

**Univerzita Komenského**  
**Fakulta Matematiky, Fyziky a**  
**Informatiky**

Aplikovaná Informatika

**Analýza**  
**spektroskopických dát**

Autori : Ondrej Husár, Martin Šomodi, Filip Kováč, Tomáš Bakoš

Zadávatel' : Peter Čermák

2016 / 2017

## Obsah

1. Úvod.....	4
1.1 Podstata dokumentu.....	4
1.2 Rozsah Systému.....	4
1.3 Slovník pojmov.....	5
1.4 Referencie.....	5
2. Všeobecný popis.....	5
2.1 Perspektíva projektu.....	5
2.2 Funkcie produktu.....	5
2.3 Charakteristika používateľov.....	5
2.4 Prepoklady a závislosti.....	5
3. Katalóg požiadaviek.....	6
3.0 Vstup - Výstup.....	6
3.0.1 Vstup.....	6
3.0.2 Výstup.....	7
3.1 Transformácia X-ovej súradnice (XT).....	8
3.2 Transformácia Y-ovej súradnice (YT).....	8
3.3 Popis Modelu.....	9
3.3.1 Baseline (BL).....	9
3.3.2 Implementácia funkcií profilov spektrálnych čiar (PK):.....	9
3.3.3 Interpolácia v referenčných dátach (RF).....	10
4. Diagramy.....	11
4.1 Entitno - Relačný diagram.....	12
.....	12
4.2 Use-case diagram.....	12
4.3 Sekvenčný diagram.....	13
4.3 Triedny diagram.....	14
5. Testovacie scenáre.....	14



# 1. Úvod

## 1.1 Podstata dokumentu

Tento dokument popisuje požiadavky projektu Analýza spektroskopických dát.

## 1.2 Rozsah Systému

Projekt je dynamicky linkovaná knižnica (DLL), ktorá slúži na rátanie komplexných, neanalytických funkcií. Neobsahuje grafické užívateľské rozhranie.

## 1.3 Slovník pojmov

- **DLL** - (angl. DynamicLinkLibrary) je skratka pre dynamicky spojenú knižnicu. Táto knižnica sa používa operačným systémom Windows.
- **LabVIEW** - vývojové prostredie (nadstavba c++) určené na vizuálne programovanie.

## 1.4 Referencie

- [1] *"Decay time integrals in neutral meson mixing and their efficient evaluation"* - Till Moritz Karbach, Gerhard Raven, Manuel Schiller (CERN - Switzerland, NIKHEF - The Netherlands)
- [2] *"An isolated line-shape model to go beyond the Voigt profile in spectroscopic databases and radiative transfer codes"* - N.H. Ngo, D. Lisak, H. Tran, J.-M. Hartmann
- [3] *"Efficient computation of some speed-dependent isolated line profiles"* - H. Tran, N.H. Ngo, J.-M. Hartmann

## **2. Všeobecný popis**

### **2.1 Perspektíva projektu**

Projekt bude súčasťou väčšieho celku, ktorý má za úlohu analyzovať spektroskopické dáta. Optická Spektroskopia je oblasť fyziky, zaoberajúca sa štúdiom elektromagnetického žiarenia emitovaného alebo pohlteneho vzorkou. Získané informácie sa dajú použiť buď kvalitatívne (charakteristika vnútornej štruktúry vzorky, poprípade prostredia kde sa nachádza), alebo kvantitatívne (určenie koncentrácie známej vzorky)

### **2.2 Funkcie produktu**

Náš softvér by mal byť schopný v optimálnom čase aplikovať rôzne transformácie na vstupné hodnoty – spektrá a modelovať ich tvar použitím funkcií opisujúcich žiarenie(absorpciu) vzoriek. Medzi tieto funkcie patria napríklad: Lorentzova, Gaussova, Voigtova alebo Hartmann–Tran.

### **2.3 Charakteristika používateľov**

Finálny produkt bude využívať oddelenie experimentálnej Fyziky FMFI UK.

### **2.4 Prepoklady a závislosti**

Z používateľského hľadiska bude produkt použiteľný iba pod vývojovým prostredím LabVIEW. Tak isto, pre produktívne využitie, bude musieť užívateľ disponovať nameranými dátami a vedieť ich poskytnúť DLL knižnici.

Z praktického hľadiska bude tento produkt použiteľný len v spojení so správnym programom implementovaným v spomínanom prostredí LabVIEW.

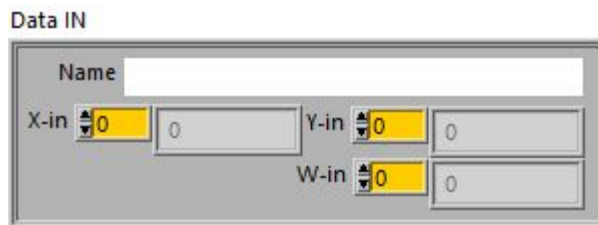
## 3. Katalóg požiadaviek

Požiadavky na systém sú rôzne súradnicové a krivkové transformácie vstupného spektra a výpočet modelu spektra.

### 3.0 Vstup - Výstup

#### 3.0.1 Vstup

- Spektrum:
  - o 3 vektory (dim N of double precision) pre **X**, **Y** a neistotu **Y** (**W**)
  - o z Labview: štruktúra (cluster) obsahujúca **X**, **Y**, **W** a meno dát (string)



- o do C++ ako „pointer to Handle“
- Parametre: M parametrov definujúcich transformácie (**XT**, **YT**) a Model (**BL** + **PK** + **RF**)
  - o Polia:
    - ♣ **Param.strings**: dim 3xM of string: charakterizujúce mená parametrov a ich vlastnosti (meno, model, nezávislé parametre)
    - ♣ **Param.values**: dim 3xM of double: charakterizujúce hodnoty parametrov (hodnota, neistota, škála pre GUI)
    - ♣ **Func.names**: dim 2xL of string (L je počet transformácií a funkcií modelu – max 5: **XT**, **YT**, **BL**, **PK**, **RF**, ktoré treba vypočítať), prvý stĺpec obsahuje meno funkcie (**XT**, **YT**, **BL**, **PK**, **RF**), druhý mená „skupín=groups“ v rámci danej funkcie zoradených do jedného stringu: Menno1@Meno2@...@MenoN
    - ♣ **Func.par.adresses**: 3xLxQ (Q je max počet skupín nachádzajúci sa niektorej z funkcií), prvý inde(page) definuje funkciu podľa poradia v poli **Func.names** následne každá skupina má jeden riadok, kde prvá hodnota hovorí koľko hodnôt je v danom riadku (adries – poradie v **Param.strings** a **Param.values**), poradie adries parametrov je pevne definované pre každú funkciu-skupinu
    - ♣ **Data.names**: Mená vektorov predsimulovaných dát pre funkciu **REF**

- ♣ **Data.length:** Zodpovedajúca dĺžka(počet bodov) pre vektory predsimulovaných dát (uložené v binárnom súbore na disku)

- o z Labview: štruktúra (cluster) obsahujúca

Data PAR in

The cluster control for 'Data PAR in' contains the following fields:

- Name:** A text input field.
- Param.strings:** A list of string inputs, currently showing two empty fields.
- Param.numbers:** A list of numeric inputs, currently showing two empty fields.
- Func.names:** A list of string inputs, currently showing two empty fields.
- Data.names:** A list of string inputs, currently showing one empty field.
- Data.length:** A list of numeric inputs, currently showing one empty field.
- Func.Par.addresses:** A list of numeric inputs, currently showing three empty fields.

### 3.0.2 Výstup

- Upravené spektrum  $X_{out}$ ,  $Y_{out}$ ,  $W_{out}$
- Model spektra  $F$  a podskupiny funkcií  $G_f$  (DLL bude obsahovať dve funkcie, jednu „rýchlu“, ktorá vypočíta len  $F$  a druhú „kompletnú“, ktorá vypočíta okrem  $M$  aj podskupiny funkcií  $G_f$ , napríklad jednotlivé spektrálne čiary). Jednotlivé podskupiny funkcií sa delia na dva typy, podľa toho či sú definované na  $X_{in}$  alebo  $X_{out}$ . Výstupné štruktúry v Labview vyzerajú nasledovne:

Data\_OUT\_Fast

The cluster control for 'Data\_OUT\_Fast' contains the following fields:

- Name:** A text input field.
- X\_out:** A numeric input field with a value of 0.
- Y\_out:** A numeric input field with a value of 11.
- W\_out:** A numeric input field with a value of 125.
- F:** A numeric input field with a value of 100.

Data\_OUT\_Complete

The cluster control for 'Data\_OUT\_Complete' contains the following fields:

- Name:** A text input field.
- X\_out:** A numeric input field with a value of 0.
- Y\_out:** A numeric input field with a value of 11.
- W\_out:** A numeric input field with a value of 125.
- F:** A numeric input field with a value of 100.
- 2D-data\_In\_Names:** A list of string inputs, currently showing one empty field.
- 2D-data\_Out\_Names:** A list of string inputs, currently showing one empty field.
- 2D-data\_In:** A list of numeric inputs, currently showing two empty fields.
- 2D-data\_Out:** A list of numeric inputs, currently showing two empty fields.

- Výstupné parametre (vráti rovnaké parametre ako dostal na vstupe, s aktuálnymi hodnotami)

### 3.1 Transformácia X-ovej súradnice (XT)

$$X_{out} = X_{Off} + X_{ScI}(X_{in})$$

Kde:

$X_{in}$ = vstupná súradnica

$X_{\text{Off}}$  = p0konštantná funkcia

$X_{\text{Sci}}$  = polynomická funkcia kde  $p_0$  reprezentuje fixný bod transformácie

### 3.2 Transformácia Y-ovej súradnice (YT)

$$Y_{\text{out}} = Y_{\text{Off}}(X_{\text{in}}) + Y_{\text{Typ}}\{Y_{\text{in}}, Y_{\text{Pol}}(X_{\text{in}}) + Y_{\text{Trg}}(X_{\text{in}}) + Y_{\text{Spl}}(X_{\text{in}})\}$$

Kde:

- $Y_{\text{in}}$  = vstupná premenná
- $Y_{\text{Off}}$  = polynomická funkcia definovaná premennou p-type.
- $Y_{\text{Pol}}$  = polynomická funkcia definovaná premennou p-type.
- $Y_{\text{Trg}}$  = TRIG(t-type){ $p_i, p_{i+1}, p_{i+2}, X_{\text{in}}$ } trigonometrická funkcia definovaná premennou p-type.
- $Y_{\text{Spl}}$  = 3DSPLINE{n x ( $p_i, p_{i+1}$ )  $X_{\text{in}}$ } kubická krivka prechádzajúca cez body definované ako n párov ( $p_i, p_{i+1}$ )
- $Y_{\text{Typ}}$  funkcia ktorá definuje typ operácie ktorá ma byť vykonaná na sume  $Y_{\text{Pol}}, Y_{\text{Trg}}$  a  $Y_{\text{Spl}}$  (delenie, násobenie, atď.)
- **p-type** definuje typ polynomiálnej funkcie:
  - o 0 = štandardný polynóm
  - o 1 = Ledenrov polynóm 1ho rádu
  - o 2 = Chebyshevov polynóm 1ho rádu
- **t-type** definuje typ trigonometrickej funkcie:
  - o 0 =  $p_i \cdot \sin(2 \cdot \pi \cdot p_{i+1} + p_{i+2})$
  - o 1 =  $p_i \cdot \cos(2 \cdot \pi \cdot p_{i+1} + p_{i+2})$

### 3.3 Popis Modelu

Model je suma troch "Funkcií":  $M = BL + PK + RF$

#### 3.3.1 Baseline (BL)

$$BL = BL_{\text{Pol}}(X_{\text{out}}) + BL_{\text{Trg}}(X_{\text{out}}) + BL_{\text{Spl}}(X_{\text{out}})$$

Matematická definícia rovnaká ako pri YT ( $BL > Y$ )



### 3.3.2 Implementácia funkcií profilov spektrálnych čiar (PK):

**Table 1** Summary of line-profile models considered.  $N$  is the number of parameters required to characterize the line shape for a single isolated transition at a given temperature for a given pair of molecules.

Acronym	Profile name	Parameters		Mechanism		
		$N$		SD <sup>a</sup>	VC <sup>a</sup>	Correlation
DP	Doppler	1	$\Gamma_D$	No	No	No
LP	Lorentz	2	$\Gamma, \Delta$	No	No	No
VP	Voigt	3	$\Gamma_D, \Gamma, \Delta$	No	No	No
GP	Galatry	4	$\Gamma_D, \Gamma, \Delta, v_{VC}$	No	Soft	No
RP	Rautian	4	$\Gamma_D, \Gamma, \Delta, v_{VC}$	No	Hard	No
NGP	Nelkin–Ghatak	4	$\Gamma_D, \Gamma, \Delta, v_{VC}$	No	Hard	No
SDVP <sup>b</sup>	Speed-dependent Voigt	5	$\Gamma_D, \Gamma_0, \Delta_0, \Gamma_2, \Delta_2$	Yes	No	No
SDGP <sup>b</sup>	Speed-dependent Galatry	6	$\Gamma_D, \Gamma_0, \Delta_0, \Gamma_2, \Delta_2, v_{VC}$	Yes	Soft	No
SDNGP <sup>b</sup>	Speed-dependent Nelkin–Ghatak	6	$\Gamma_D, \Gamma_0, \Delta_0, \Gamma_2, \Delta_2, v_{VC}$	Yes	Hard	No
SDRP <sup>b</sup>	Speed-dependent Rautian	6	$\Gamma_D, \Gamma_0, \Delta_0, \Gamma_2, \Delta_2, v_{VC}$	Yes	Hard	No
HTP	Hartmann–Tran	7	$\Gamma_D, \Gamma_0, \Delta_0, \Gamma_2, \Delta_2, v_{VC}, \eta$	Yes	Hard	Yes
CSDaRSP <sup>b</sup>	Correlated SD asymmetric Rautian–Sobelman	8	$\Gamma_D, \Gamma_0, \Delta_0, \Gamma_2, \Delta_2, v_{VC}, \chi, \eta$	Yes	Combination	Yes
pCSDKS <sup>b</sup>	Partially correlated SD Keilson-Storer	8	$\Gamma_D, \Gamma_0, \Delta_0, \Gamma_2, \Delta_2, v_{VC}, \gamma_{KS}, \eta$	Yes	Combination	Yes

See text for further details and citations. All profiles except the simple Lorentz profile include the Doppler broadening effect.

<sup>a</sup>SD = speed-dependent; VC = velocity changes due to collisions.

<sup>b</sup>Parameters for these profiles are all given in the quadratic (q) form of the speed dependence; for hypergeometric models the expansion parameters  $\Gamma_0$  and  $\Gamma_2$  (or  $\Delta_0$  and  $\Delta_2$ ) are replaced by an amplitude factor and a parameter that is either  $p$ , the power-law exponent giving the dependence of the broadening on the relative speed, or  $q$ , which describes the power-law dependence of the intermolecular potential on the intermolecular distance.

Tabuľka niektorých kľúčových čiarových profilov zoradených podľa počtu parametrov. (Recommended isolated-line profile for representing high-resolution spectroscopic transitions - Jonathan Tennyson)

Budeme implementovať nasledovné funkcie: Doppler, Lorentz, Voigt, Hartmann-Tran.

- Doppler:

$$F_D(v - v_0) = \exp(-\ln(2) \cdot \dots)$$

- Lorentz:

$$F_L(v - v_0) =$$

- Voigt:

Je konvolúciou Lorentz a Gauss profilu.

- HTP:

$$F_{HTP}(v) = \text{Re}()$$

Kde  $A(v)$  a  $B(v)$  vieme určiť ako kombinácie funkcie pravdepodobnosti.

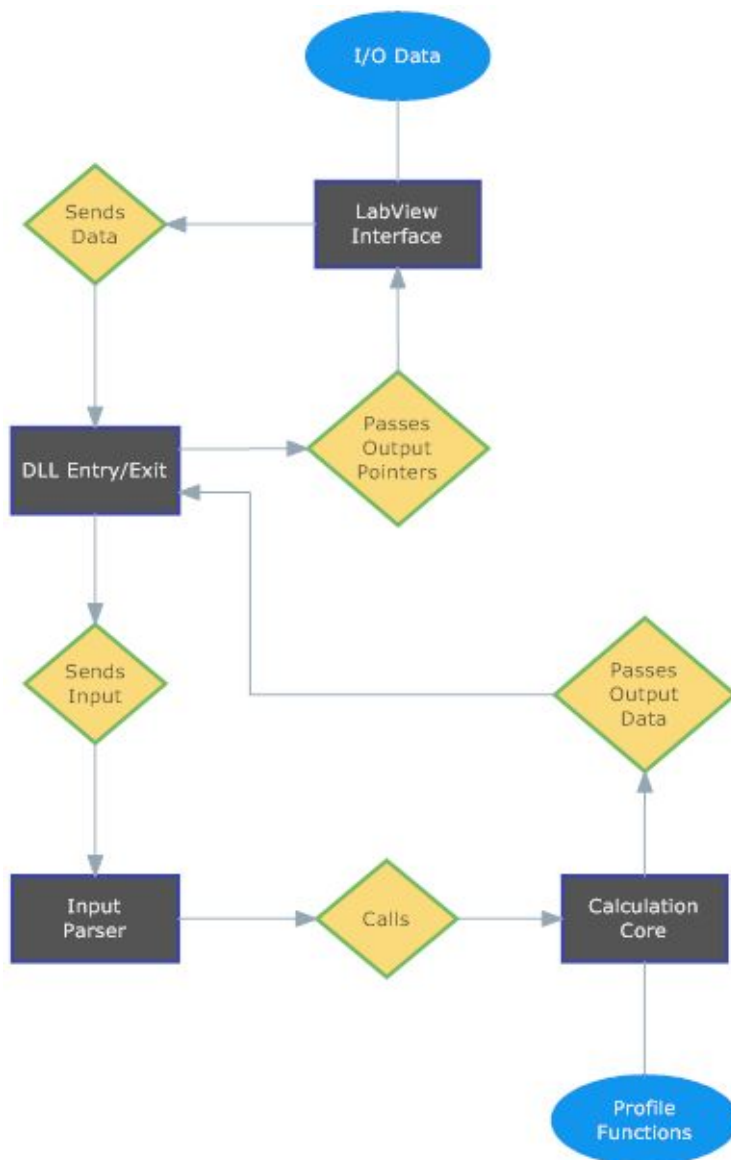
### 3.3.3 Interpolácia v referenčných dátach (RF)

„Bonusová úloha“

Funkcia interpoluje svoju hodnotu (v závislosti na  $X_{out}$  a parametri lambda) z vektorov vypočítaných pre pevné hodnoty  $X_{out}$  a lambda a uložených na disku (v binárnom súbore).

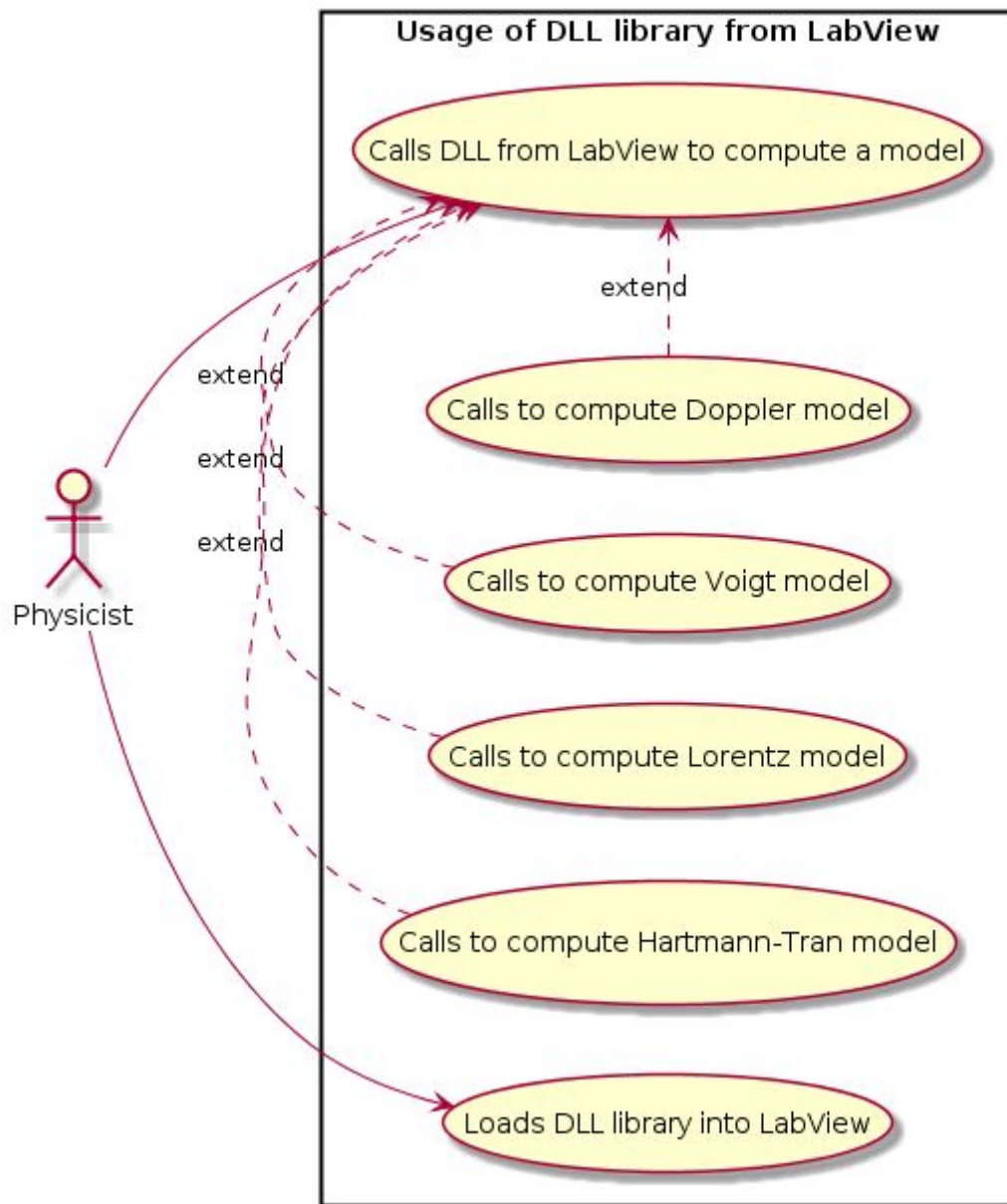
## 4. Diagramy

### 4.1 Entitno - Relačný diagram



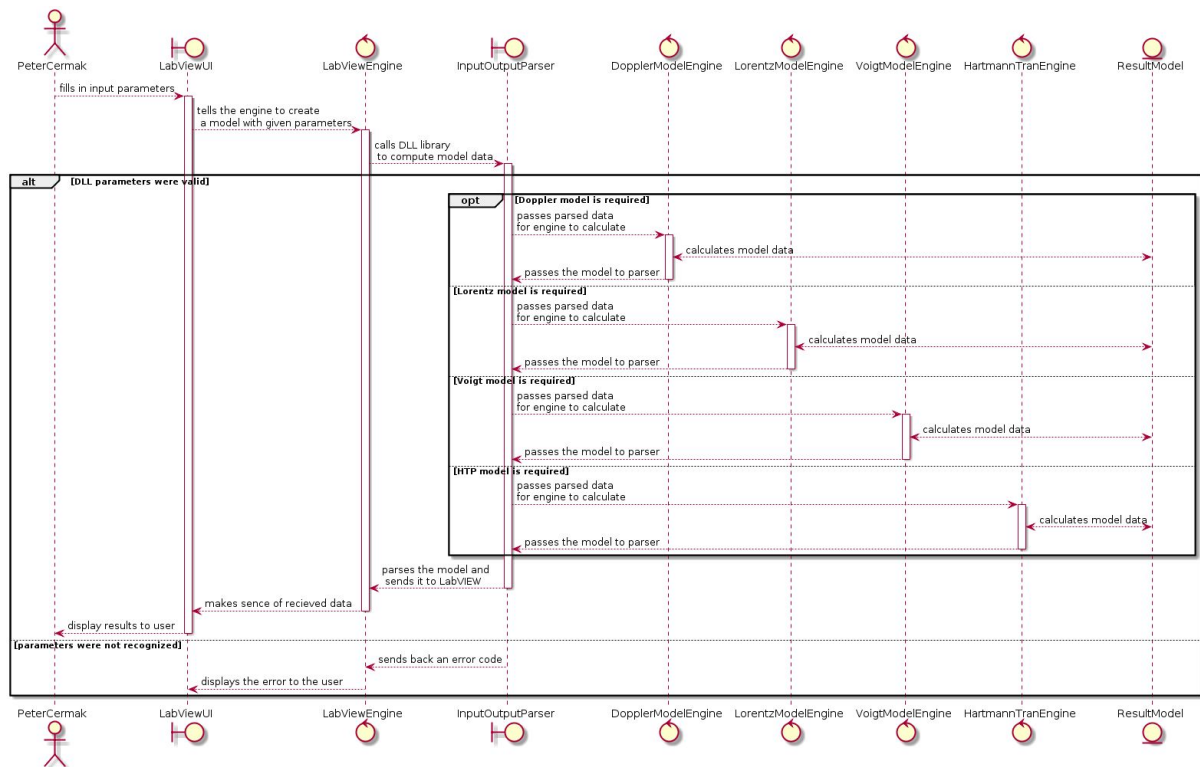
### 4.2 Use-case diagram

Veľmi jednoduchý diagram prípadov použitia zobrazuje pravdepodobne jediné využitie produktu. Ide o zavolanie DLL knižnice, ktorá bude vedieť poskytnúť pre vstupné dáta rozličné typy modelov.

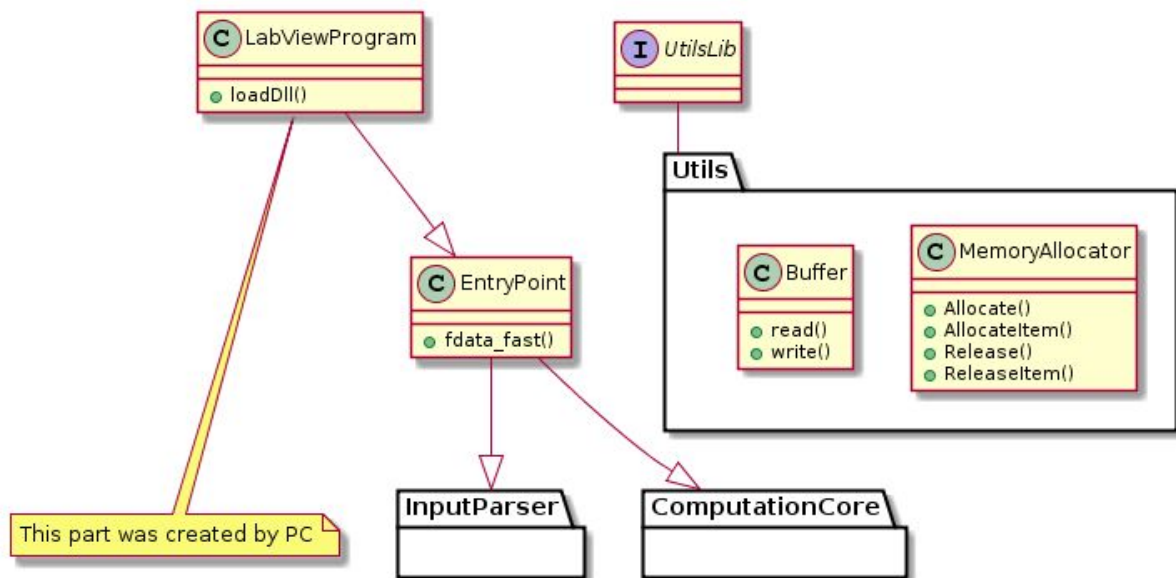


### 4.3 Sekvenčný diagram

Tento sekvenčný diagram detailnejšie popisuje fungovanie vyššie uvedeného použitia. Zameriava sa na interakciu medzi LabVIEW programom a DLL knižnicou, ktorá obsahuje moduly na spracovanie vstupu, transformáciu funkciami a vyprodukovanie modelov.



### 4.3 Triedny diagram



## **5. Testovacie scenáre**