OES

Inhaltsverzeichnis

Versionsverwaltung

# Allgemeine Informationen

OES: optical emission spectroscopy

Spektraler Übergang bezeichnet die Wellenlänge λ, welche nach Anregung von Molekülen beim Fall in den stabilen Zustand emittiert wird. Also lässt die Auswertung aller Peaks eines Spektrogramms Rückschlüsse auf das Gasgemisch der verschiedenen Moleküle zu.

Da eine Auswertung der absoluten aufgenommenen Werte nicht sinnvoll/möglich ist, wird ein Referenzpeak (Wasserstoff/Methan) genutzt, um eine Konzentration eines anderen Moleküls zu bestimmen.

Einstieg in die aktuelle Version der Python über die Datei: oes-spa.py

## Schematische Darstellung der Software

Andor Software

Steuert Spektrometer nimmt indirekt Spektren auf (oes)

Mittels Parameter konfigurierbar bzw. Spektren einstellbar

Spexhex

In VB programmiert

Auswertung der Stickstoff Spektren

Spezial-Software, da nur bestimmte Parameter eingestellt werden können und nur Stickstoff ausgewertet werden kann

Daten/Spektren

Parameter

Oes-spectra-analysis

Python Programmierung

Auswertung der Bor Spektren

Erweiterung der Möglichkeiten von Spexhex um Bor-Auswertung

Andor Messgerät

Parametereinstellung der Messung

Durchführung der Spektroskopie

Daten/Spektren

Parameter

Daten

Spektren

Dateisystem

## Bisherige Nutzung

1. Spexhex
   1. Aufnahme der Spektren
      1. Wellenlängenkalibrierung
      2. Speicherung in .spk-Datei
      3. Pixel zu Intensität
      4. Pixel zu Messgeräte-Wellenlänge
      5. Pixel zu korrigierter Wellenlänge
      6. Außerdem: Speicherung mit allen Kennwerten in .sif-Datei
   2. Auswertung der Spektren
   3. Erstellung einer .dat-Datei
      1. Zeitpunkt der Spektrumsaufnahme
      2. Kennwert des Spektrums (z.B. CN-Wert)
      3. Wissenschaftliche Analyse erfolgt anhand der .dat-Datei
      4. Darstellung der Kennwerte über die Zeit
2. OES-Analysis (Python-Software)
   1. Untersuchung des Bor-Peaks
   2. Erstellung einer .dat-Datei (s.o.)

## Derzeitige Nutzer

* Peter Knittel
* Philipp Reinke
* Christoph Schreyvogel
* Julia Langer
* Arne Götze
* Volker Cimalla

# Lastenheft (LH)

Keine Abwärtskompatibilität gefordert (Knittel, 27.01.20)

* Primäre Parameter
  + Wellenlänge
  + Grating
  + Step and Glue
  + Port (zukünftig: 1/2/1 u. 2)
  + Shutter (zukünftig)
* Sekundäre Parameter
  + Belichtungszeit (Exposure time)
  + Anzahl der Akkumulierungen
  + Readout Mode (default: FVB)
  + Vertical/horizontal Pixel Shift (default values)

## Use-Cases

### Paramterierung

* Speicherort?
* Dateiformat?
  + .ini
  + .json
  + .yml

### Messgerätesteuerung

* Unterschiedliche Andor Messgeräte mit verschiedenen Parametersätzen (Anzahl der möglichen Optionen für einen Parameter), z.B. verfügbare Gitter/Ports
* Zugriff nur über Remote-PC möglich, da das Messgerät keine direkte Netzwerkverbindung hat und Datenaustausch nur über USB-Kabel möglich ist

1. Einstellen von Parametern
   1. Auslesen der aktuell eingestellten Parameter
   2. Auslesen des Parametersatzes
   3. Bereitstellen eines Interfaces zum Einstellen möglicher Optionen
   4. Schreiben der Parameter
   5. Standard-Konfiguration(.conf-Datei?)
   6. Primäre und sekundäre Parameter (s.o.)
   7.  Lese-/Schreibzugriff
2. Ausführen der Spektroskopie
   1. Anzahl/Wiederholrate/Modus (Stick and Glue) /Dauer einstellen
   2. Messung triggern
   3. Messergebnisse speichern/bereitstellen
      1. Dateiformat
      2. Definition der Dateistruktur
      3. Festlegung des Speicherpfades
   4. Machbarkeitsstudie zu Programmierung der Andor Software (Schritt 1)
   5. Übertragung in Analysesoftware (Schritt 2)

### Auswertung/Analyse

1. Auswerten von Peaks
   1. Einstellen des Peaks (N, Bor, P, MH4)
   2. Laden des charakteristischen Spektrums des Peaks
      1. Definierter Speicherort?
   3. Faltung des aufgenommenen und des Referenzspektrums zur Kalibrierung
   4. Berechnung von Kennwerten (z.B. CN-Wert) und Ausgabe
      1. Welche Kennwerte können berechnet werden
         1. Dargestelltes Spektrum hat minimale und maximale Wellenlänge
            1. Peak und Referenzpeaks müssen in dem Bereich liegen, um diese auch analysieren zu können.
            2. Speicherung der Peak/Referenzpeaks und deren Grenzen (in Abhängigkeit eines SNR?)
         2. Abhängig vom Fitting
            1. Boron Fitting hat andere Kennwerte als normales Spektrum, da auch in anderem Wellenlängenbereich analysiert wird
      2. Welche Kennwerte sollen berechnet werden
         1. Verhältnis des zu untersuchenden Peaks zu 1 oder mehreren anderen Referenzpeaks
      3. Wo wird das festgelegt (gleiche Datei/Speicherort wie bei charakteristischen Spektrum
   5. Berechnung des SNR zur Bestimmung der Nutzbarkeit des Spektrums
2. Darstellung von Spektren
   1. Rohes Spektrum (Raw Spectrum)
      1. X-Achse: Pixel (in Abhängigkeit des Gratings)
      2. Y-Achse: Intensität
      3. Berechnen und Einfügen einer Basislinie (Baseline)
   2. Bearbeitetes Spektrum (Processed Spectrum)
      1. X-Achse: Wellenlänge (in Abhängigkeit der zentralen Wellenlänge (Central Wavelength))
      2. Y-Achse: Intensität
   3. Laden von Dateien
      1. Per Browsen
      2. Per Drag&Drop
      3. Anzeige des Speicherpfades
      4. Dateiformate
         1. Spk
         2. Csv (gespeichertes Spektrum; csv zu Unterschied zu Raw Spektrum)
         3. Binary file von der Andor SW (sekundär)
   4. Interaktives Design
      1. Zoom
      2. Einstellen der Achsen
      3. Speichern
         1. Raw\_/processed\_spektrum
            1. Als .csv-Datei, damit der Unterschied zu aufgenommenem Spektrum (.spk) ersichtlich ist
            2. Auswahl des Speicherortes
            3. Dateiname wird aus Datei+appendix+.csv erstellt
            4. Raw\_spectrum ggf. ein \_raw dem Dateinamen anhängen
            5. Processed\_spectrum ggf. ein \_processed dem Dateinamen anhängen
            6. Speicherung über das Menü
            7. Ggf. auch im Menü der Batch-Analysis
            8. Gespeichert wird:

X-Daten

Y-Daten

Aufnahmedatum+Zeit

Processed außerdem:

Central Wavelength

Grating

Auswertmethode

Peak height

Ratio

Area

* + - 1. Innerhalb der BatchAnalysis
         1. Angabe oder Auswahl einer .csv-Datei
         2. Auswählen von .spk/.csv-Dateien
         3. Auswahl der zu speichernden Kennwerte
         4. Berechnen und Speichern der Kennwerte über „Calculate“
         5. Clear  Löschung der Auswahl
         6. Anzeige von:

Index: Auch zum Durchlaufen der Dateien

Start bei 0 oder 1 muss definiert sein, ist aber nicht festgelegt

Fortschrittsbalken, bei Calculate Berechnung

Aktuell ausgewählte Datei

Leer, wenn andere Datei außerhalb der Batchanalysis geladen wurde

### Export/Import von Spektren

* Export
  + Speicherung als csv-Datei
  + Speicherung mit Zeitstempel im gleichen Format wie eine spk-Datei
  + Speicherung der physikalischen Größe und Einheit
  + Marker zum Festlegen, ab wann Messdaten beginnen (min. aber die dritte Zeile, da spk-Dateien 3 Zeilen inkl. Header haben  Wiederverwenden der Routine)
* Mögliche Probleme
  + Speichern von Kennwerten in berechneten Spektren  Müsste über Marker behoben werden können
  + Unterschiedliche Spalten bei unterschiedlichen Dateiformaten (Anzahl der Count in 2 bzw. 4 Spalte…)
* Aufbau der Dateien
  + Csv
    - Header
    - Physikalische Größe + Einheit (2 Spalten)
    - Datenmarker
    - Daten (2 Spalten)
  + Spk
    - Header
    - Physikalische Größe (4 Spalten)
    - Einheit (4 Spalten)
    - Daten (4 Spalten)
  + Asc
    - Mehrere Eigenschaften + Wert (undefinierte Anzahl an Spalten)
    - Leerzeilen
    - Daten (2 Spalten)
  + Dat
    - Daten (2 Spalten)

### Konfigurationsdateien für Peak-Fittings

Siehe für ein Beispiel ./fittings/boron\_fitting.yml

* Routine
  + In Ordner nach\*fitting.yml suchen
  + Für jede Datei
    - Name auswerten und in Dropdown anzeigen
    - Dict erzeugen mit {Fitting: filenmae}
  + Bei Auswertung überprüfen laden und zur Auswertung nutzen

## Gesprächsprotokolle

### 28.02.2020: P. Knittel, H. Wernecke

Bezeichnung von Anzeigeelementen nach dem Schema Typ+Bezeichnung

* Abkürzungen für Typ:
  + btn  button
  + cb  checkbox
  + list  list
  + tin  text input
  + tout  text output
  + act  action
  + menu  menu
  + fout  file output
  + dd  dropdown

User Interface der BatchAnalysis

* Verhalten:
  + Setzen eines Dateinamens (Schaltfläche „Set Filename“)
    - Nur möglich über Schaltfläche
    - Nicht möglich über die Eingabe in ein Feld, z.B. Anzeigefeld
    - Öffnen des Dialogs mit Standardname („\_batch.csv“)
    - Anzeige nur von .csv-Dateien
    - Kein Erstellen der Datei. Das wird ggf. bei Calculate gemacht.
  + Auswählen von Dateien (Schaltfläche „Browse Files“)
    - .csv/.spk-Dateien sind auswählbar
    - Auswahl der ersten Datei zur Anzeige der Daten
  + Berechnen von Kennwerten (Schaltfläche „Calculate“)
    - Nur enabled, wenn …
      * .. Speicherort festgelegt ist
      * .. Dateien ausgewählt sind
      * .. min. 1 Parameter gesetzt ist
    - ggf. Datei erzeugen
    - Berechnen der Kennwerte jeder Datei und schreiben in eine .csv-Datei
  + Löschen der Dateien (Schaltfläche „Clear“)
    - Leert die Liste der Dateien
    - Entsprechend disablen von „Calculate“

Testfälle:

* Set Filename
  + Eintrag mit .csv-Endung  bleibt .csv-Endung
  + Eintrag ohne Endung  .csv-Endung ergänzen
  + Eintrag mit beliebiger Endung  ändern in .csv-Endung
* Browse Files
  + \_raw.csv  OK
  + .spk  OK
  + .(sif)/.asc  noch nicht ok (niedrige Priorität)
  + \_processed.csv  nicht OK
  + Andere .csv  nicht OK
  + Andere Formate  nicht OK
* Calculate
  + Prüfen, ob ...
    - … alle Dateien ausgewertet wurden
    - … in die Datei geschrieben wurde
    - … alle Parameter berechnet wurden
    - … verfügbar ist
  + Auswahl an Parametern  OK
  + Alle Parameter  OK
* Clear
  + Keine Dateien  OK
  + Dateien  OK
  + Erwartetes Verhalten: Liste leeren, Calculate nicht verfügbar

Optionen:

* Index für Listenelemente einfügen (niedrige Prio), anschließend Disp-Elemente entfernen
* Dateinamen in Liste mit nur einem übergeordneten Ordner anzeigen
* Berechnung über Calculate in einem Thread starten (niedrige Prio)
* Anzeige der aktuell ausgewählten Datei im Berechnungsprozess (Auswählbar über eine Checkbox) (niedrige Prio)
* Hinzufügen/Entfernen von Parameter: Hier insbesondere hinzufügen einer Fitting-Checkbox, damit der Kennwert entsprechend ausgewertet wird.

Weiteres:

* Entfernen des verticalSpacers, mit setzten einer festen Höhe für Parameter
* progressBar immer enabled/sichtbar: Egal
* verschieben der Schaltfläche „Calculate“ neben die progressBar
* Löschen der Redraw-Schaltfläche
* -Löschen des Parameters PeakHeight

# Programmcode von oes-spa.py

(Unstrukturierte Dokumentation)

* openFile
  + AnalysisWindow
    - \_\_init\_\_
      * leer initialisiert W
    - dropEvent
      * Dropped File W
      * getValues R
      * getHead R
    - file\_open
      * opened File W
      * getValues R
      * getHead R
  + BatchAnalysis
    - multi\_calc
      * selected File W
      * getValues R
      * getHead R

## Name Convention

### Klassen

* Jede Klasse ist in einer eigenen Datei definiert
* Datei und Klasse haben den gleichen Namen
* Methoden-Bezeichnungen
  + camelCase, wenn die Methode vom Qt-Backend erkennt werden muss, z.B. Events wie dragEnterEvent
  + snakeCase, wenn die Methode unabhängig com Qt-Backend ist, z.B. file\_open

### GUI

* btn  Buttons
* Für Gruppen von Elementen wird PascalCase verwendet. Z.B. BtnParameters ist eine Gruppe von Elementen (in diesem Fall Buttons). Achtung: Allerdings können auch Elemente mit Disp beginnen, die der Gruppe Display zugeordnet sind. Also kann die Gruppe entweder den Zweck oder die Form bezeichnen.

## Programmpfade

### Laden von Dateien

Zugriff auf Systemdateien über QFileDialog.getOpenFile bzw. über .getOpenFiles zum Laden einer oder mehrerer Dateien (Doku: <https://doc.qt.io/qt-5/qfiledialog.html>).

Mögliche Dateiformate

* .csv
* .spk
* Bindary Dateien von Andor (sekundär, nicht implementiert)

Menüleiste: File  Open

* keine Datei ausgewählt /Abbruch  keine Aktion
* eine Datei ausgewählt  Anzeige der Daten
* mehrere Dateien ausgewählt  BatchAnalysis & Anzeige der Daten aus erster Datei

Drag&Drop:

* Drag
  + eine Datei ausgewählt  event.accept()
  + mehrere Dateien ausgewählt  BatchAnalysis
* Drop
  + eine Datei ausgewählt  Anzeige der Daten
  + mehrere Dateien ausgewählt  Anzeige der Daten aus erster Datei

BatchAnalysis: Browse Files

* keine Datei ausgewählt /Abbruch  keine Aktion
* eine oder mehrere Dateien ausgewählt  Anzeige der Daten aus erster Datei

# Weitere Beschreibungen und Abhängigkeiten

## Hilfreiche Befehle

* Herausfinden der aktuell verwendeten Python Version
  + Öffnen der Anaconda Prompt
  + Eingeben: python –V
* Ändern der GUI
  + ACHTUNG: Funktioniert nicht mit der Anaconda Power shell!!!!
  + Öffnen der Anaconda Prompt
  + Eingeben: designer
  + Öffnen einer GUI
  + Änderungen vornehmen und Speichern
  + Zurück in der Anaconda Prompt
  + pyuic5 batch\_dialog.ui > ui\_batch\_dialog.py
    - pyuic5 macht aus einem .ui-file ein entsprechendes .py-file
    - das .py-file kann dann eingebunden und verwendet werden
    - Achtung: Überschreibt alle Änderungen, die in der Zwischenzeit in dem .py-file gemacht wurden (hier: ui\_batch\_dialog.py)
    - Abhilfe: Erstellen einer Klasse in UIBatch.py, um Änderungen zu akzeptieren und eigene Änderungen beizubehalten.

## Central Wavelength

* Parametereinstellung in der Andor SW bei der Aufnahme eines Spektrums
* Unabhängig vom Fitting/Grating
* Soll als Parameter mit in die Spk Dateien aufgenommen werden
* Derzeit: Triggered ein Redraw bei Änderung+Enter
* Weitere Verwendung:
  + Auslesen der central Wavelength
    - Berechnen der minimalen und maximalen Wellenlänge in Abhängigkeit des Gratings
      * Mögliche Fittings auswählen, wenn die gesuchten und die zu referenzierenden Peaks innerhalb der berechneten Wellenlängen vorhanden sind