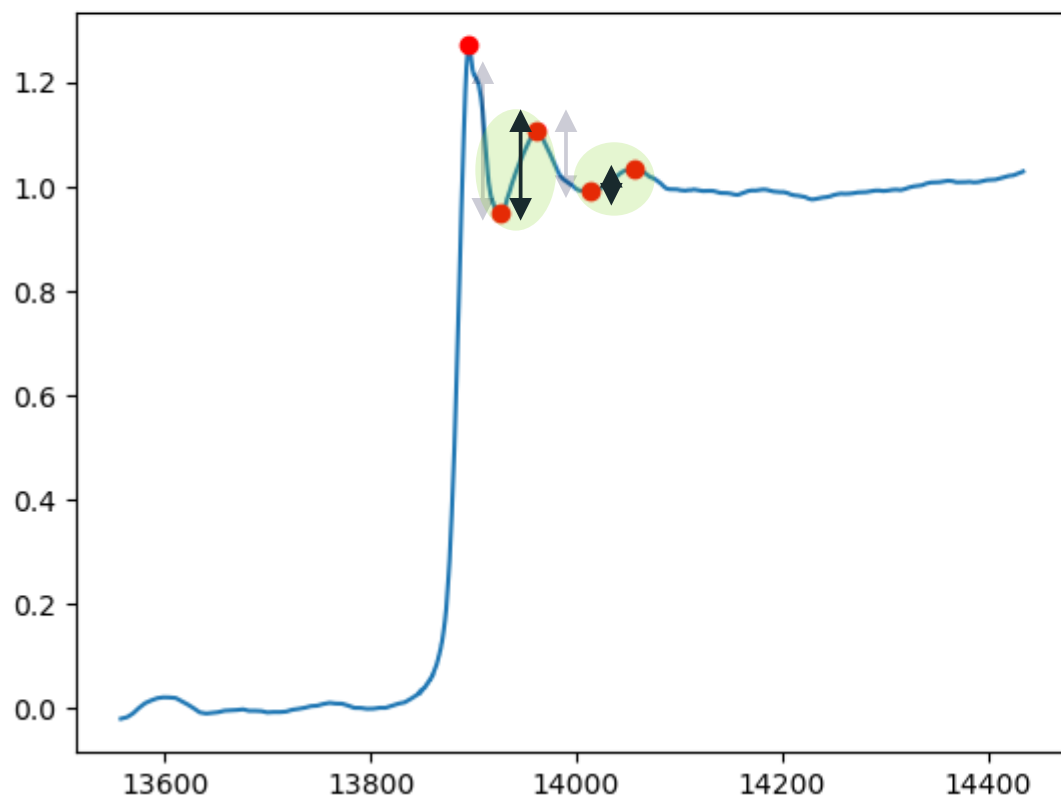
小ピークの位置x: [13895.625787, 13926.046547, 13961.230422, 14013.201684, 14055.438564]
小ピークの位置y: [1.2698594576435789, 0.9500586427130093, 1.1073385447830073, 0.9907720542113774, 1.032685698381114]
小ピークの差異x: [30.420759999999063, 35.1838750000000626, 51.971261999999115, 42.236880000000038]
小ピークの差異y: [-0.31980081493056955, 0.15727990206999798, -0.11656649057162993, 0.04191364416973653]
小ピークの幅: [35.1838750000000626, 42.236880000000038]
小ピークの高さ: [0.15727990206999798, 0.04191364416973653]
小ピークの数: 2



小ピークの高さ(Peak_Height)

縦軸：フーリエ変換後の μt , 横軸：Energy [eV]

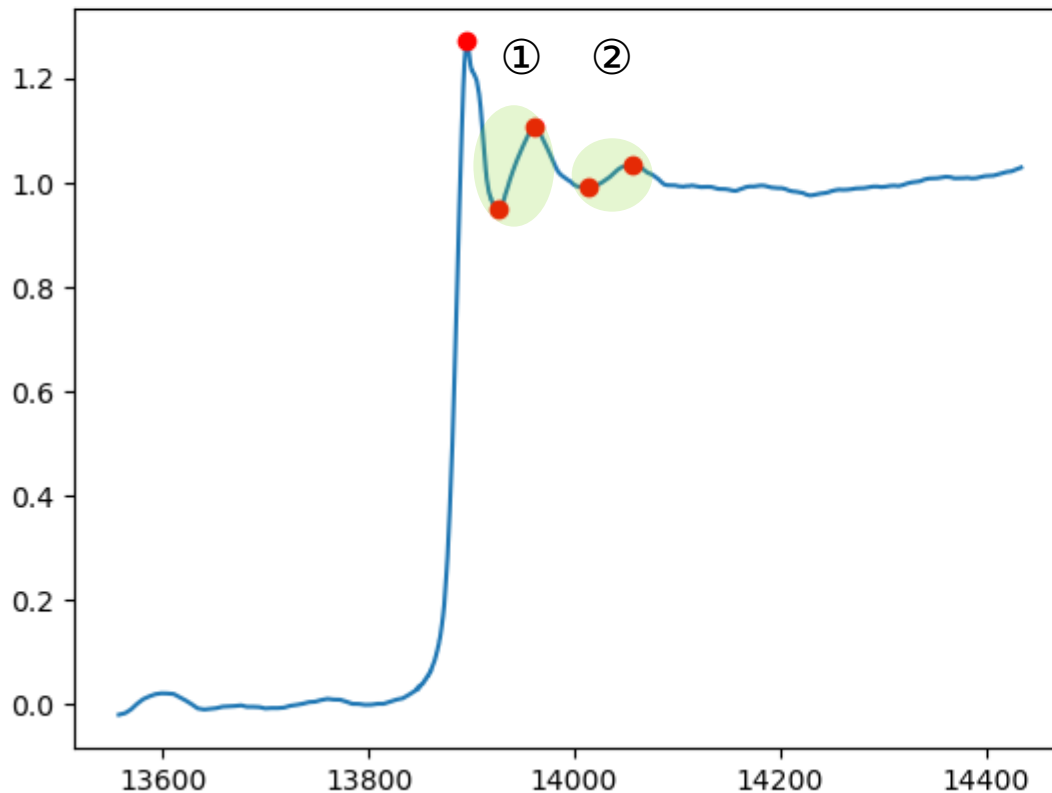
小ピーク的位置x: [13895.625787, 13926.046547, 13961.230422, 14013.201684, 14055.438564]
小ピーク位置y: [1.2698594576435789, 0.9500586427130093, 1.1073385447830073, 0.9907720542113774, 1.032685698381114]
小ピークの差異x: [30.420759999999063, 35.1838750000000626, 51.971261999999115, 42.236880000000038]
小ピークの差異y: [-0.31980081493056955, 0.15727990206999798, -0.11656649057162993, 0.04191364416973653]
小ピークの幅: [35.1838750000000626, 42.236880000000038]
小ピークの高さ: [0.15727990206999798, 0.04191364416973653]
小ピークの数: 2



小ピークの数(Peak_Count)

縦軸：フーリエ変換後の μt , 横軸：Energy [eV]

小ピークの位置x: [13895.625787, 13926.046547, 13961.230422, 14013.201684, 14055.438564]
小ピークの位置y: [1.2698594576435789, 0.9500586427130093, 1.1073385447830073, 0.9907720542113774, 1.032685698381114]
小ピークの差異x: [30.420759999999063, 35.1838750000000626, 51.971261999999115, 42.236880000000038]
小ピークの差異y: [-0.31980081493056955, 0.15727990206999798, -0.11656649057162993, 0.04191364416973653]
小ピークの幅: [35.1838750000000626, 42.236880000000038]
小ピークの高さ: [0.15727990206999798, 0.04191364416973653]
小ピークの数: 2



小ピークの傾き(Peak_Slope)

縦軸：フーリエ変換後の μt , 横軸：Energy [eV]

小ピークの位置x: [13895.625787, 13926.046547, 13961.230422, 14013.201684, 14055.438564]
小ピークの位置y: [1.2698594576435789, 0.9500586427130093, 1.1073385447830073, 0.9907720542113774, 1.032685698381114]
小ピークの差異x: [30.420759999999063, 35.183875000000626, 51.971261999999115, 42.23688000000038]
小ピークの差異y: [-0.31980081493056955, 0.15727990206999798, -0.11656649057162993, 0.04191364416973653]
小ピークの幅: [35.183875000000626, 42.23688000000038]
小ピークの高さ: [0.15727990206999798, 0.04191364416973653]
小ピークの傾き [0.004470226831751624, 0.0009923470713209912]
小ピークの数: 2

