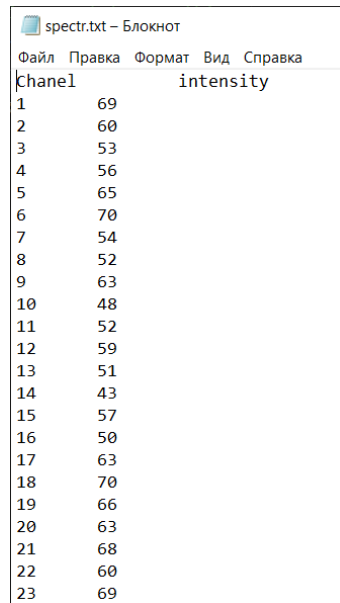


Для запуска программы вам потребуется python 3 и такие модули для него: matplotlib, numpy, PyQt5. Помимо самого кода в папке есть еще 2 важных файла "spectr.txt" и "config.txt".

После запуска кода python, программа первым делом считывает данные с файла "spectr.txt" формат данных: 1 столбик - номер канала, 2 столбик - количество отсчетов в канале. !!! 1 рядок программой игнорируется!!!.



The screenshot shows a text editor window titled 'spectr.txt - Блокнот'. The menu bar includes 'Файл', 'Правка', 'Формат', 'Вид', and 'Справка'. The text content is as follows:

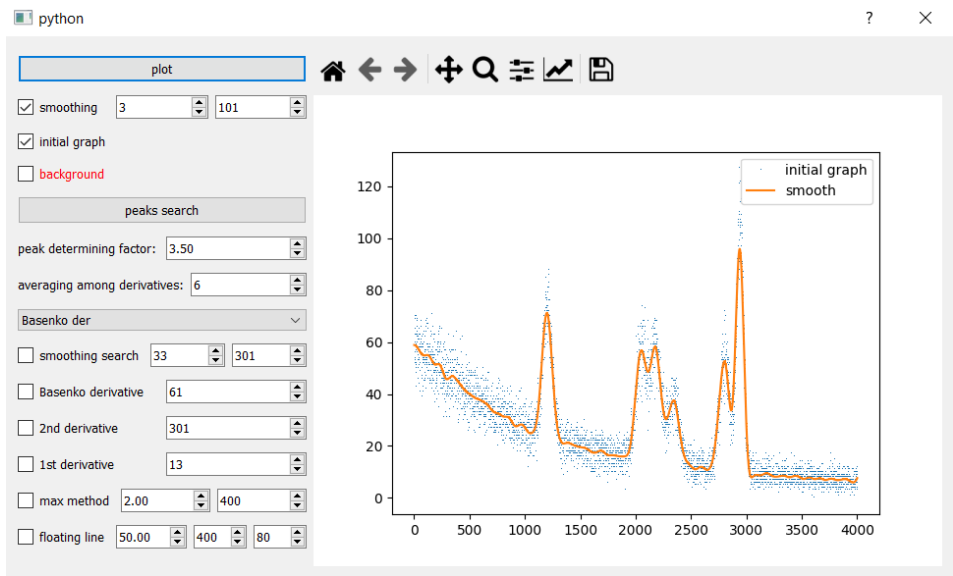
channel	intensity
1	69
2	60
3	53
4	56
5	65
6	70
7	54
8	52
9	63
10	48
11	52
12	59
13	51
14	43
15	57
16	50
17	63
18	70
19	66
20	63
21	68
22	60
23	69

Следующим считается файл "config.txt", где обязательно должны быть указаны начальные параметры под соответствующем тегом. Формат конфиг файла: в одну строку должны быть указаны тег и его значения. Причем первым в рядке должен стоять тег, потом значения. Разделять их нужно пробелами и табуляцией (можно больше 1 пробела и табуляций). В самом файле можно добавлять комментарии после символа "#". Пустые строки программой игнорируются. Теги:

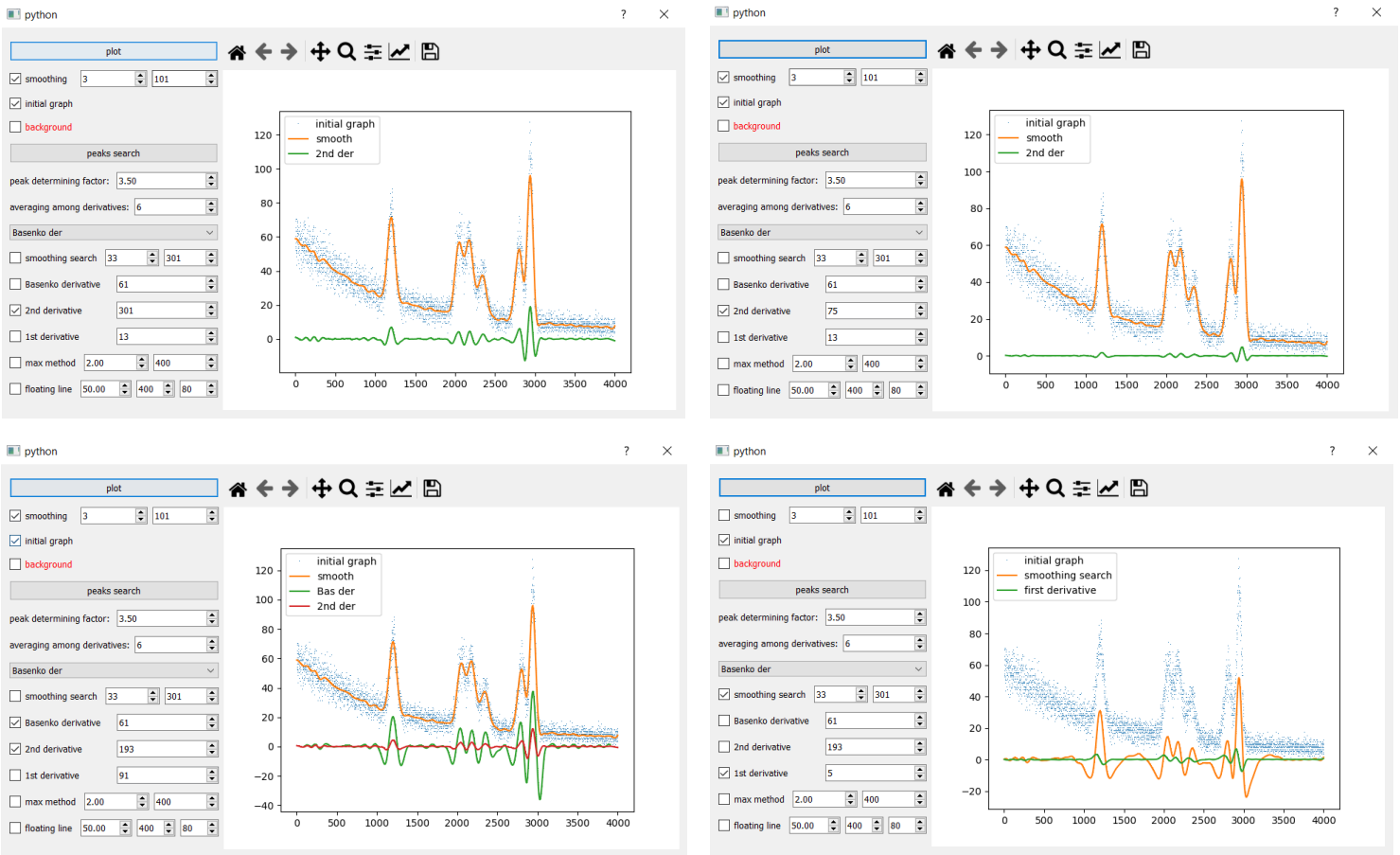
- smoothing: 1 параметр - кол-во итераций алгоритма сглаживания, 2 параметр - интервал точек, которые аппроксимируются
- pdf(peak determining factor): определяет коэффициент m, для условия - если интенсивность в канале > m, то рядом найден пик. Нужен для методов первой, второй производной; производной по методу Басенко; метода сглаживания.
- aad(averaging among derivatives): фактически это внутреннее сглаживание микро флуктуаций для методов первой, второй производной; производной по методу Басенко.
- smsearch (smoothing search): 1 параметр - кол-во итераций алгоритма сглаживания, 2 параметр - интервал точек, которые аппроксимируются
- BasDer, 2ndDer, 1stDer: параметры указывают на геин сигнала. То-есть амплитуда графика.
- float: 1 параметр - параметр отсева, 2 параметр - длина отрезка, 3 параметр - количество повторяющегося условия подряд вдоль спектра для идентификации пика.

smoothing	3	101	
pdf	3.50		
aad	6		
smsearch	33	301	
BasDer	61		
2ndDer	301		
1stDer	13		
float	50	400	80

После удачного считывания запустится окно программы которое будет разделено на 2 части: слева - панель управления, справа - окно с графиком. Для обновления или добавления графиков достаточно кликнуть по соответствующему "чекбоксу" и нажать "plot". По умолчанию "smoothing" и "initial graf" нажаты, что соответствует сглаженному графику и начальному набору точек. Рядом с графиком есть подписи, чтобы идентифицировать кривую.



Например кликнем по чекбоксу "2nd derivative" и увидим график второй производной данного спектра. И заменяя значения рядом с чекбоксом, мы можем изменять усиление нашего графика.



Чекбокс "background" подсвечивается красным, что говорит о невозможности определения фона, для того чтобы поменять ситуацию, нужно провести процедуру поиска и аппроксимирования пиков, после удачного выполнения этого блока программы чекбокс меняет свой цвет на черный и тогда эта опция станет доступной.

Для самой процедуры поиска пиков сначала нужно инициализировать набор данных над которым будет проводиться анализ, это можно сделать выбором соответствующего чекбокса в блоке (1) (рис.1), изменить параметры рядом если требуется, и нажать кнопку "plot". Если ранее в ходе программы такая процедура для выбранного метода уже проводилась, то данные уже инициализированы. Далее нужно выбрать параметры подгонки в блоке (2): "peak determining factor" - значение с которым сравнивается число отсчетов в спектре(соответствующему выбранному методу), "smoothing micro fluctuations" - усреднение микро флуктуаций рис.2. Затем выбрать в поле (3) метод которым пользователь желает провести эту процедуру и нажать кнопку "peaks search". После успешного выполнения программы окно расширится с добавлением нового полотна с найденными пиками рис.3

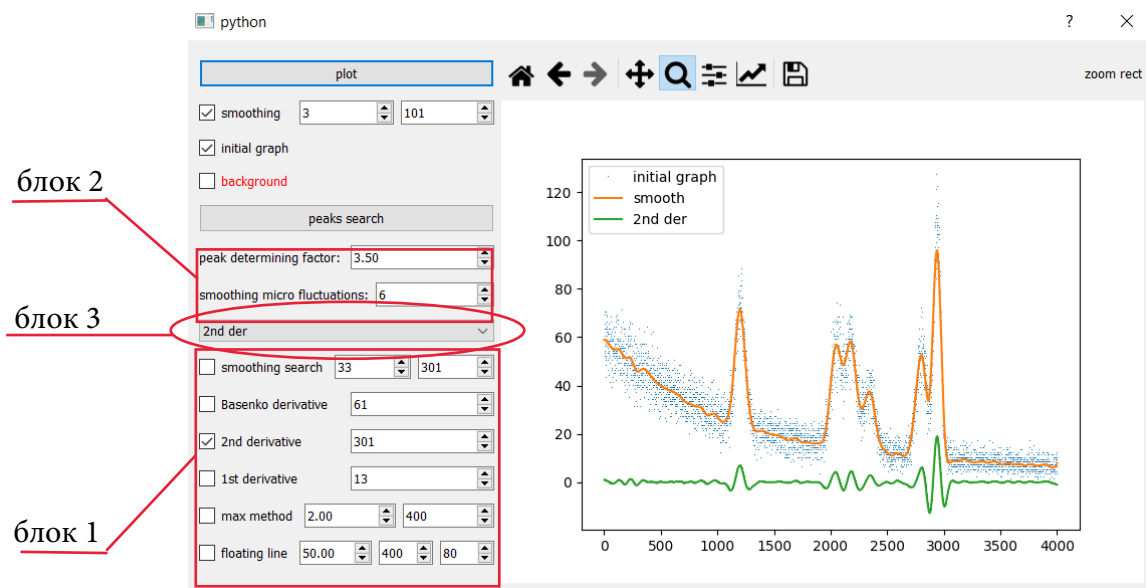


рис. 1

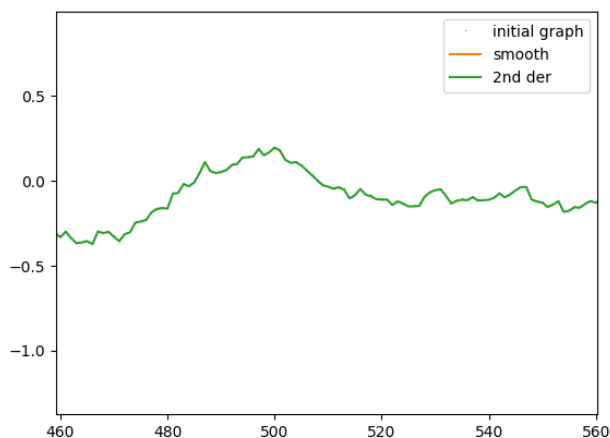


рис. 2

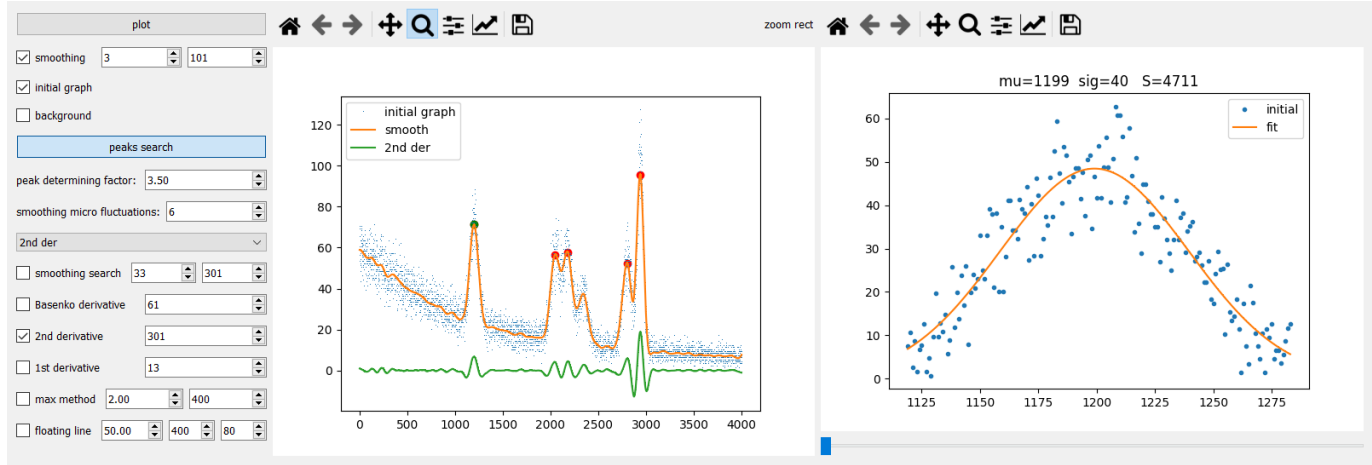
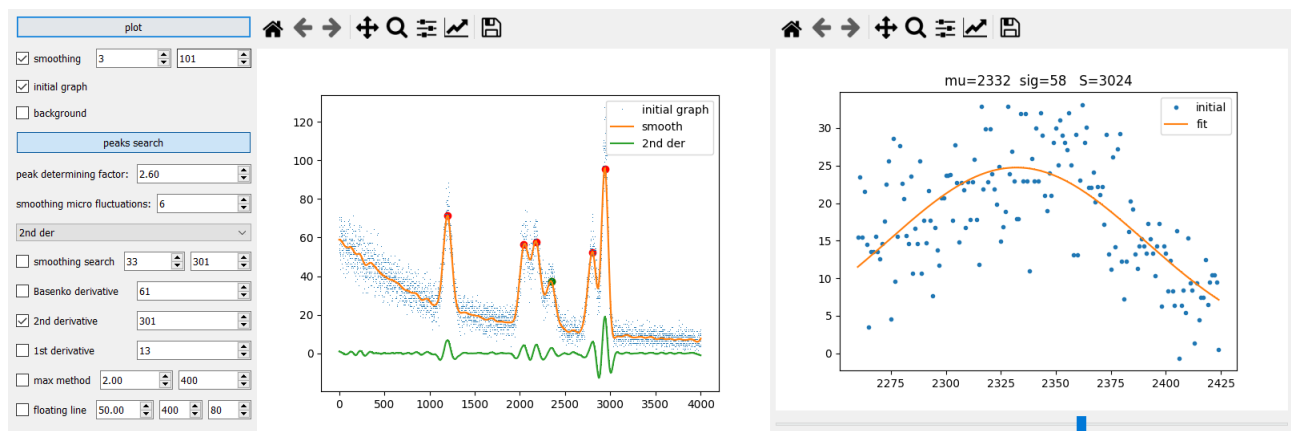


рис. 3

В расширенном окне справа отображаются идентифицированные пики с их аппроксимированными пиками и их характеристиками сверху, где: μ - номер канала энергии полученного сигнала; σ - его стандартное отклонение; S - площадь под пиком (без фона), то-есть интенсивность пика. Переключение между пиками происходит по средством синего ползунка снизу. В левом окне, окне с начальными графиками, добавляются красные и одна зеленая точка. Все эти точки указывают на пики которые индентифицировались программой. Зеленая точка - за каким пиком мы сейчас наблюдаем в правом окне. Если программа обнаружила не все пики ил не правильно, то нужно еще раз нажать на кнопку "peaks search", правое окно при этом скроется и изменивши значения в левом блоке нажать еще раз кнопку "plot" и затем "peaks search".



Также после того, как пройдет хоть одно успешное обнаружение пика, то-есть при успешном выполнении функции "peaks search", чекбокс "background" поменяет свой цвет с красного на черный и тогда можно будет поставить рядом галочку и нажавши кнопку "plot" аппроксимировать фон с данных полученных последнего вызова метода "peaks search".

