

Univerzita Komenského
Fakulta Matematiky, Fyziky a
Informatiky

Aplikovaná Informatika

Analýza
spektroskopických dát

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

2016 / 2017

Obsah

Obsah.....	2
1. Úvod	4
1.1 Podstata dokumentu	4
1.2 Rozsah Systému.....	4
1.3 Slovník pojmov	4
1.4 Referencie.....	4
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).....	7
3.2 Transformácia Y-ovej súradnice (YT)	8
3.3 Popis Modelu.....	8
3.3.1 Baseline (BL)	8
3.3.2 Implementácia funkcií profilov spektrálnych čiar (PK):.....	9
3.3.3Interpolácia v referenčných dátach (RF)	10
4. Diagramy.....	11
4.1 Entitno - Relačný diagram	11
4.2 Use-case diagram	11
4.3 Sekvenčný diagram.....	12

4.3 Triedny diagram.....	13
5. Testovacie scenáre	14
5.1 Načítanie DLL knižnice	14
5.1.1 Testovací scenár 1.....	14
5.2 Komputácia modelov z LabVIEW s využitím DLL knižnice	14
5.2.1 Testovací scenár 2.....	14
6. Testovacie scenáre	15
6.1 Ovládanie aplikácie.....	15
6.2 Načítanie DLL knižnice	15
6.3 Zadanie vstupných parametrov.....	15
6.4 Analýza výstupu.....	16

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.

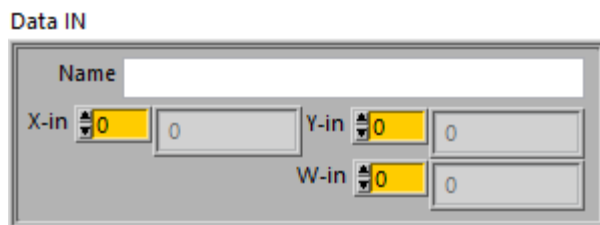
3. Katalóg požiadaviek

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 (adresy – poradie v Param.strings a Param.values), poradie adres 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 'Data PAR in' cluster control contains the following fields:

- Name:** A text input field.
- Param.strings:** A string array control with a value of 0.
- Param.numbers:** A numeric array control with a value of 0.
- Func.names:** A string array control with a value of 0.
- Data.names:** A string array control with a value of 0.
- Data.length:** A numeric array control with a value of 0.
- Func.Par.adresses:** A numeric array control with a value of 0.
- Func.Par.values:** A numeric array control with a value of 0.

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 'Data_OUT_Fast' cluster control contains the following fields:

- Name:** A text input field.
- X_out:** A numeric array control with a value of 0.
- Y_out:** A numeric array control with a value of 11.
- W_out:** A numeric array control with a value of 125.
- F:** A numeric array control with a value of 100.

Data_OUT_Complete

The 'Data_OUT_Complete' cluster control contains the following fields:

- Name:** A text input field.
- X_out:** A numeric array control with a value of 0.
- Y_out:** A numeric array control with a value of 11.
- W_out:** A numeric array control with a value of 125.
- F:** A numeric array control with a value of 100.
- 2D-data_In_Names:** A string array control with a value of 100.
- 2D-data_Out_Names:** A string array control with a value of 100.
- 2D-data_In:** A numeric array control with a value of 0.
- 2D-data_Out:** A numeric array control with a value of 0.

- 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_{off} = p_0 konštantná funkcia

X_{spl} = polynomická funkcia kde p_0 reprezentuje fixný bod transformácie

3.2 Transformácia Y-ovej súradnice (YT)

$$Y_{out} = Y_{off}(X_{in}) + Y_{typ}\{Y_{in}, Y_{pol}(X_{in}) + Y_{trg}(X_{in}) + Y_{spl}(X_{in})\}$$

Kde:

- Y_{in} = vstupná premenná
- Y_{off} = polynomická funkcia definovaná premennou p-type.
- Y_{pol} = polynomická funkcia definovaná premennou p-type.
- Y_{trg} = TRIG(t-type){ $p_i, p_{i+1}, p_{i+2}, X_{in}$ } trigonometrická funkcia definovaná premennou p-type.
- Y_{spl} = 3DSPLINE{n x (p_i, p_{i+1}) X_{in} } kubická krivka prechádzajúca cez body definované ako n párov (p_i, p_{i+1})
- Y_{typ} funkcia ktorá definuje typ operácie ktorá ma byť vykonaná na sume Y_{pol}, Y_{trg} a Y_{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 = $p_i * \sin(2 * \pi * p_{i+1} + p_{i+2})$
 - o 1 = $p_i * \cos(2 * \pi * p_{i+1} + p_{i+2})$

3.3 Popis Modelu

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

3.3.1 Baseline (BL)

$$BL = BL_{pol}(X_{out}) + BL_{trg}(X_{out}) + BL_{spl}(X_{out})$$

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 ^a	VC ^a	Correlation
DP	Doppler	1	Γ_D	No	No	No
LP	Lorentz	2	Γ, Δ	No	No	No
VP	Voigt	3	Γ_D, Γ, Δ	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 ^b	Speed-dependent Voigt	5	$\Gamma_D, \Gamma_0, \Delta_0, \Gamma_2, \Delta_2$	Yes	No	No
SDGP ^b	Speed-dependent Galatry	6	$\Gamma_D, \Gamma_0, \Delta_0, \Gamma_2, \Delta_2, v_{VC}$	Yes	Soft	No
SDNGP ^b	Speed-dependent Nelkin–Ghatak	6	$\Gamma_D, \Gamma_0, \Delta_0, \Gamma_2, \Delta_2, v_{VC}$	Yes	Hard	No
SDRP ^b	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 ^b	Correlated SD asymmetric Rautian–Sobelman	8	$\Gamma_D, \Gamma_0, \Delta_0, \Gamma_2, \Delta_2, v_{VC}, \chi, \eta$	Yes	Combination	Yes
pCSDKS ^b	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.

^aSD = speed-dependent; VC = velocity changes due to collisions.

^bParameters for these profiles are all given in the quadratic (q) form of the speed dependence; for hypergeometric models the expansion parameters Γ_0 and Γ_2 (or Δ_0 and Δ_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:

$$F_D(v - v_0) = \sqrt{\frac{\ln(2)}{\pi}} \frac{1}{\Gamma_D} \exp\left(-\ln(2) \left(\frac{v - v_0}{\Gamma_D}\right)^2\right)$$

- Lorentz:

$$F_L(v - v_0) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{(v - v_0 - \Delta)^2 + \Gamma^2}$$

- Voigt:

Je konvolúciou Lorentz a Gauss profilu.

- HTP:

$$F_{HTP}(v) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Re} \left(\frac{A(v)}{1 - \left[v_{VC} - \eta \left(C_0 - \frac{3C_2}{2} \right) \right] A(v) + \left(\frac{\eta C_2}{v_{a0}^2} \right) B(v)} \right)$$

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

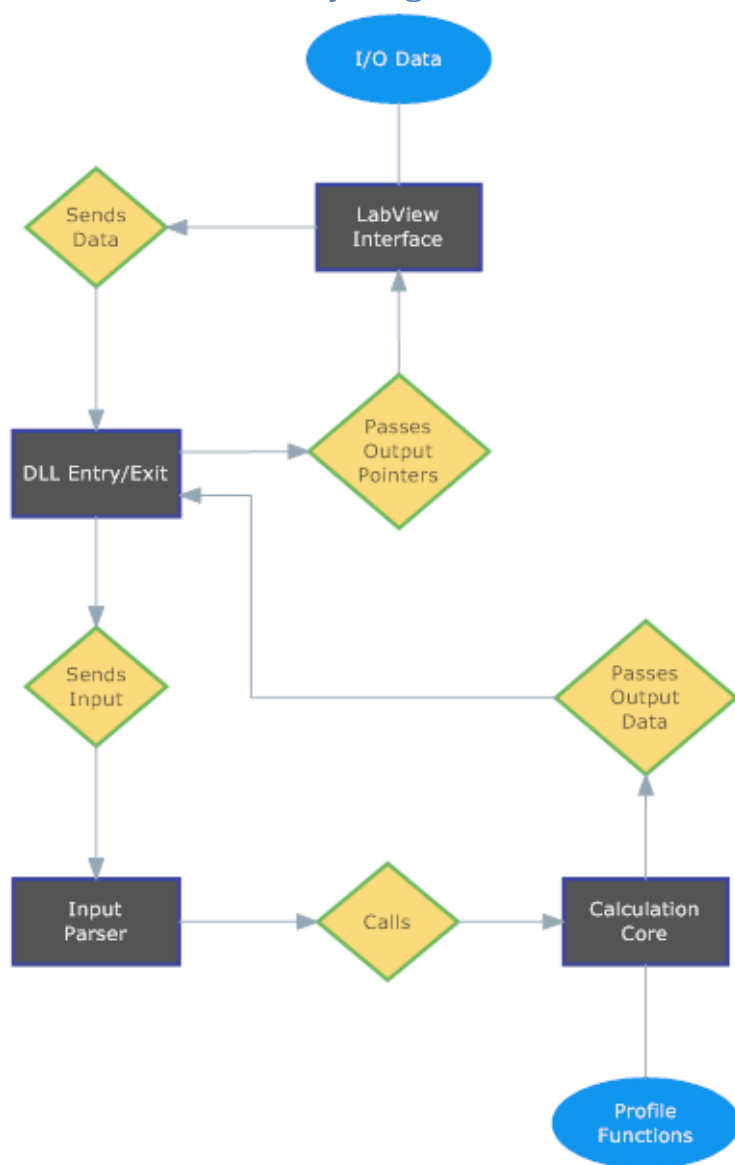
3.3.3 Interpolácia v referenčných dátach (RF)

„Bonusová úloha“

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

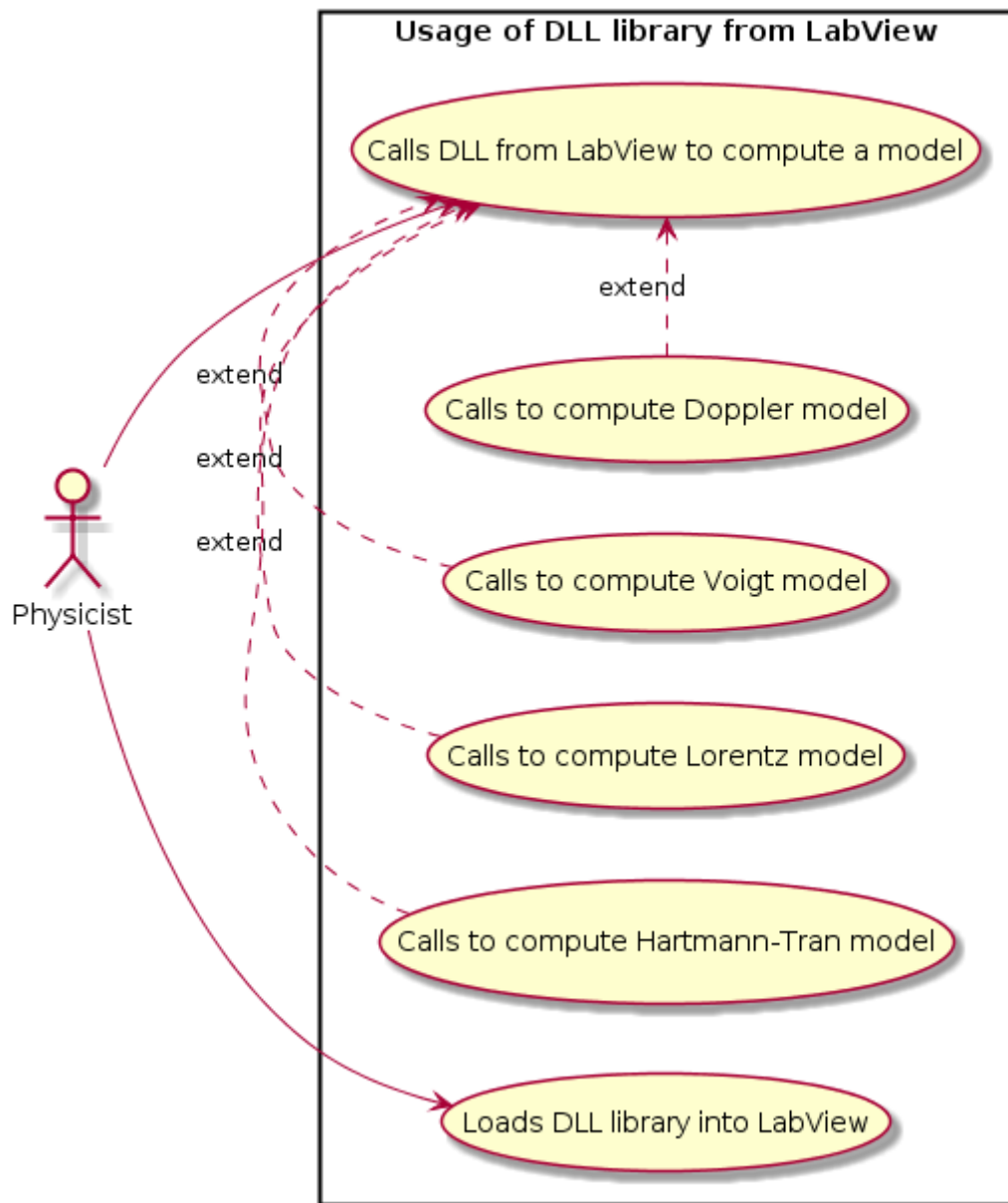
4. Diagramy

4.1 Entitno - Relačný diagram



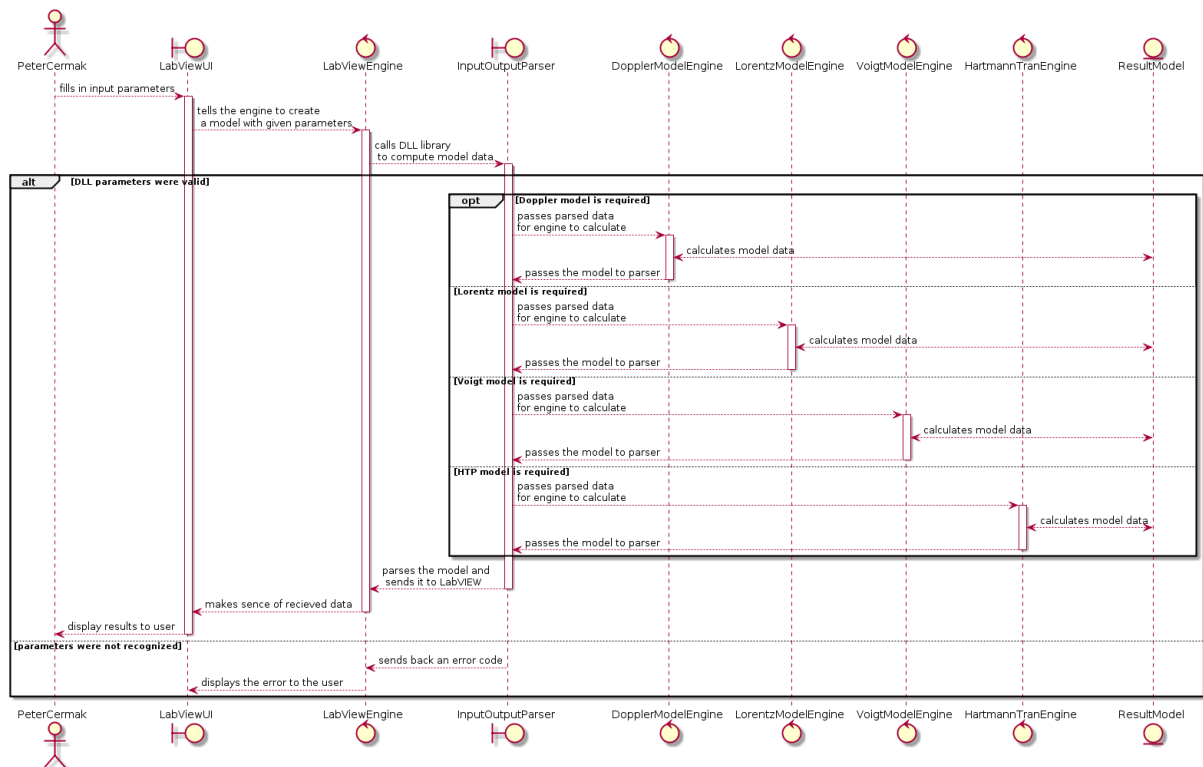
4.2 Use-case diagram

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.

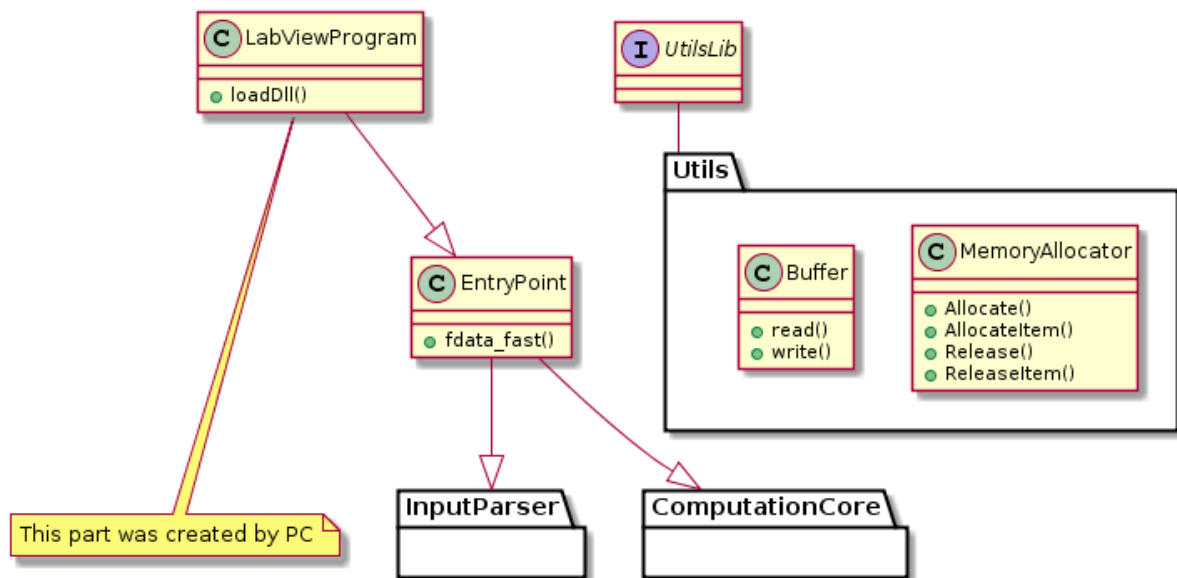


4.3 Sekvenčný diagram

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

5.1 Načítanie DLL knižnice

5.1.1 Testovací scenár 1

Vstup: Zvolenie DLL knižnice z dialógového okna v LabVIEW

Výstup: Informácia pre používateľa o úspešnom načítaní, resp.
pokračovanie behu programu bez chybového výstupu

Stav o testovania: Čaká na otestovanie

5.2 Komputácia modelov z LabVIEW s využitím DLL knižnice

5.2.1 Testovací scenár 2

Vstup: Spektroskopické dáta vyplnené vo formulári v spojení s referenciou
na výstupné parametre

Výstup: Výstupný kód a výstupné parametre naplnené dátami, ktoré
reprezentujú požadovaný model

Stav o testovania: Čaká na otestovanie

6. Testovacie scenáre

6.1 Ovládanie aplikácie

Naša aplikácia je DLL knižnica, ktorá poskytuje výpočtovú funkcionality. Je úzko spätá so softvérom LabVIEW, ktorý poskytuje aj užívateľské rozhranie na používanie tejto knižnice. Samozrejme, ako každú inú knižnicu, aj túto knižnicu je možné použiť mimo LabVIEW. Takéto využitie nie je očakávané a vyžadovalo by vytvorenie špecifických vstupných parametrov, ktoré LabVIEW generuje z užívateľského vstupu. Preto je z takéhoto hľadiska pre používateľa nepraktické.

6.2 Načítanie DLL knižnice

Závisí od konkrétnej konfigurácie LabVIEW aplikácie. V našom konkrétnom prípade sa musí DLL knižnica volať **Win32Project_AIstart** a musí byť umiestnená v adresári **data**.

6.3 Zadanie vstupných parametrov

Formát vstupu taktiež závisí od konkrétnej aplikácie. Na ukážke nášho prípadu sú k dispozícii dva spôsoby a to vyplnenie formulára, alebo import zo súboru.

The screenshot displays the LabVIEW application interface. At the top, there is a 'Run Track' section with a 'Key File path (P1)' field containing 'C:\Program Files (x86)\TI project\data\ParametersToLoad.txt'. To the right of this field is a 'Load From File' button. Below the 'Run Track' section, there are two main panels: 'Param.strings' on the left and 'Param.numbers' on the right. The 'Param.strings' panel contains a table with two columns: 'Param.strings' and 'C'. The 'Param.numbers' panel contains a table with two columns: 'Param.numbers' and 'C'. Both panels have a scroll bar on the right side.

Param.strings	C
XT@XOff@p0	
YT@YTyp@function	C_YT
YT@YSpl@p0-0	
YT@YSpl@p0-1	
YT@YSpl@p1-0	
YT@YSpl@p1-1	
YT@YSpl@p2-0	
YT@YSpl@p2-1	
PK@C1@sample	
PK@C1@A/S	
PK@C1@shape	C_PT
PK@C1@center	
PK@C1@surface	
PK@C1@amplitude	
PK@C1@w0	
PK@C1@wD	
PK@C1@d0	

Param.numbers	C
0.1	1
2	0
4280	0
2.8	0
4288	0
2.6	0
4295	0
2.8	0
11	0
0	0
4290	0
0.5	0
0.1	0
0.01	0
0.001	0
0.001	0
0.1	0
0	0

6.4 Analýza výstupu

Tlačítkami “Go_fdata_fast” a “Go_fdata_complete” sa púšťa výpočet so zadanými vstupnými parametrami. V poli “return” type sa zobrazuje výstupný kód a dáta, ktoré poskytne DLL knižnica sa použijú na vykreslenie grafu v pravej časti.

