XRayAnalyzer

User manual

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Projekt | XRayAnalyzer | | v0.1.2 |
| Dokument | Používateľská príručka | | v2.0 |
| Autor | František Pastorek | frantisekpastorek@gmail.com | |
| Odkaz | https://github.com/irelevant25/XRayAnalyzer | | |

**Popisné charakteristiky dokumentu**

Obsah

[Úvod 4](#_Toc104569315)

[Inštalácia/spustenie 5](#_Toc104569316)

[Začíname 8](#_Toc104569317)

[Spectrum processing 10](#_Toc104569318)

[Load file 11](#_Toc104569319)

[Peaks editing 15](#_Toc104569320)

[Only select peak 16](#_Toc104569321)

[Add peak 17](#_Toc104569322)

[Edit peak bases 19](#_Toc104569323)

[Remove peak 21](#_Toc104569324)

[Search peaks 22](#_Toc104569325)

[Data calibration 25](#_Toc104569326)

[Background removal 31](#_Toc104569327)

[Sum peaks removal 34](#_Toc104569328)

[Net extraction 36](#_Toc104569329)

[Analysis 38](#_Toc104569330)

[Qualitative analysis 39](#_Toc104569331)

[Quantitative analysis 42](#_Toc104569332)

[Data 44](#_Toc104569333)

[Elements line 45](#_Toc104569334)

[Detector efficiencies 49](#_Toc104569335)

[Fluorescent yields 53](#_Toc104569336)

[Jump ratios 57](#_Toc104569337)

[Xray mass coefficients 61](#_Toc104569338)

# Úvod

Dokument slúži ako používateľská príručka pre pochopenie jednotlivých funkcionalít a dosiahnutie cieleného výsledku pri práci so softvérom. V jednotlivých častiach dokumentu sú popísané kroky, ktoré je potrebné dodržať pre správne vyhodnotenie analýzy XRF dát spektra.

# Inštalácia/spustenie

Softvér XRayAnalyzer v0.1.2 sa neinštaluje. Jeho používanie funguje ako portable verzia. To znamená, že prostredníctvom operačného systému Windows 10 je možné ho spustiť z akéhokoľvek zariadenia. Pre jeho odinštalovanie stačí odstrániť stiahnuté súbory. Pre uloženie akýchkoľvek dát, ktoré softvér pre svoje správne fungovanie potrebuje, si ukladá do svojho priečinku, v ktorom sa softvér nachádza. Pre používanie softvéru je nevyhnutné si softvér najskôr stiahnuť. Verzia, ku ktorej je používateľská príručka písaná je v0.1.2:

odkaz pre stiahnutie verzie v0.1.2: [xrayanalyzer-0.1.2.zip](https://github.com/irelevant25/XRayAnalyzer/releases/download/XRayAnalyzer-0.1/XRayAnalyzer-0.1.2.zip)

Pre stiahnutie najnovšej verzie, ku ktorej nie je aktuálna verzia používateľskej príručky viazaná, je potrebné ísť na stránku vydaných verzií softvéru na github-e:

odkaz pre vydané verzie softvéru: [releases](https://github.com/irelevant25/XRayAnalyzer/releases)

Na stránke so zoznamom vydaných verzií sa nachádzajú aj zmeny, ktoré boli pre dané verzie vykonané. Každá verzia má vlastný zoznam zmien.

Úplne hore sa nachádza názov s hlavnou verziou, pre ktorú je tag viazaný. V tomto prípade 0.1. Následne je nižšie popísaná každá vydaná verzia spolu s krátkym popisom a jednotlivými zmenami vykonanými a aplikovanými pre danú verziu. Úplne dole sa nachádzajú súbory na stiahnutie spolu s údajom, ako stará je daná verzia súboru. Názov súboru označený ako „**Source code**“ je určený pre zdrojový kód. Ostatné súbory, pri ktorých je uvedená aj veľkosť súboru, sú jednotlivé súbory softvéru. Samotná portable verzia softvéru je vždy označená svojím názvov a verziou. Vyššie číslo označuje vyššiu verziu softvéru. Je všeobecne odporúčané si vždy stiahnuť najnovšiu verziu.

A screenshot of a computer

Description automatically generated with medium confidence

Po stiahnutí archívu/portable verzie softvéru, je potrebné disponovať archivovacím softvérom. V prípade archívu ZIP, by mal byť samotný operačný systém Windows 10 byť schopný rozbaliť daný typ archívu. V opačnom prípade je potrebné stiahnúť softvér tretej strany. Napríklad 7zip. Po rozbalení súboru, sa v priečinku nachádza niekoľko súborov a priečinkov:

* Datasets – obsahuje všetky datasety, ktoré softvér pri spracovaní a analýzy využíva
* Languages – obsahuje jazykové verzie softvéru
* Logs – nachádza sa v ňom vždy jediný súbor obsahujúci záznamy volaní skriptov
* Python – obsahuje všetky potrebné súbory pre spustenie python skryptov spolu s knižnicami
* Scripts – nachádzajú sa v ňom súbory so skriptami, ktoré softvér pre svoj chod potrebuje
* TestData – obsahuje všetky testovacie resp. súbory s príkladmi dát
* Niekoľko súborov označených ako dll – knižnice nevyhnutné pre chod softvéru
* XRayAnalyzer.pdb – debug databáza softvéru
* **XRayAnalyzer.exe** – samotný spúšťací súbor pre spustenie softvéru

Graphical user interface

Description automatically generated

# Začíname

Softvér vyžaduje operačný systém Windows 10 s odporúčaným rozlíšením aspoň full HD, teda 1920x1080. Samozrejme, výšku a šírku okna je možné si prispôsobiť, avšak pri veľkej redukcií predvolenej šírky, či výšky, môže dôjsť k artefaktom resp. k nesprávnemu zobrazeniu niektorých komponentov používateľského rozhrania. Odporúčaná minimálna šírka okna 1600 a výška 1200.

Pred použitím softvéru je nevyhnutné disponovať vstupnými dátami vo formáte MCA, prípadne z JSON, ak používateľ už v minulosti softvér použil a výstup uložil. Dáta musia obsahovať informácie o spektre a súbor nesmie byť poškodený, prípadne musí byť validný podľa formátu, ktorý reprezentuje. Je to minimálna požiadavka pre správne načítanie súboru.

Pri práci so softvérom je nutné zachovať postupnosť krokov spracovania spektra pre správne fungovanie a následné určenie chemického zloženia skúmanej vzorky:

1. Načítanie súboru „**Select file**“ v časti „**Spectrum processing**“ v obrazovke „**Load file**“.
2. Pridanie píkov „**Add peak**“ v časti „**Spectrum processing**“ v obrazovke „**Peak editation**“.
3. Energetická kalibrácia „C**alibration**“ v časti „**Spectrum processing**“ v obrazovke „**Data calibration**“.
4. Detekcia (odstránenie) pozadia (voliteľný krok) „**Background remove**“ v časti „**Spectrum processing**“ v obrazovke „**Background removal**“.
5. Odstránenie sumačných píkov (voliteľný krok) „**Sum peaks remove**“ v časti „**Spectrum processing**“ v obrazovke „**Sum peaks removal**“.
6. Výpočet plôch píkov „**Net area**“ v časti „**Spectrum processing**“ v obrazovke „**Net extraction**“.
7. Kvalitatívna analýza „**Qualitative analysis**“ v časti „**Analysis**“ v obrazovke „**Qualitativa analysis**“.
8. Kvantitatívna analýza „**Quantitative analysis**“ v časti „**Analysis**“ v obrazovke „**Quantitative analysis**“.

Dodržanie jednotlivých krokov v presne určenom podarí vyššie je veľmi dôležité a pri preskakovaní krokov, prípadne vynechaniu niektorého kroku, je možné, že program spadne, prípadne nebude možné vykonať analýzy. V prípade niektorých chýb program používateľa upozorní chybovou hláškou.

**Upozornenie:** Pre správne fungovanie softvéru je nevyhnutné aby boli skripty nastavené presne tak, ako majú. V prípade akéhokoľvek zásahu do skriptov pythonu neručím za nesprávne fungovanie softvéru, prípadne nemožnosti spustenia samotného softvéru.

**Upozornenie:** Prvé spustenie softvéru môžu trvať až niekoľko minút z dôvodu inicializácie niekoľkých súborov potrebných pre správne fungovanie softvéru.

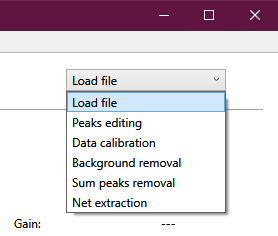
# Spectrum processing

Sekcia „**Spectrum processing**“ obsahuje obrazovky pre spracovanie spektra, ktoré predstavuje nevyhnutný krok pre vykonanie kvalitatívnej a kvantitatívnej analýzy.

Table

Description automatically generatedSekcia je dostupná v menu v ľavej hornej časti obrazovky ako „**View**“. Menu obsahuje niekoľko ďalších menu položiek. Prvá z nich je práve spracovanie spektra „**Spectrum processing**“.

## Load file



Používateľ prejde do tejto časti “**Load file**” prostredníctvom list boxu v pravej hornej časti obrazovky.

Pri spustení softvéru sa používateľ síce môže voľne pohybovať naprieč obrazovkami, ale žiadna funkcionalita nebude fungovať. Ukážka programu pri spustený:

Graphical user interface, application, table, Excel

Description automatically generated

Graphical user interface, application

Description automatically generatedAko prvé je potrebné načítať súbor. Buď formátu MCA alebo JSON. Možnosť výberu súboru je možné prostredníctvom tlačidla „**Select file**“.

Po vybratí a potvrdení súboru sa okamžite zobrazia dáta. Vykreslenie píkov, bodov, spektra, a pod. systém vždy vykonáva automaticky.

Graphical user interface

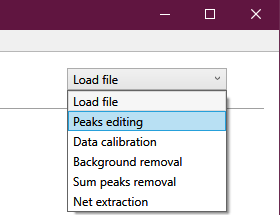
Description automatically generated

Na pravej strane obrazovky môže používateľ vidieť, aké všetky dáta súbor obsahuje. V podobe zoznamu, či:

* Graphical user interface

  Description automatically generated„**Gain**“ došlo k zosilneniu spektra prostredníctvom softvéru DppMCA,
* „**Peeks**“ dáta obsahujú dáta o píkoch. Ak áno, softvér ich automaticky vykreslí,
* „**Calibrated**“ sú dáta kalibrované,
* „**Background removed**“ došlo k odstráneniu, resp. detekcií pozadia,
* „**Sum peaks removed**“ boli odstránené sumačné píky,
* „**Smoothed**“ došlo k vyhladeniu spektra, 102
* „**Net extracted**“ boli extrahované plochy píkov,
* „**Qualitative analysis**“ bola vykonaná kvalitatívna analýza,
* „**Quantitative analysis**“ bola vykonaná kvantitatívna analýza.

## Peaks editing

Používateľ prejde do tejto časti “**Peaks editing**” prostredníctvom list boxu v pravej hornej časti obrazovky.

Pri prechode do časti softvéru pre editáciu píkov má používateľ možnosť pracovať s píkmi a upraviť si ich podľa potreby.

### Only select peak

Graphical user interface

Description automatically generatedPre možnosť zobrazenia informácií o píku je potrebné, aby používateľ zvolil možnosť “**Only select peak**” v pravej časti obrazovky “**Peaks editing**”.

A picture containing table

Description automatically generatedPri kliknutí na akýkoľvek pík, sa zobrazia informácie o píku v pravom dolnom rohu obrazovky. Zobrazia sa iba informácie, ktoré sú pre pík dostupné.

### Add peak

Graphical user interface

Description automatically generatedPre možnosť pridania píku je potrebné, aby používateľ zvolil možnosť “**Add peak**” v pravej časti obrazovky “**Peaks editing**”.

Pri pridávaní píku sa vytvorí v grafe pík, ktorý je farebne odlíšených od ostatných aby používateľ vedel, ktorý pík momentálne ovláda. Konkrétne pík nadobudne oranžovú farbu.

Chart, histogram

Description automatically generated

A picture containing graphical user interface

Description automatically generatedV prípade, že si používateľ rozmyslí pridanie píku, stačí kliknúť na tlačidlo „**Cancel**“ v pravej časti obrazovky. V takom prípade systém pík odstráni. Ak chce vytváraný pík potvrdiť, stačí kliknúť na tlačidlo „**Confirm**“ v pravej časti obrazovky. Systém pri potvrdení píku prefarbí pík na modrú farbu, ktorá signalizuje aktuálne registrované píky v spektre.

### Edit peak bases

Graphical user interface

Description automatically generatedPre možnosť upravenia píku je potrebné, aby používateľ zvolil možnosť “**Edit peak bases**” v pravej časti obrazovky “**Peaks editing**”.

V prípade úspešného kliknutia na pík, systém prefarbí pík na tyrkysovú, aby používateľ pomocou farebného odlíšenia vedel, ktorý pík momentálne ovláda a pomocou konkrétnej farby aj to, že daný pík nevytvára, ale upravuje.

Chart, histogram

Description automatically generated

A picture containing graphical user interface

Description automatically generatedV prípade, že si používateľ rozmyslí upravenie píku, stačí kliknúť na tlačidlo „**Cancel**“ v pravej časti obrazovky. V takom prípade systém pík odstráni zmeny a vráti pík do pôvodného stavu. Ak chce upravený pík potvrdiť, stačí kliknúť na tlačidlo „**Confirm**“ v pravej časti obrazovky. Systém pri potvrdení píku prefarbí pík na modrú farbu, ktorá signalizuje aktuálne registrované píky v spektre.

### Remove peak

Graphical user interface

Description automatically generatedPre možnosť odstránenia píku je potrebné, aby používateľ zvolil možnosť “**Remove peak**” v pravej časti obrazovky “**Peaks editing**”.

V tomto stave už iba stačí na ktorýkoľvek pík kliknúť a systém ho okamžite a automaticky odstráni. Nie je potrebné nič potvrdiť a taktiež nie je možné odstránenie píku vrátiť späť.

### Search peaks

Graphical user interface

Description automatically generatedPre možnosť automatického vyhľadania píkov je potrebné, aby používateľ zvolil možnosť “**Search peaks**” v pravej časti obrazovky “**Peaks editing**”.

V tomto prípade má používateľ k dispozícií hneď niekoľko nastavení:

* Graphical user interface

  Description automatically generated“**Minimal distance between peaks**”: Požadovaná minimálna horizontálna vzdialenosť (>= 1) vo vzorkách medzi susednými píkami. Najprv sa odstraňujú menšie píky, kým nie je splnená podmienka pre všetky zostávajúce píky
* “**Prominence**”: Požadovaná dôležitosť píkov. Vždy interpretovaný ako minimálna dôležitosť.
* “**Channel borders**”: Požadovaná šírka píkov vo vzorke. “**From**” hodnota je minimálna požadovaná šírka a “**To**” maximálna požadovaná šírka.
* “**Maximum channel width**”: Používa sa na výpočet dôležitostí píkov.

Graphical user interface, application, table, Excel

Description automatically generatedPo nastavení jednotlivých parametrov podľa potreby, stačí kliknúť na tlačidlo „**Preview**“ a systém zavolá skript, ktorý na základe parametrov vyhľadá všetky píky, ktoré následne systém vykreslí.

Graphical user interface, application

Description automatically generatedV prípade, že používateľ nechce po každej zmene parametrov klikať na tlačidlo, môže si zaškrtnúť možnosť „**Live preview**“, kedy systém bude reagovať na akúkoľvek zmenu ktoréhokoľvek parametra a automaticky zavolá skript pre vykonanie vyhľadania píkov, ktoré následne hneď aj zobrazí.

Graphical user interface, application

Description automatically generatedV prípade, že používateľ nie je spokojný s výsledkom, môže kliknúť na tlačidlo „**Cancel**“, kedy sa odstránia všetky píky, ktoré boli vykreslené pomocou funkcie automatického vyhľadania píkov a systém naspäť zobrazí predchádzajúce píky. V prípade, že používateľ klikne na tlačidlo „**Confirm**“, predošlé píky sa zo systému natrvalo odstránia a nahradia sa novými.

Systém automaticky a striedavo mení farbu zobrazených píkov. Je to pre prípad, že by sa hranice niektorých píkov prekrývali, prípadne nebolo jasne vidieť hranice blízkych píkov.

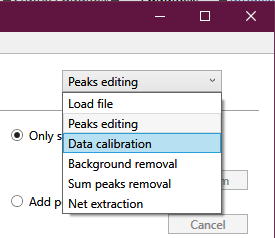
Chart, histogram

Description automatically generated

V momente, keď používateľ automatické vyhľadanie píkov potvrdí, systém zmení farbu všetkých píkov na modrú.

**Upozronenie**: V režime vyhľadávania píkov, sa dočasne skryjú všetky predošlé píky.

## Data calibration

Používateľ prejde do tejto časti “**Data calibration**” prostredníctvom list boxu v pravej hornej časti obrazovky.

Pri prechode do časti softvéru pre energetickú kalibráciu má používateľ možnosť kalibrovať jednotlivé kanály na energie.

Ak načítané dáta obsahovali kalibračné body, systém automaticky zavolá skript pre kalibráciu a vykoná kalibráciu spektra. Používateľ môže kalibračné body odstrániť, vytvoriť nové a spektrum kalibrovať pomocou nich. Urobí tzv. Rekalibráciu.

Table

Description automatically generatedJednotlivé kalibračné body sú zobrazené v tabuľke kalibračných bodov na pravej strane obrazovky. V prípade, že kalibračné body boli načítané zo súboru, tabuľka obsahuje iba kanále a energie kalibračných bodov.

Table

Description automatically generatedPre odstránenie kalibračného bodu je potrebné najskôr kalibračný bod v tabuľke označiť (kliknúť naň). Vtedy dôjde k označeniu riadka kalibračného bodu a používateľ môže kalibračný bod odstrániť kliknutím na tlačidlo “**Remove selected point**”. V prípade, že si používateľ neželá kalibračný bod odstrániť, stačí kliknúť na tlačidlo “**Cancel**” a systém zruší označenie daného kalibračného bodu v tabuľke kalibračných bodov.

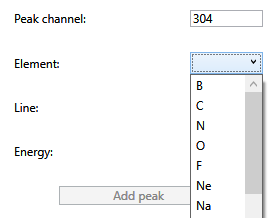
Používateľ môže hodnoty kanálov a príslušné energie zadať ručne, alebo môže využiť funkcie, ktoré softvér ponúka. Používateľ má možnosť kliknúť na ľubovoľný pík v grafe, čím dôjde k jeho označeniu a zmene farby na zelenú pre indikáciu označeného píku.

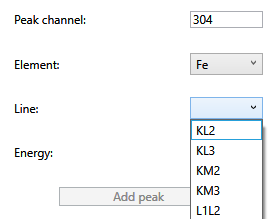
Chart, histogram

Description automatically generated

Graphical user interface

Description automatically generated„**Peak channel**“: parameter kanálu sa automaticky vyplní kanálom vybraného píku. Kanál môže používateľ tiež zadať ručne.

Ďalší krok predstavuje voľbu chemického prvoku „**Element**“. Na výber sú všetky chemické prvky periodickej tabuľky. Zoznam obsahuje chemické označenia jednotlivých chemických prvkov. Tento krok je dobrovoľný.

Po vybraní chemického prvku sa odomkne možnosť výberu emisnej čiary „**Line**“. Zobrazené čiary sú len pre vybraný chemický prvok. Každá čiara ma charakteristickú energiu. Tento krok je dobrovoľný.

Graphical user interface, text, application

Description automatically generatedPo vybraní emisnej čiary, sa automaticky podľa nej vyplní parameter energie „**Energy**“. Energia môže byť zadaná aj ručne. V takom prípade je ale bezvýznamné vyberať chemický prvok a jeho čiaru.

A teraz už iba stačí kliknúť na tlačidlo „**Add point**“, čím sa pridá kalibračný bod do tabuľky. Používateľ teda nemusí ručne hľadať energie v tabuľkách.

Table

Description automatically generatedPo zadaní kalibračných bodov môže používateľ kliknúť na tlačidlo „**Calibrate**“, čím dôjde k energetickej kalibrácií.

Graphical user interface, text, application, email

Description automatically generatedPre sprístupnenie tlačidla „**Calibrate**“ je nutné zadať minimálne dva kalibračné body. Inak nie je možné vykonať energetickú kalibráciu resp. tlačidlo „**Calibrate**“ bude blokované.

Graphical user interface

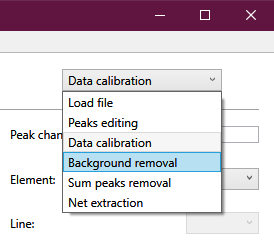
Description automatically generated with low confidenceKalibračné musia byť priamo úmerné. To znamená, že vyšší kanál musí mať vyššiu energiu ako ktorýkoľvek nižší kanál. V opačnom prípade softvér používateľa upozorní a v takom prípade nie je možné vykonať kalibráciu.

Graphical user interface, text, application, email

Description automatically generatedPo úspešnom kalibrovaní sa pod tabuľkou zobrazia štatistiky kalibrácie (smerodajnú chybu, sklon krivky a pod.).

**Upozronenie:** Keď používateľ raz klikne na tlačidlo „Calibrate“, vykonanú kalibráciu nie je možné vrátiť, ani odstrániť, iba nanovo kalibrovať.

## Background removal

Používateľ prejde do tejto často “**Background removal**” prostredníctvom list boxu v pravej hornej časti obrazovky.

Pri prechode do časti softvéru pre odstránenie pozadia má používateľ možnosť podľa parametrov odstrániť pozadie zo spektra.

V tomto prípade má používateľ k dispozícií hneď niekoľko nastavení:

* Graphical user interface, application, table

  Description automatically generated“**Smoothnes**”: Parameter lambda algoritmu. Parameter predstavuje silu vyhľadenia pozadia.
* “**Iterations**”: Parameter počtu iterácií algoritmu.

Graphical user interface, application, table, Excel

Description automatically generated

Po nastavení jednotlivých parametrov podľa potreby, stačí kliknúť na tlačidlo „**Preview**“ a systém zavolá skript, ktorý na základe parametrov vypočíta pozadie a zobrazí priamo v grafe so špecifickou farbou, konkrétne tyrkysovou.

Graphical user interface, application

Description automatically generatedV prípade, že používateľ nechce po každej zmene parametrov klikať na tlačidlo, môže si zaškrtnúť možnosť „**Live preview**“, kedy systém bude reagovať na akúkoľvek zmenu ktoréhokoľvek parametra a automaticky zavolá skript.

Graphical user interface, application

Description automatically generatedV prípade, že používateľ nie je spokojný s výsledkom, môže kliknúť na tlačidlo „**Cancel**“, kedy sa odstráni vypočítané pozadie, ktoré bolo vykreslené. V prípade, že používateľ klikne na tlačidlo „**Confirm**“, dôjde k **aplikovaniu pozad**ia a vypočítané pozadie sa uloží a systém zmení farbu pozadia na čiernu.

Neaplikované pozadie, ktoré má používateľ stále možnosť nastaviť/meniť podľa parametrov:

Chart, histogram

Description automatically generated

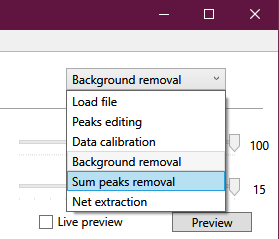
Pod pojmom **aplikovanie odstránenia** pozadia sa v tomto myslí to, že systém má údaje o pozadí síce uložené, ale zatiaľ s nimi nič nerobí. V prípade, že používateľ bude vykonávať operáciu, pri ktorej je pozadie relevantné, tak systém zistí, či používateľ vykonal operáciu odstránenia pozadia a toto pozadie skutočne odstráni, ale len na pozadí. Pri volaní skriptov sa aplikuje odstránenie pozadia na dáta. Ale v grafe pozadie bude vyzerať stále rovnako.

Chart, histogram

Description automatically generated

**Upozornenie:** Ak používateľ už raz pozadie potvrdí, túto operáciu nie je možné vrátiť späť.

## Sum peaks removal

Používateľ prejde do tejto často “**Sum peaks removal**” prostredníctvom list boxu v pravej hornej časti obrazovky.

Pri prechode do časti softvéru pre odstránenie sumačných píkov má používateľ možnosť vidieť, ktoré píky systém detegoval ako sumačné a v prípade potreby ich odstrániť.

Chart, histogram

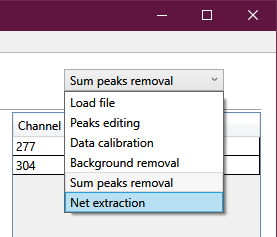
Description automatically generatedV pravej hornej časti obrazovky je tabuľka so všetkými píkami, ktoré používateľ pridal, prípadne všetky, ktoré systém načítal so súboru. Pre zistenie, ktoré z daných píkov sú sumačné, stačí kliknúť na tlačidlo „**Detect sum peaks**“. Systém následne zobrazí detegované sumačné píky v tabuľke nižšie.

Chart, histogram

Description automatically generatedV tabuľke sumačných píkov sa nachádzajú vybrané resp. systémom detegované sumačné píky z tabuľky všetkých píkov. V prípade, že používateľ chce sumačné píky odstrániť, stačí kliknúť na tlačidlo „**Confirm**“. Systém odstráni píky z tabuliek a aj z grafu. V prípade, že používateľ nie je spokojný s výsledkom detekcie sumačných píkov, stačí kliknúť na tlačidlo „**Cancel**“ a systém tabuľku sumačných píkov vyčistí.

**Upozornenie:** Operáciu odstránenia píkov nie je možné vrátiť späť. V prípade, že používateľ chce odstránený pík vrátiť späť, musí ho znovu ručne pridať v časti „**Peak editation**“ pomocou možnosti „**Add peak**“.

## Net extraction

Používateľ prejde do tejto často “**Net extraction**” prostredníctvom list boxu v pravej hornej časti obrazovky.

Pri prechode do časti softvéru pre výpočet plôch píkov má používateľ možnosť vidieť čistú a hrubú plochu jednotlivých píkov.

Table

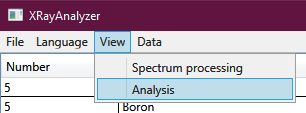
Description automatically generatedV pravej hornej časti obrazovky je tabuľka so všetkými píkmi s informáciami ako kanál „**Channel**“, energia „**Energy**“, čistá plocha „**Net**“ a hrubá plocha „**Gross**“. Pre vykonanie výpočtu plochy píkov stačí kliknúť na tlačidlo „**Get areas**“. Systém automaticky vypočíta plochu píkov a zobrazí v tabuľke.

Table

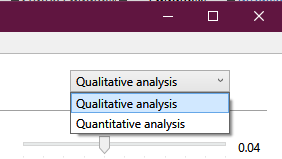
Description automatically generatedV prípade, že používateľ aplikoval detekciu pozadia, tak čistá aj hrubá plocha píku bude mať rovnakú hodnotu. V prípade, že pozadie aplikované nebolo, systém na základe ľavého a pravého bodu píku určí čistú plochu. Naopak hrubú plochy bude brať ako celú plochu píku.

# Analysis

Sekcia „**Analysis**“ obsahuje obrazovky pre analýzu spektra, konkrétne kvalitatívnu analýzu a kvantitatívnu analýzy.

Sekcia je dostupná v menu v ľavej hornej časti obrazovky ako „**View**“. Menu obsahuje niekoľko ďalších menu položiek. Druhá z nich je práve spracovanie spektra „**Analysis**“.

## Qualitative analysis

Používateľ prejde do tejto často “**Qualitative analysis**” prostredníctvom list boxu v pravej hornej časti obrazovky.

Pri prechode do časti softvéru kvalitatívna analýza má používateľ možnosť nastavenia parametrov pre docielenie čo najlepšej kvalitatívnej analýzy.

V tomto prípade má používateľ k dispozícií hneď niekoľko nastavení:

* Chart, histogram

  Description automatically generated“**Energy abs treshold**”: Maximálny rozdiel energie medzi referenčnou a porovnávanou hodnotou.
* “**Rate treshold**”: Vyhľadanie všetkých vyhovujúcich chemických prvkov na základe pravdepodobnosti vybraných čiar podľa energie píku.

Po kliknutí na tlačidlo ” **Run Analysys**”, system zavola skripty pre vykonanie kvalitatívnej analýzy.

Graphical user interface, application, table, Excel

Description automatically generatedSystém indikuje aktuálne vykonávanie skriptu tak, že zablokuje tlačidlo „**Run Analysis**“ a premenuje ho na „**Analysis is running**“. Po dokončení analýzy sa opäť povolí tlačidlo a zmení sa jeho názov späť.

Keď systém získa zo skriptu výsledné dáta, tak tlačidlo vráti do pôvodného stavu a výsledky zobrazí priamo do grafu. V grafe sa dáta zobrazia ako texty pre jednotlivé píky. Konkrétne chemická značka prvku a zistená emisná čiara.

Chart, histogram

Description automatically generated

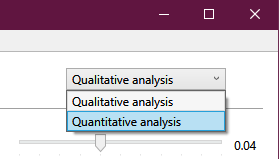
Chart, histogram

Description automatically generatedV prípade že používateľ nie je spokojný s výsledkom vyhodnotenia niektorého píku, môže na pík kliknúť, čím zobrazia informácie o výsledku kvalitatívnej analýzy pre daný pík. Konkrétne všetky možnosti emisných čiar a prvkov “**Possible matches**”, o ktorých by algoritmus kvalitatívnej analýzy na základe parametrov vôbec uvažoval a zoznam emisných čiar a prvkov “**Best matches**”, ktoré algoritmus vyhodnotil ako najviac pravdepodobné.

Keďže algoritmus uprednostňuje najskôr K čiary, teda ak nejaké možnosti K čiar vôbec boli vybrané medzi možné výsledky. Ak sa v zozname všetkých možností, medzi ktorými algoritmus uvažuje, sa nenachádza akceptovateľný výsledok, je to s najväčšou pravdepodobnosťou dané tým, že pík buď nie je reálnym odrazom žiadneho prvku ale nejakého fyzikálneho efektu, ktorý spôsobil artefakt v podobe píku v spektre, alebo kvôli zlej kalibrácií. V takom prípade je nutné, aby používateľ zväčšil hodnoty vyhľadávacích parametrov.

**Upozornenie:** Vykonanie analýzy nie je možné vrátiť späť. Po spustený analýzy system automaticky uloží výsledok. V prípade, že používateľ nie je spokojný s výsledkom, je potrebné znovu kliknúť znovu na tlačidlo “**Run analysis**”.

## Quantitative analysis

Používateľ prejde do tejto často “**Quantitative analysis**” prostredníctvom list boxu v pravej hornej časti obrazovky.

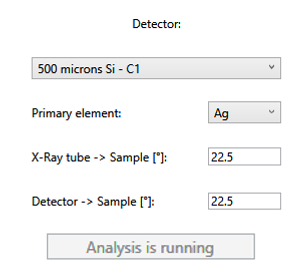
Pri prechode do časti softvéru kvantitatívna analýza má používateľ možnosť nastavenia parametrov pre docielenie čo najlepšej kvalitatívnej analýzy.

V tomto prípade má používateľ k dispozícií hneď niekoľko nastavení:

* Chart, histogram

  Description automatically generated“**Detector**”: Účinnosť vybraného detektora.
* “**Primary element**”: Informácie o vybranom chemickom prvku, ktorý predstavuje primárne žiarenie.
* “**X-Ray tube -> Sample [°]**”: Uhol medzi röntgenovou trubicou a skúmanou vzorkou.
* “**Detector -> Sample [°]**”: Uhol medzi detektorom a skúmanou vzorkou.

Po kliknutí na tlačidlo ” **Run Analysys**”, system zavola skripty pre vykonanie kvantitatívnej analýzy.

Systém indikuje aktuálne vykonávanie skriptu tak, že zablokuje tlačidlo „**Run Analysis**“ a premenuje ho na „**Analysis is running**“. Po dokončení analýzy sa opäť povolí tlačidlo a zmení sa jeho názov späť.

Keď systém získa zo skriptu výsledné dáta, tak tlačidlo vráti do pôvodného stavu a výsledky zobrazí v tabuľke nižšie.

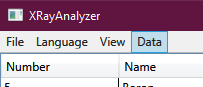
Chart, histogram

Description automatically generatedV tabuľke sa zobrazia jednotlivé prvky „**Element**“ a ich celkové zastúpenie vo vzorke „**Amount**“. Pri vynásobení výsledku 100 dostaneme celkové zastúpenie priamo v percentách.

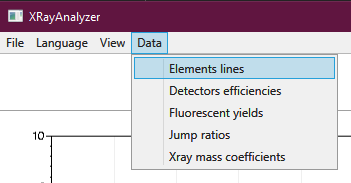
**Upozornenie:** Vykonanie analýzy nie je možné vrátiť späť. Po spustený analýzy system automaticky uloží výsledok. V prípade, že používateľ nie je spokojný s výsledkom, je potrebné znovu kliknúť znovu na tlačidlo “**Run analysis**”.

# Data

Sekcia „**Data**“ obsahuje tabuľky hodnôt jednotlivých, ktoré používa softvér pre spracovanie spektra a kvalitatívnu a kvantitatívnu analýzu.

Sekcia je dostupná v menu v ľavej hornej časti obrazovky ako „**Data**“. Menu obsahuje niekoľko ďalších menu položiek. Každá predstavuje samostatnú obrazovku s vlastným datasetom.

## Elements line

Používateľ prejde do tejto časti “**Elements line**” prostredníctvom „**Data**“ menu v ľavej hornej časti obrazovky.

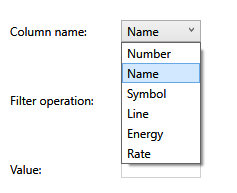
Pri prechode do časti softvéru „**Data**“, konkrétne „**Elements lines**“ má používateľ možnosť zobrazenia a filtrovania dát jednotlivých emisných čiar chemických prvkov.

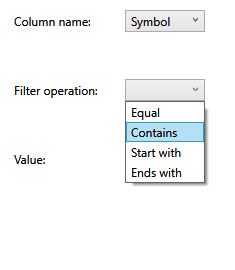
Systém hneď zobrazí všetky dostupné dáta v tabuľke. Pre šetrenie pamäte a redukovaní „Input lagu“, tabuľka implementuje virtualizáciu, takže v každom momente sú reálne v tabuľke načítané a zobrazené iba hodnoty, ktoré používateľ práve vidí.

Table

Description automatically generated

Používateľ má možnosť zobrazené dáta filtrovať podľa potreby. Konkrétne filter poskytuje nastavenia:

„**Column name**“: Výber stĺpca, podľa ktorého chce používateľ zobrazené dáta filtrovať. Na výber sú možnosti podľa jednotlivých stĺpcov zobrazených v tabuľke.

„**Filter operation**“: Operácia, ktorá sa má vykonať pri filtrovaní dát („**Equal**“ - rovné, „**Contains**“ - obsahuje, „**Star with**“ – začína na, „**Ends with**“ – končí na, „**Range**“ - rozsah).

Možnosť rozsah „**Range**“ je dostupná iba pre stĺpec obsahujúci číselné hodnoty.

Naopak možnosti obsahuje „**Contains**“, začína „**Start with**“ a končí „**Ends with**“ sú dostupné iba pre stĺpce s textovou hodnotou.

Graphical user interface, application

Description automatically generated„**Value**“: Samotná hodnota, podľa ktorej bude vybraný stĺpec filtrovaní s použitím vybranej operácie.

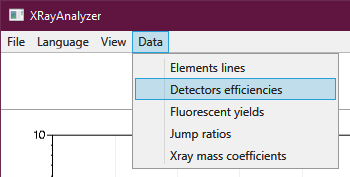
Graphical user interface, application

Description automatically generatedV prípade, že je zvolená operácia filtrovania „**Range**“, používateľ zadáva hodnoty od „**Value from**“ do „**Value to**“.

Graphical user interface

Description automatically generated with medium confidencePre aplikovanie filtra stačí kliknúť na tlačidlo „**Submit**“. Pre zrušenie filtrovania a zobrazenia všetkých dať stačí kliknúť na tlačidlo „**Reset**“.

## Detector efficiencies

 Používateľ prejde do tejto časti “**Detector efficiencies**” prostredníctvom „**Data**“ menu v ľavej hornej časti obrazovky.

Pri prechode do časti softvéru „**Data**“, konkrétne „**Detector efficiencies**“ má používateľ možnosť zobrazenia a filtrovania dát jednotlivých detektorov a ich učínností.

Systém hneď zobrazí všetky dostupné dáta v tabuľke. Pre šetrenie pamäte a redukovaní „Input lagu“, tabuľka implementuje virtualizáciu, takže v každom momente sú reálne v tabuľke načítané a zobrazené iba hodnoty, ktoré používateľ práve vidí.

Table

Description automatically generated

Používateľ má možnosť zobrazené dáta filtrovať podľa potreby. Konkrétne filter poskytuje nastavenia:

Graphical user interface, application

Description automatically generated„**Column name**“: Výber stĺpca, podľa ktorého chce používateľ zobrazené dáta filtrovať. Na výber sú možnosti podľa jednotlivých stĺpcov zobrazených v tabuľke.

Graphical user interface, application

Description automatically generated„**Filter operation**“: Operácia, ktorá sa má vykonať pri filtrovaní dát („**Equal**“ - rovné, „**Contains**“ - obsahuje, „**Star with**“ – začína na, „**Ends with**“ – končí na, „**Range**“ - rozsah).

Možnosť rozsah „**Range**“ je dostupná iba pre stĺpec obsahujúci číselné hodnoty.

Naopak možnosti obsahuje „**Contains**“, začína „**Start with**“ a končí „**Ends with**“ sú dostupné iba pre stĺpce s textovou hodnotou.

Graphical user interface, application

Description automatically generated„**Value**“: Samotná hodnota, podľa ktorej bude vybraný stĺpec filtrovaní s použitím vybranej operácie.

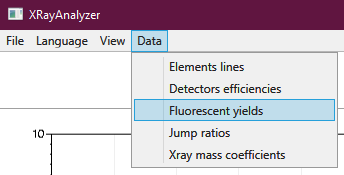
Graphical user interface, application

Description automatically generatedV prípade, že je zvolená operácia filtrovania „**Range**“, používateľ zadáva hodnoty od „**Value from**“ do „**Value to**“.

Graphical user interface

Description automatically generated with medium confidencePre aplikovanie filtra stačí kliknúť na tlačidlo „**Submit**“. Pre zrušenie filtrovania a zobrazenia všetkých dať stačí kliknúť na tlačidlo „**Reset**“.

## Fluorescent yields

 Používateľ prejde do tejto časti “**Fluorescent yields**” prostredníctvom „**Data**“ menu v ľavej hornej časti obrazovky.

Pri prechode do časti softvéru „**Data**“, konkrétne „**Fluorescent yields**“ má používateľ možnosť zobrazenia a filtrovania dát fluorescenčných výťažkov jednotlivých prvkov prvkov.

Systém hneď zobrazí všetky dostupné dáta v tabuľke. Pre šetrenie pamäte a redukovaní „Input lagu“, tabuľka implementuje virtualizáciu, takže v každom momente sú reálne v tabuľke načítané a zobrazené iba hodnoty, ktoré používateľ práve vidí.

Table

Description automatically generated

Používateľ má možnosť zobrazené dáta filtrovať podľa potreby. Konkrétne filter poskytuje nastavenia:

Graphical user interface, application

Description automatically generated„**Column name**“: Výber stĺpca, podľa ktorého chce používateľ zobrazené dáta filtrovať. Na výber sú možnosti podľa jednotlivých stĺpcov zobrazených v tabuľke.

Graphical user interface, application

Description automatically generated„**Filter operation**“: Operácia, ktorá sa má vykonať pri filtrovaní dát („**Equal**“ - rovné, „**Contains**“ - obsahuje, „**Star with**“ – začína na, „**Ends with**“ – končí na, „**Range**“ - rozsah).

Možnosť rozsah „**Range**“ je dostupná iba pre stĺpec obsahujúci číselné hodnoty.

Naopak možnosti obsahuje „**Contains**“, začína „**Start with**“ a končí „**Ends with**“ sú dostupné iba pre stĺpce s textovou hodnotou.

Graphical user interface, application

Description automatically generated„**Value**“: Samotná hodnota, podľa ktorej bude vybraný stĺpec filtrovaní s použitím vybranej operácie.

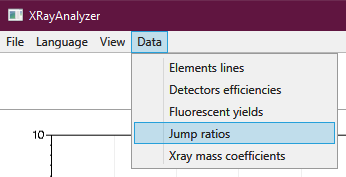
Graphical user interface, application

Description automatically generatedV prípade, že je zvolená operácia filtrovania „**Range**“, používateľ zadáva hodnoty od „**Value from**“ do „**Value to**“.

Graphical user interface

Description automatically generated with medium confidencePre aplikovanie filtra stačí kliknúť na tlačidlo „**Submit**“. Pre zrušenie filtrovania a zobrazenia všetkých dať stačí kliknúť na tlačidlo „**Reset**“.

## Jump ratios

 Používateľ prejde do tejto časti “**Jump ratios**” prostredníctvom „**Data**“ menu v ľavej hornej časti obrazovky.

Pri prechode do časti softvéru „**Data**“, konkrétne „**Jump ratios**“ má používateľ možnosť zobrazenia a filtrovania dát jednotlivých hrán emisných čiar chemických prvkov.

Systém hneď zobrazí všetky dostupné dáta v tabuľke. Pre šetrenie pamäte a redukovaní „Input lagu“, tabuľka implementuje virtualizáciu, takže v každom momente sú reálne v tabuľke načítané a zobrazené iba hodnoty, ktoré používateľ práve vidí.

Table

Description automatically generated

Používateľ má možnosť zobrazené dáta filtrovať podľa potreby. Konkrétne filter poskytuje nastavenia:

Graphical user interface, application

Description automatically generated„**Column name**“: Výber stĺpca, podľa ktorého chce používateľ zobrazené dáta filtrovať. Na výber sú možnosti podľa jednotlivých stĺpcov zobrazených v tabuľke.

Graphical user interface, application

Description automatically generated„**Filter operation**“: Operácia, ktorá sa má vykonať pri filtrovaní dát („**Equal**“ - rovné, „**Contains**“ - obsahuje, „**Star with**“ – začína na, „**Ends with**“ – končí na, „**Range**“ - rozsah).

Možnosť rozsah „**Range**“ je dostupná iba pre stĺpec obsahujúci číselné hodnoty.

Naopak možnosti obsahuje „**Contains**“, začína „**Start with**“ a končí „**Ends with**“ sú dostupné iba pre stĺpce s textovou hodnotou.

Graphical user interface, application

Description automatically generated„**Value**“: Samotná hodnota, podľa ktorej bude vybraný stĺpec filtrovaní s použitím vybranej operácie.

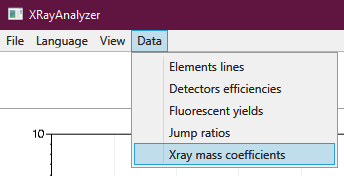
Graphical user interface, application

Description automatically generatedV prípade, že je zvolená operácia filtrovania „**Range**“, používateľ zadáva hodnoty od „**Value from**“ do „**Value to**“.

Graphical user interface

Description automatically generated with medium confidencePre aplikovanie filtra stačí kliknúť na tlačidlo „**Submit**“. Pre zrušenie filtrovania a zobrazenia všetkých dať stačí kliknúť na tlačidlo „**Reset**“.

## Xray mass coefficients

 Používateľ prejde do tejto časti “**Xray mass coefficients**” prostredníctvom „**Data**“ menu v ľavej hornej časti obrazovky.

Pri prechode do časti softvéru „**Data**“, konkrétne „**Xray mass coefficients**“ má používateľ možnosť zobrazenia a filtrovania dát hmotnostných súčiniteľov zoslabenia jednotlivých chemických prvkov.

Systém hneď zobrazí všetky dostupné dáta v tabuľke. Pre šetrenie pamäte a redukovaní „Input lagu“, tabuľka implementuje virtualizáciu, takže v každom momente sú reálne v tabuľke načítané a zobrazené iba hodnoty, ktoré používateľ práve vidí.

Table

Description automatically generated

Používateľ má možnosť zobrazené dáta filtrovať podľa potreby. Konkrétne filter poskytuje nastavenia:

Graphical user interface, application

Description automatically generated„**Column name**“: Výber stĺpca, podľa ktorého chce používateľ zobrazené dáta filtrovať. Na výber sú možnosti podľa jednotlivých stĺpcov zobrazených v tabuľke.

Graphical user interface, application

Description automatically generated„**Filter operation**“: Operácia, ktorá sa má vykonať pri filtrovaní dát („**Equal**“ - rovné, „**Contains**“ - obsahuje, „**Star with**“ – začína na, „**Ends with**“ – končí na, „**Range**“ - rozsah).

Možnosť rozsah „**Range**“ je dostupná iba pre stĺpec obsahujúci číselné hodnoty.

Naopak možnosti obsahuje „**Contains**“, začína „**Start with**“ a končí „**Ends with**“ sú dostupné iba pre stĺpce s textovou hodnotou.

Graphical user interface, application

Description automatically generated„**Value**“: Samotná hodnota, podľa ktorej bude vybraný stĺpec filtrovaní s použitím vybranej operácie.

Graphical user interface, application

Description automatically generatedV prípade, že je zvolená operácia filtrovania „**Range**“, používateľ zadáva hodnoty od „**Value from**“ do „**Value to**“.

Graphical user interface

Description automatically generated with medium confidencePre aplikovanie filtra stačí kliknúť na tlačidlo „**Submit**“. Pre zrušenie filtrovania a zobrazenia všetkých dať stačí kliknúť na tlačidlo „**Reset**“.