

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
КРИВОРІЗЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ ПЕДАГОГІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ
КАФЕДРА ФІЗИКИ ТА МЕТОДИКИ ЇЇ НАВЧАННЯ**

«Допущено до захисту»

Завідувач кафедри

(підпис) (прізвище, ініціали)

«__» _____ 20__ р.

Реєстраційний № _____

«__» _____ 20__ р.

**МЕТОДИЧНІ ОСОБЛИВОСТІ АНАЛІЗУ Й ОБРОБКИ
ЕНЕРГЕТИЧНИХ СПЕКТРІВ ЗАСОБАМИ СИСТЕМ
КОМП'ЮТЕРНОЇ МАТЕМАТИКИ**

Кваліфікаційна робота студента групи ФМм-22
ступінь вищої освіти магістр

Спеціальності 014.08 Середня освіта (Фізика)

Чумака Олександра Олександровича

Керівник:

кандидат педагогічних наук, доцент, завідувач
кафедри фізики та методики її навчання

Слюсаренко Микола Анатолійович

Оцінка:

Національна шкала _____

Шкала ECTS __ Кількість балів __

Голова ЕК _____

(підпис) (прізвище, ініціали)

Члени ЕК _____

(підпис) (прізвище, ініціали)

(підпис) (прізвище, ініціали)

(підпис) (прізвище, ініціали)

(підпис) (прізвище, ініціали)

ЗАПЕВНЕННЯ

Я, Чумак Олександр Олександрович, розумію і підтримую політику Криворізького державного педагогічного університету з академічної доброчесності. Запевняю, що ця кваліфікаційна робота виконана самостійно, не містить академічного плагіату, фабрикації, фальсифікації. Я не надавав і не одержував недозволену допомогу під час підготовки цієї роботи. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають покликання на відповідне джерело.

Із чинним Положенням про запобігання та виявлення академічного плагіату в роботах здобувачів вищої освіти Криворізького державного педагогічного університету ознайомлений. Чітко усвідомлюю, що в разі виявлення у кваліфікаційній роботі порушення академічної доброчесності робота не допускається до захисту або оцінюється незадовільно.

ЗМІСТ

ВСТУП.....	4
РОЗДІЛ 1. ТЕОРЕТИЧНІ ОСНОВИ АНАЛІЗУ І ОБРОБКИ ЕНЕРГЕТИЧНИХ СПЕКТРІВ.....	7
1.1 ОСНОВНІ ПОНЯТТЯ ЕНЕРГЕТИЧНИХ СПЕКТРІВ	7
1.2 МЕТОДИ ЗБОРУ І ОБРОБКИ ДАНИХ	10
1.3 МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ ДЛЯ АНАЛІЗУ ЕНЕРГЕТИЧНИХ СПЕКТРІВ.....	15
Висновок до розділу 1	19
РОЗДІЛ 2. ЗАСОБИ І МЕТОДИ КОМП'ЮТЕРНОЇ МАТЕМАТИКИ ДЛЯ АНАЛІЗУ ЕНЕРГЕТИЧНИХ СПЕКТРІВ.....	20
2.1 ВИБІР ПРОГРАМНИХ ІНСТРУМЕНТІВ ДЛЯ АНАЛІЗУ СПЕКТРАЛЬНИХ ДАНИХ ...	20
2.2 МЕТОДИ ОБРОБКИ І ФІЛЬТРАЦІЇ СПЕКТРАЛЬНИХ ДАНИХ В ORIGIN.....	24
Висновок до розділу 2	26
РОЗДІЛ 3 ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ТА ВИКОРИСТАННЯ МЕТОДІВ АНАЛІЗУ ЕНЕРГЕТИЧНИХ СПЕКТРІВ В НАВЧАЛЬНОМУ ПРОЦЕСІ	27
3.1 ІМПОРТУВАННЯ ДАНИХ ПРИ ОБРОБЦІ РЕЗУЛЬТАТІВ СПЕКТРАЛЬНОГО АНАЛІЗУ	27
3.2 ВІДОБРАЖЕННЯ ДАНИХ ЗАДАНИХ ЗА ДОПОМОГОЮ КООРДИНАТ ТОЧОК.....	27
3.3 ЗСУВ ОДНОТИПНИХ ГРАФІКІВ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ СПЕКТРІВ	42
3.4 КОРЕКТУВАННЯ СПЕКТРІВ КОМБІНАЦІЙНОГО РОЗСІЯННЯ.....	45
3.5 ПРОСТІ ОПЕРАЦІЇ ІЗ СПЕКТРАМИ	46
3.6 ЗГЛАДЖУВАННЯ СПЕКТРІВ З МЕТОЮ УСУНЕННЯ ШУМУ	54
3.7 АПРОКСИМАЦІЯ СПЕКТРІВ ЛОРЕНЦІАНАМИ	58
Висновки до розділу 3	70
ВИСНОВКИ	72
СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ.....	73

ВСТУП

Розвиток нових технологій та інструментів для вимірювання та аналізу різних фізичних величин, зокрема спектрів створює нові можливості для досліджень у різних галузях. Розуміння методів обробки спектральних даних є важливим для використання цих технологій в реальних дослідженнях та промисловості. В останні десятиліття спостерігається стрімкий розвиток обчислювальної технології та математичних методів, що відкривають нові можливості для аналізу та обробки спектральних даних. Розуміння цих методів є критично важливим для сучасних науковців та фахівців у галузі фізики [1-15].

Фізика відіграє ключову роль в розвитку нових технологій, таких як лазерна техніка, оптоелектроніка, медична діагностика та багато інших. Для розробки та вдосконалення цих технологій необхідний глибокий аналіз та розуміння, інтерпретація результатів, як приклад читання енергетичних спектрів. Аналіз спектральних даних є ключовим елементом досліджень в області матеріалознавства, аналітичної хімії та фізичної хімії. Велика кількість нових матеріалів і сполук вимагає глибокого розуміння їхнього спектрального характеру.

Учитель фізики повинен мати глибокі знання і практичні навички у сфері аналізу спектральних даних, оскільки це стає все більш важливим елементом навчання. Освічені вчителі зможуть краще передавати це знання своїм учням [16-18]. У галузях, таких як астрофізика і нанотехнології, аналіз спектральних даних є важливим для вивчення властивостей космічних об'єктів та розвитку нових матеріалів і технологій. Знання методів аналізу та обробки спектрів може мати практичний вигляд у промисловості, включаючи якість контролю, медичну діагностику, виробництво та інші галузі, де важлива точна обробка даних.

З вище сказаного зрозумілою є актуальність магістерської роботи для майбутнього вчителя фізики. Так як магістерська робота має безпосереднє відношення до сучасних вимог та можливостей в галузі науки і освіти.

З урахуванням цих аспектів, магістерська робота з аналізу спектральних даних та застосування комп'ютерної математики є **актуальною** та важливою для підготовки майбутніх вчителів фізики та їхньої участі в розвитку сучасної науки та технологій.

Мета магістерської роботи полягає в розвитку глибокого розуміння методів аналізу та обробки енергетичних спектрів засобами комп'ютерної

математики, розробці практичних навичок, а також підготовці до подальших наукових та освітніх завдань.

Завдання дослідження:

- Провести докладний огляд наукових робіт і літератури в галузі аналізу та обробки енергетичних спектрів, зосередившись на методах, технологіях та програмних засобах, які використовуються у сучасних дослідженнях.
- Дослідити різні методи аналізу енергетичних спектрів, включаючи фур'є-аналіз, спектроскопію, амплітудні та фазові характеристики, ідентифікацію спектральних ліній тощо.
- Вивчити методи підготовки спектральних даних, включаючи згладжування, видалення шуму, калібрування тощо.
- Ознайомитися з програмними засобами та інструментами, які використовуються для аналізу та обробки енергетичних спектрів.
- Використовуючи отримані дані, провести їхню обробку та моделювання за допомогою обраного програмного забезпечення та методів аналізу.
- На основі отриманих результатів розробити методичні рекомендації щодо використання обраного методу аналізу спектрів у конкретних наукових або практичних завданнях.

Предмет дослідження: методи та технології, які використовуються для аналізу і обробки енергетичних спектрів.

Об'єкт дослідження: енергетичні спектри, які аналізуються та обробляються за допомогою обраного програмного забезпечення та методів комп'ютерної математики.

Практичне значення результатів дослідження для майбутнього вчителя фізики може бути досить значущим і вплинути його педагогічну роботу.

Знання методів аналізу та обробки енергетичних спектрів дозволить більш глибоке розуміння фізичних концепцій, пов'язаних із спектроскопією та аналізом спектрів. Використовувати практичні приклади та демонстрації на уроках для ілюстрації того, як аналіз спектрів застосовується в реальному житті. Це може зробити уроки більш цікавими та зрозумілими для учнів. Навчити на факультативних заняттях своїх учнів використовувати сучасні інструменти та програмне забезпечення для аналізу спектрів, що може підготувати їх для подальших досліджень або роботи в галузях, де важливий аналіз спектрів.

Знання методів аналізу спектрів може бути корисним для учнів, які бажають брати участь у фізичних олімпіадах та конкурсах. Знання методів аналізу спектрів дозволить створити індивідуальний підхід до навчання учнів

і надавати додаткову підтримку тим, хто цього потребує. Фізика може стати більш привабливою для учнів, які бачать практичне застосування фізичних знань та методів аналізу в реальних дослідженнях та технологіях.

Загалом, результати дослідження можуть збагатити педагогічну практику, допомогти створити цікавий та ефективний навчальний процес в позаурочний час та підготувати учнів до подальших викликів у галузі фізики та наукових досліджень.

РОЗДІЛ 1. ТЕОРЕТИЧНІ ОСНОВИ АНАЛІЗУ І ОБРОБКИ ЕНЕРГЕТИЧНИХ СПЕКТРІВ

1.1. Основні поняття енергетичних спектрів

Енергетичні спектри в фізиці та інших галузях науки вказують на розподіл енергії чи інтенсивності сигналу у відношенні до їхніх енергетичних значень або частот. Спектральна характеристика (спектр), це графічне представлення залежності енергії, інтенсивності або інших параметрів сигналу від їхніх енергетичних значень, частоти, довжини хвилі або іншої відповідної змінної. Спектральна характеристика енергетичного спектра визначає, як розподілена енергія (або інтенсивність) на різних енергетичних рівнях чи частотах. Така характеристика дозволяє аналізувати і описувати, які складові системи (частоти, енергетичні рівні) мають якусь значущість у спектрі.

Основні аспекти спектральної характеристики енергетичного спектра включають:

- Піки спектра – це окремі виражені високі точки на графіку спектра, які відповідають певним енергетичним рівням чи частотам. Піки можуть бути використані для визначення характерних значень в системі або джерелі енергії.
- Ширина піку вказує на діапазон частот чи енергетичних значень, який охоплює пік. Вузькі піки вказують на малий діапазон енергетичних значень, тоді як широкі піки охоплюють більший діапазон.
- Інтенсивність або амплітуда піка визначається висотою або величиною піка і показує, наскільки інтенсивний (сильний) даний енергетичний рівень чи частота.
- Розподіл інтенсивності показує, як інтенсивність розподіляється вздовж всього спектра. Наприклад, чи є певні діапазони частот або енергетичних значень більш інтенсивними, ніж інші.
- Форма спектра вказує на загальний вигляд спектра, наприклад, чи є він гладким або має виражені піки і ярко виражені резонанси.

Спектральна характеристика є важливим інструментом для аналізу сигналів і систем в різних галузях науки та техніки. Вона допомагає розуміти склад системи, виявляти характерні частоти та енергетичні рівні, і використовується для розв'язання різноманітних завдань, включаючи

спектроскопію, аналіз сигналів, обробку зображень та інші дослідження та додатки.

Наведемо основні поняття та характеристики частотного спектра.

- ✓ Частота – це головна змінна, за якою розподіляється інтенсивність в спектрі. Частота вимірюється у герцах (Гц) і вказує, скільки коливань відбувається за одну секунду.
- ✓ Амплітуда частотного спектра – величина, яка показує інтенсивність (силу) кожної частоти в спектрі. Вона визначає, наскільки сильним є сигнал на кожній частоті.
- ✓ Частотні компоненти – це окремі частоти, які відзначаються в спектрі і мають визначену амплітуду. Кожна частотна компонента може відповідати певному явищу, складовій сигналу або характеристиці системи.
- ✓ Спектральні піки – це виражені максимальні значення амплітуди на певних частотах в спектрі.
- ✓ Ширина смуги спектра вказує на діапазон частот, в якому розподілена інтенсивність в спектрі. Вузька ширина смуги вказує на добре визначені частоти, тоді як широка ширина смуги вказує на більший діапазон частот.
- ✓ Фазовий спектр містить інформацію про фазові зміни на різних частотах в спектрі. Частотний спектр широко використовується у сигнальній обробці, телекомунікаціях, радіо, акустиці, музиці, оптиці, радіофізиці, електроніці та багатьох інших галузях. Він дозволяє визначити склад і характеристики сигналів, виявляти резонансні явища, фільтрувати сигнали і виконувати багато інших аналітичних і оброблювальних завдань.
- ✓ Часовий спектр задає представлення сигналу у вигляді розподілу енергії або інтенсивності від часу. Він допомагає вивчати зміни сигналу з плином часу. Часовий спектр – це графічне або числове представлення розподілу інтенсивності (амплітуди) сигналу, хвилі чи системи в залежності від часу. Часовий спектр дозволяє аналізувати, які зміни в часі відбуваються в сигналі або системі і наскільки інтенсивні вони є.

Основні поняття та характеристики часового спектра включають: час, амплітуда часового спектра, часові компоненти, спектральні піки та інші.

Час – основна змінна, за якою розподіляється інтенсивність в спектрі. Час вимірюється у секундах і вказує, коли відбуваються зміни в сигналі чи системі. Амплітуда часового спектра визначає величину, яка показує інтенсивність (силу) сигналу в певний момент часу. Вона визначає, наскільки сильним є сигнал в конкретний момент. Часові компоненти задають окремі моменти часу, в які інтенсивність сигналу має визначену амплітуду. Кожна часова компонента може відповідати певному явищу, події або зміні в

сигналі чи системі. Спектральні піки визначаються для обчислення максимального значення амплітуди на певних моментах часу в спектрі.

Часовий домен визначає область аналізу, яка вивчає зміни в сигналі або системі в просторі часу. Часовий спектр дуже корисний для аналізу сигналів, таких як звукові хвилі, електричні сигнали, сейсмічні дані та багато інших. Він дозволяє визначити часові властивості сигналів, такі як тривалість подій, періоди коливань і зміни відповідно до часу. Амплітудний спектр – це графічне або числове представлення розподілу амплітуд (або амплітудних значень) сигналу, хвилі чи системи в залежності від їхніх частот. Амплітудний спектр визначає, які амплітуди мають різні компоненти частотного спектра сигналу чи системи.

При проведенні наукових досліджень спираються на основні характеристики спектральних ліній. Це довжина хвилі світла або іншого електромагнітного випромінювання, яке відповідає спектральній лінії. Довжина хвилі вимірюється у нанометрах (нм) або інших одиницях вимірювання. Частота електромагнітного випромінювання, яка відповідає спектральній лінії. Частота вимірюється у герцах (Гц). Інтенсивність це величина, яка вказує на інтенсивність світла або випромінювання від спектральної лінії. Вона визначає, наскільки сильним є сигнал на даній спектральній лінії. Ширина лінії, це параметр, який вказує на розмір частотного (або довжини хвилі) діапазону, в якому розподілена інтенсивність для спектральної лінії. Ширина лінії може бути вузькою (остроконусною) або широкою (розплитою). Спектральні лінії грають важливу роль у спектроскопії, астрофізиці, хімії та інших науках. Вони дозволяють досліджувати властивості матеріалів, зорь, газів та інших об'єктів на основі їхніх спектрів. Наприклад, астрономи використовують спектральні лінії для вивчення хімічного складу зір, виявлення планет і далеких галактик, а хіміки використовують їх для аналізу хімічних реакцій і визначення складу речовин.

Фур'є-аналіз проводиться на основі математичного методу, що дозволяє розкласти складний сигнал на окремі компоненти в частотному або енергетичному представленні. Він широко використовується для аналізу спектрів. Фур'є-аналіз - це математичний метод, який дозволяє розкласти складний сигнал чи функцію у суму синусоїдальних (або косинусоїдальних) компонентів з різними частотами та амплітудами. Цей метод названий на честь французького математика Жана Баптіста Жозефа Фур'є і є одним із фундаментальних інструментів у сигнальній обробці, спектроскопії, обробці зображень, та інших областях науки та інженерії.

Ці поняття є важливими для розуміння та аналізу різних типів спектрів у фізиці, електроніці, сигнальній обробці та інших галузях науки та технології.

1.2. Методи збору і обробки даних

Перш ніж проводити комп'ютерну обробку та аналіз результатів необхідно провести грамотний збір даних. Збір даних про енергетичні спектри може включати в себе різні методи та техніки, залежно від призначення та джерела даних. Ось декілька методів збору даних про енергетичні спектри:

Спектроскопія це ключовий метод для збору даних про енергетичні спектри. Спектроскопія використовує різноманітні прилади, такі як спектрофотометри, мас-спектрометри, ЯМР-спектрометри та інші, для реєстрації і аналізу енергетичних спектрів різних матеріалів чи зразків. Вона дозволяє визначити, які енергетичні рівні та переходи існують в матеріалі.

Фотодетектори, такі як фотодіоди, фотоприймачі, можуть використовуватися для реєстрації світла або іншого випромінювання на певних енергетичних рівнях. Вони перетворюють фотони в електричний сигнал, який може бути записаний і проаналізований. Фотодетектори - це прилади, які використовуються для визначення енергетичного спектру світла або інших видів електромагнітного випромінювання. Вони можуть вимірювати інтенсивність світла або фотонів на різних енергетичних рівнях. Для визначення енергетичного спектру використовуються різні типи фотодетекторів, залежно від діапазону енергій та довжини хвиль, яку вони можуть спостерігати. Наведемо основні типи фотодетекторів, які можуть бути використані для цієї цілі: фотодіоди, фотоприймачі (Photomultiplier Tubes, PMT), фотонські детектори (Photon Counting Detectors) фотодетектори для рентгенівського випромінювання, енергетичні аналізатори, фотон-залежні емісійні детектори, детектори частинок та інші.

Ці аналізатори використовуються в різних дослідницьких галузях, таких як фізика, хімія, астрономія, матеріалознавство та інші. Вони дозволяють вченим отримувати важливу інформацію про енергетичний спектр частинок та властивості матеріалів.

У випадках, коли не можна провести експериментальне вимірювання енергетичних спектрів, використовуються комп'ютерні моделі, які дозволяють прогнозувати спектри на основі теоретичних розрахунків та припущень. Комп'ютерне моделювання є потужним інструментом для визначення енергетичного спектру в різних контекстах, таких як фізика, хімія, астрономія та інші галузі. Цей процес включає в себе використання

математичних моделей та обчислювальних методів для симуляції та аналізу поведінки системи та визначення її енергетичного спектру.

У хімії та матеріалознавстві моделювання молекулярної динаміки може використовуватися для вивчення енергетичного спектру молекул та атомів. В цьому випадку система (наприклад, молекулярна система) симулюється на комп'ютері, і рух та енергія її компонентів аналізуються. У фізиці частинок та астрофізиці комп'ютерні симуляції можуть використовуватися для визначення енергетичного спектру частинок, таких як електрони, фотони, протони тощо. Ці симуляції дозволяють вивчити взаємодію частинок у великих прискорювачах та космічних середовищах. Для визначення енергетичного спектру використовуються комп'ютерні симуляції спектроскопічних експериментів, таких як ЯМР (ядерний магнітний резонанс), МІФ (магнітний момент), ІК (інфрачервоний) та УФ (ультрафіолетовий) спектроскопія. У матеріалознавстві можна моделювати кристалічні структури та визначити їхні енергетичні рівні. Це корисно для вивчення електронної структури матеріалів та їхнього енергетичного спектру. В астрофізиці комп'ютерні симуляції використовуються для вивчення енергетичних спектрів об'єктів, таких як зірки, галактики та космічні простори. Це допомагає розуміти процеси, які відбуваються в космосі. У фізиці високих енергій симуляції прискорювачів частинок допомагають визначити енергетичний спектр частинок, які генеруються та взаємодіють у прискорювачі.

Ці симуляції вимагають великої обчислювальної потужності і детального розуміння фізичних процесів. Вони дозволяють вивчати енергетичний спектр у випадках, коли експериментальне вимірювання складне або неможливе, а також допомагають прогнозувати результати експериментів. Вибір методу залежить від конкретної задачі та дослідження. Комбінування різних методів може допомогти отримати більше інформації про енергетичні спектри та їхні властивості.

Обробка даних енергетичного спектру включає в себе ряд методів та алгоритмів, які дозволяють отримати корисну інформацію з експериментальних або обчислених спектрів. В залежності від типу спектра і завдань дослідження можуть використовуватися різні методи обробки даних.

Для отримання загальної інформації з енергетичного спектру можна просто підсумувати інтенсивності чи значення на різних енергетичних рівнях. Це допомагає визначити загальну кількість або сумарну енергію.

Підсумовування (Summation) – це математична операція, під час якої обчислюють суму чисел, даних або значень. У контексті обробки даних енергетичного спектру підсумовування може використовуватися для

отримання загальної інформації зі спектра, зокрема суми енергії або інтенсивності на різних енергетичних рівнях.

Не всі дані несуть цінну інформацію, що вимагає провдлити згладжування (smoothing): Згладжування даних полягає у використанні фільтрів чи методів середнього значення для зменшення шуму в спектрі та виокремлення основних особливостей. Згладжування (Smoothing) є методом обробки даних, призначеним для зменшення шуму, видалення артефактів та виділення загальних тенденцій у даних. Цей процес використовується для поліпшення якості сигналу та покращення візуалізації даних. У контексті обробки енергетичного спектру згладжування може бути корисним для видалення випадкових флуктуацій та виділення основних особливостей спектру.

Згладжування може бути корисним у випадках, коли вихідні дані містять шуми, інтерференцію або інші артефакти, які можуть заважати аналізу. Воно допомагає виділити основні тренди та особливості спектру, зробити дані більш читабельними та спрощує подальший аналіз. Однак необхідно враховувати, що згладжування може втрачати частину деталей вихідних даних, тому важливо бути обережним і вибирати відповідний метод згладжування залежно від конкретних потреб дослідження.

Для покращення якості спектра можна використовувати фільтри для видалення високочастотного шуму. Відсівання шуму (Noise Filtering) - це процес обробки сигналу або даних з метою видалення небажаних шумів, перешкод або випадкових варіацій, що можуть заважати правильному аналізу сигналу і збереженню корисних сигнальних компонентів. У контексті обробки даних енергетичного спектру відсівання шуму допомагає покращити якість спектра і виділити справжній сигнал від шуму.

Важливим аспектом відсівання шуму є баланс між видаленням шуму та збереженням корисної інформації. Перефільтрування може призвести до втрати деяких деталей сигналу, тому важливо обирати методи фільтрації з урахуванням конкретного завдання та характеру шуму.

Фур'є-аналіз використовується для перетворення сигналу в частотний діапазон та визначення домінуючих частотних складових у спектрі. Фур'є-аналіз (Fourier Analysis) - це математичний метод, який дозволяє розкласти складний сигнал чи функцію на суму простих синусоїдальних (синус і косинус) компонентів з різними частотами та амплітудами. Цей метод важливий для аналізу сигналів та спектрів, включаючи енергетичні спектри.

Ці методи фур'є-аналізу дозволяють досліджувати часові та частотні характеристики сигналів та спектрів, що є важливим для багатьох дисциплін, включаючи фізику, інженерію, акустику, медицину та багато інших галузей.

Для визначення пікових енергетичних значень в спектрі можна використовувати методи пошуку піків. Це корисно для визначення енергетичних ліній. Визначення пікових значень (Peak Finding) - це процес виявлення та локалізації максимальних точок (піків) у сигналі чи даних. У контексті обробки енергетичного спектру, пошук та визначення піків допомагає ідентифікувати важливі характеристики спектра, такі як спектральні лінії або пікові значення інтенсивності [19-21].

Для визначення піків у спектрі можна використовувати спеціалізовані програмні засоби та бібліотеки для обробки сигналів і аналізу даних, такі як SciPy, MATLAB, або спеціалізовані пакети для спектроскопії. Визначення піків є важливою складовою обробки енергетичних спектрів, оскільки це дозволяє визначити ключові характеристики спектра та ідентифікувати спектральні лінії, які можуть вказувати на присутність певних речовин чи фізичних явищ у досліджуваному сигналі.

Фітинг дозволяє апроксимувати експериментальні дані аналітичними функціями, такими як гауссові функції, для визначення параметрів піків та їхніх енергетичних характеристик. Фітинг (Fitting) - це процес апроксимації експериментальних даних аналітичними функціями чи математичними моделями для отримання кращого розуміння та опису цих даних. Фітинг використовується в різних науках і галузях, включаючи фізику, хімію, інженерію, статистику, біологію та інші області.

Фітинг є важливим інструментом для обробки та аналізу даних у науці і технології, оскільки дозволяє виділити закономірності в експериментальних даних, зробити прогнози та отримати параметри моделей, які описують фізичні або хімічні процеси.

Якщо спектр має базовий рівень або фон, його можна відняти від експериментальних даних для виділення сигналу. Віднімання базового рівня (Baseline Subtraction) – це процес віднімання фонового сигналу (базового рівня) від експериментальних даних з метою виділення та аналізу сигналів, які перебувають поверх цього фону. Цей підхід дозволяє підсилити інформацію про важливі сигнали або функції, які інакше можуть бути загублені або важко розрізнити через наявність низькочастотного фонового сигналу. Віднімання базового рівня використовується в багатьох галузях, включаючи спектроскопію, аналітику, обробку сигналів, медичинські дослідження і багато інших областей, де важливо виділити корисний сигнал або аналізувати зміни в сигналах, які можуть бути сховані за фоновим шумом чи базовим рівнем.

Для визначення площ піків та обчислення обсягу пікових сигналів можна використовувати чисельні методи обчислення інтегралів. Обчислення

інтегралів може бути важливою частиною обробки даних енергетичного спектру, особливо якщо ви хочете отримати певні фізичні величини або характеристики зі спектральних даних. Обчислення інтегралів є важливою частиною аналізу енергетичних спектрів, оскільки дозволяє визначити різні важливі параметри та характеристики, які можуть бути використані для ідентифікації речовин, визначення ефективності фільтрів, оцінки випромінювальної активності і багато інших застосувань.

Аналіз спектральних ліній (Line Fitting) - це метод обробки даних енергетичного спектру, який використовується для ідентифікації та характеристики спектральних ліній у спектрі та визначення параметрів цих ліній, таких як положення, амплітуда, ширина та інші. Цей метод допомагає виділити сигнали, які представлені спектральними лініями, від фонового шуму та інших ефектів. Аналіз спектральних ліній є важливою частиною спектроскопії та інших галузей, де важливо визначити і характеризувати специфічні спектральні функції, такі як емісійні лінії атомів чи молекул, абсорбційні лінії, рентгенівські лінії і т. д. Цей метод дозволяє отримувати інформацію про склад, концентрацію і фізичні властивості речовин у зразках [22-30].

Ці методи обробки даних варіюються залежно від конкретного виду спектру та задачі дослідження. Важливо враховувати фізичний контекст та специфіку даних при виборі методів обробки, щоб забезпечити точні та надійні результати.

1.3. Математичні моделі для аналізу енергетичних спектрів

Аналіз енергетичних спектрів часто включає в себе застосування математичних моделей для опису та аналізу спектральних даних. Математичні моделі допомагають визначити закономірності та параметри спектральних ліній та піків, що спостерігаються у спектрі. Нижче наведено деякі з популярних математичних моделей для аналізу енергетичних спектрів.

Гаусівська функція (нормальний розподіл) широко використовується для апроксимації спектральних ліній та піків. Ця модель описує симетричні лінії з однаковою амплітудою, а також включає параметри, такі як положення максимуму, ширина та амплітуда. Гаусівська модель - це одна з найпоширеніших математичних моделей для аналізу енергетичних спектрів, особливо для апроксимації та характеристики спектральних ліній та піків. Гаусівська функція (нормальний розподіл) описує симетричні лінії з однаковою амплітудою та параметрами, такими як положення максимуму, ширина та амплітуда.

Гаусівська функція має такий вигляд:

$$f(x) = A e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}},$$

де $f(x)$ – значення функції при x , A - амплітуда (максимальне значення) лінії, x_0 – положення максимуму (центр) лінії, σ – стандартне відхилення, яке визначає ширину лінії. Чим більше σ , тим ширший пік. Амплітуда (A) гаусівської лінії вказує на її максимальну інтенсивність. Площа під гаусівською лінією (інтеграл від $f(x)$) відображає загальну кількість сигналу, яку лінія представляє.

Гаусівська модель широко використовується для апроксимації спектральних ліній у спектроскопії, спектральному аналізі, хроматографії та інших галузях. Вона допомагає визначити параметри ліній, ідентифікувати характеристики спектральних функцій та визначити концентрації речовин. Гаусівська модель може бути використана для апроксимації індивідуальних спектральних ліній або компонентів у складних спектрах, а також для визначення загальної форми спектральних піків. У багатьох програмах для обробки даних спектроскопії, таких як Origin, MATLAB, Python (за допомогою бібліотеки SciPy), існують функції для підгонки гаусівських моделей до спектральних даних.

Лоренціанська функція використовується для апроксимації асиметричних спектральних ліній, зокрема для опису абсорбційних та резонансних ліній. Ця модель також має параметри, такі як положення максимуму, ширина та амплітуда. Лоренціанська модель – це математична модель, яка використовується для аналізу енергетичних спектрів, особливо для апроксимації та характеристики спектральних ліній та піків. Лоренціанська функція (або Лоренціан) описує асиметричні лінії з однаковою амплітудою та параметрами, такими як положення максимуму, ширина та амплітуда. Лоренціанська функція має такий вигляд:

$$f(x) = \frac{A}{\pi} \frac{\frac{1}{2}\Gamma}{(x-x_0)^2 + \left(\frac{1}{2}\Gamma\right)^2},$$

де $f(x)$ - значення функції при x , A – амплітуда (максимальне значення) лінії, x_0 – положення максимуму (центр) лінії. Γ – параметр, який визначає ширину лінії.

Амплітуда (A) гаусівської лінії вказує на її максимальну інтенсивність. Площа під Лоренціанською лінією (інтеграл від $f(x)$) відображає загальну кількість сигналу, яку лінія представляє. Параметр Γ визначає ширину Лоренціанської лінії. Чим більше Γ , тим ширший пік. Цей параметр також пов'язаний з часом релаксації або втрати енергії. Положення максимуму (x_0) Лоренціанської лінії вказує на те, де знаходиться центр лінії на вісі x .

Лоренціанська модель широко використовується для апроксимації спектральних ліній у спектроскопії, спектральному аналізі, хроматографії та інших галузях. Вона особливо корисна для опису асиметричних ліній, таких як абсорбційні та резонансні лінії, де гаусівська модель може бути недостатньою. Аналіз спектральних ліній за допомогою моделі Лоренціана дозволяє визначити параметри ліній, ідентифікувати характеристики спектральних функцій, а також визначити концентрації речовин і властивості процесів. У багатьох програмах для обробки даних спектроскопії, таких як MATLAB, Python (за допомогою бібліотеки SciPy), Origin, є функції для підгонки Лоренціанських моделей до спектральних даних.

Поліноміальні функції можуть використовуватися для апроксимації фонового сигналу чи функції шуму в спектрі. Зазвичай це низькопорядкові поліноми (наприклад, лінійні або квадратичні) для моделювання фонового сигналу. Поліноміальні моделі є одними з простих та універсальних математичних моделей, які можна використовувати для аналізу енергетичних спектрів. Вони дозволяють апроксимувати форму спектральних кривих та визначити параметри, такі як фон, шум, та інші функції в спектрі.

Поліноміальні моделі мають такий загальний вигляд:

$$f(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n,$$

де $f(x)$ - значення функції при x , $a_0, a_1, a_2, \dots, a_n$ – коефіцієнти полінома, n - степінь полінома. Поліноміальні моделі можуть бути використані для апроксимації фоновому сигналу та шуму в спектрі. Зазвичай низькопорядкові поліноми (наприклад, лінійні або квадратичні) використовуються для опису фону. Це дозволяє виділити справжній сигнал в спектрі.

Поліноміальні моделі можуть бути використані для корекції фоновому сигналу в спектрі. Віднімання апроксимованого фону від експериментальних даних допомагає отримати чистий сигнал. Застосування поліноміальних моделей дозволяє аналізувати шум та визначати його характеристики, такі як середнє значення, дисперсія тощо. Поліноміальні моделі можуть бути розширені для апроксимації складних спектральних кривих, які містять кілька компонентів. У такому випадку поліном може бути комбінований з іншими функціями апроксимації.

Поліноміальні моделі часто використовуються як перший крок у процесі обробки спектральних даних, особливо коли потрібно виділити справжній сигнал від фону та шуму. Після використання поліноміальних моделей можуть застосовуватися інші методи аналізу, такі як апроксимація гаусівськими або Лоренціанськими лініями для ідентифікації та характеристики спектральних ліній.

Експоненціальні функції можуть використовуватися для аналізу експоненційних згасань або зростань у спектрі. Ці моделі можуть включати параметри, які описують часові константи або спектральні параметри. Експоненціальні моделі – це математичні моделі, які базуються на експоненціальних функціях і використовуються для аналізу енергетичних спектрів, зокрема для апроксимації та характеристики спектральних ліній та піків. Вони зазвичай використовуються для моделювання явищ, де спектральні лінії відображають експоненційні зміни амплітуди чи інших параметрів залежно від зміни одного або декількох параметрів.

Експоненціальні моделі можуть мати різні форми в залежності від прикладення. Однак загальний вигляд експоненціальної функції має такий вигляд:

$$f(x) = Ae^{-\alpha x},$$

де $f(x)$ - значення функції при x , A – амплітуда (початкова амплітуда) лінії, α – коефіцієнт експоненційного згасання, який впливає на швидкість згасання експоненти, x – незалежна змінна.

Експоненціальні моделі застосовуються для аналізу процесів, де спостерігається експоненційний ріст чи згасання. Наприклад, вони використовуються в ядерній спектроскопії для аналізу експоненційних згасань рентгенівських фотонів чи гамма-квантів, а також в інших областях науки і технології. Експоненціальні моделі корисні для аналізу процесів, де важливими є зміни з часом або просторовими залежностями. Вони дозволяють визначити параметри згасання або зростання та встановити закономірності таких процесів з використанням спектральних даних.

Сплайн-функції дозволяють плавно апроксимувати складні спектральні форми. Вони використовують кусково-поліноміальні або кусково-експоненціальні функції для опису спектральних даних. Сплайн-функції або сплайни – це математичні криві, які використовуються для апроксимації та аналізу енергетичних спектрів та інших спектральних даних. Сплайни дозволяють згладити та інтерполювати спектральні дані, а також визначити закономірності між вимірами точок спектра. При використанні сплайнів важливо враховувати природу спектральних даних, тип сплайна та відповідну кількість вузлових точок для побудови гладких та точних спектральних кривих.

Фур'є-аналіз дозволяє розкласти спектральний сигнал на суму синусоїдальних компонент, що дозволяє аналізувати характерні частоти та амплітуди в спектрі. Фур'є-аналіз – це потужний метод для аналізу енергетичних спектрів та перетворення сигналів з області часу в область частоти. Він дозволяє розкрити складові частоти та амплітуди в сигналі, що дуже корисно для розуміння інформації, яка міститься в спектральних даних. Фур'є-аналіз базується на математичному перетворенні Фур'є, яке перетворює сигнал з області часу (амплітуди від часу) в область частоти (амплітуди від частоти). Для аналізу спектральних даних, перетворення Фур'є використовується для визначення, які частоти (або енергетичні компоненти) присутні в сигналі. Перетворення Фур'є розкладає сигнал на ряд спектральних складових, які представляють собою різні частоти. Кожна складова має свою амплітуду та фазу. Фур'є-аналіз використовується в різних галузях, включаючи фізику, інженерію, сигнальну обробку, медицину та інші. Він застосовується для аналізу звукових сигналів, обробки сигналів в електроніці, визначення спектральних характеристик матеріалів в хімії та фізиці, а також для багатьох інших завдань. Обернене Фур'є-перетворення дозволяє перетворити дані з області частоти назад в область часу. Це корисно, коли потрібно відновити сигнал або його окремі складові з результатів Фур'є-аналізу.

Висновок до розділу 1

У розділі було визначено основні терміни та поняття, пов'язані з енергетичними спектрами, такі як частотний спектр, часовий спектр, амплітудний спектр, фазовий спектр, ширина смуги спектра та спектральна лінія. Ці поняття є основою для подальшого розуміння аналізу спектрів.

Проаналізовано різноманітні методи збору даних для отримання енергетичних спектрів, такі як спектроскопія, вимірювання, фотодетектори, детектори частинок, аналізатори мас і спектральні камери. Також було описано методи обробки даних, такі як згладжування, відсівання шуму, фітінг, калібрування і обчислення інтегралів.

Розглянуто різні математичні моделі, які можна використовувати для аналізу та обробки енергетичних спектрів, включаючи гаусівську, лоренціанську, поліноміальні, експоненціальні та сплайн-функції. Ці моделі дозволяють апроксимувати та інтерпретувати спектральні дані.

Усі ці знання та концепції є фундаментом для подальшого дослідження та практичного застосування в області аналізу та обробки енергетичних спектрів за допомогою систем комп'ютерної математики. Розділ 1 надає необхідні теоретичні основи для розуміння та використання цих методів і моделей у кваліфікаційній роботі.

РОЗДІЛ 2. ЗАСОБИ І МЕТОДИ КОМП'ЮТЕРНОЇ МАТЕМАТИКИ ДЛЯ АНАЛІЗУ ЕНЕРГЕТИЧНИХ СПЕКТРІВ

2.1. Вибір програмних інструментів для аналізу спектральних даних

Застосування комп'ютерної математики в аналізі спектральних даних є важливим і розширеним напрямком у сучасному науковому дослідженні та промисловості. Комп'ютерна математика дозволяє ефективно обробляти, аналізувати і інтерпретувати спектральні дані, що вимірюються в різних галузях, таких як спектроскопія, хімічний аналіз, фізика, астрономія та інші. Застосування комп'ютерної математики у спектральному аналізі робить можливим розширення наших знань у багатьох галузях науки та технологій і відкриває нові можливості для дослідження та інновацій.

Origin – це потужне програмне забезпечення для обробки та аналізу даних, яке часто використовується для роботи з спектральними даними. Origin має багато інструментів і функціональностей, які полегшують аналіз та візуалізацію спектральних даних. Origin дозволяє імпортувати дані з різних джерел, включаючи файли даних, таблиці Excel, лабораторні прилади та інші. Ви можете легко обробляти та підготувати дані, використовуючи вбудовані інструменти для фільтрації, видалення шуму та калібрування.

Origin дозволяє створювати різноманітні графіки для візуалізації спектральних даних, такі як лінійні графіки, гістограми, спектрограми та інші. Ви можете виглядати залежності між спектральними компонентами та виявляти важливі особливості даних.

Origin має вбудовані інструменти для виконання фур'є-аналізу, який дозволяє перетворити дані з часового або просторового домену в частотний домен. Це корисно для виявлення частотних складових у спектральних даних. Origin можна використовувати для створення математичних моделей, які апроксимують спектральні дані. Це допомагає визначити параметри та характеристики спектральних ліній та піків.

Origin має інструменти для виконання статистичного аналізу спектральних даних, що дозволяє виявляти залежності, тренди та кореляції в даних. Він дозволяє створювати звіти та презентації на основі результатів аналізу спектральних даних, що полегшує документацію та обмін результатами з колегами та співробітниками. Загалом, Origin є потужним

інструментом для аналізу спектральних даних і допомагає дослідникам та науковцям в ефективній роботі з цими даними.

Імпорт та обробка даних в Origin досить простий і включає кілька основних кроків.

Крок 1: Імпорт даних

1. Відкрити програму Origin.
2. Створити новий проект, якщо це необхідно, натиснувши "File" (Файл) > "New Project" (Новий проект).
3. Вибрати "File" (Файл) > "Import" (Імпорт) або використати гарячу клавішу Ctrl+I (Windows) або Command+I (Mac) для відкриття вікна імпорту.
4. Вибрати тип джерела даних. Origin підтримує багато форматів, таких як текстові файли, Excel, LabVIEW, і багато інших. Виберіть відповідний тип джерела.
5. Виберіть файл з вашими даними та натисніть "Open" (Відкрити).

Крок 2: Обробка даних

1. Після імпорту даних ви побачите їх на робочому аркуші Origin. Тут можете переглядати та редагувати дані.
2. Використовуйте різноманітні інструменти обробки даних, доступні в Origin, для фільтрації, підготовки та аналізу даних. Ці інструменти включають функції для згладжування, відсівання шуму, калібрування, розрахунку статистичних параметрів і багато інших.
3. Використовуйте графіки для візуалізації даних. Ви можете створювати графіки, використовуючи інструменти вбудовані в Origin, і налаштовувати їх відповідно до вашого завдання.

Крок 3: Збереження та аналіз

1. Після обробки даних та створення відповідних графіків і аналізу, ви можете зберегти результати роботи. Виберіть "File" (Файл) > "Save Project" (Зберегти проект) для збереження вашого проекту Origin з усіма даними і графіками.
2. Ви також можете експортувати дані або графіки у різні формати для подальшого використання або публікації.
3. Використовуйте інструменти аналізу даних в Origin для вивчення залежностей, визначення параметрів моделей і виконання статистичного аналізу.

Origin має багато додаткових функцій і можливостей для обробки та аналізу даних, і детальний розгляд документації та онлайн-ресурсів Origin допоможе в подальшому вдосконаленні навичок роботи з цією програмою. Обробка даних в Origin може бути здійснена за допомогою різних

інструментів і методів, які допоможуть вам підготувати дані для подальшого аналізу та візуалізації.

Ці кроки є загальними і можуть варіюватися в залежності від конкретного завдання та типу даних, з якими ви працюєте. Origin має багато інструментів та можливостей для обробки та аналізу даних, і перш за все слід ознайомитися з документацією та ресурсами Origin для більш детального вивчення можливостей цієї програми.

Origin - це потужне програмне забезпечення для візуалізації даних та створення графіків різного типу. Візуалізація даних в Origin допомагає вам легше розуміти залежності в даних, виявляти тренди та особливості, а також представляти результати вашого аналізу в зрозумілій та професійній формі. Ось деякі основні способи візуалізації даних в Origin:

Лінійні графіки (Line Plots). Це найпоширеніший тип графіку, який використовується для відображення залежностей між двома змінними. Можна створити лінійні графіки для часових рядів, спектральних даних, експериментальних результатів та багатьох інших даних.

Гістограми (Histograms) використовуються для відображення розподілу даних за допомогою стовпців, де кожен стовпець представляє інтервал значень. Гістограми корисні для аналізу розподілу даних та виявлення патернів.

Точкові графіки (Scatter Plots) дозволяють відображати взаємозв'язок між двома змінними у вигляді точок на графіку. Це корисно для виявлення кореляцій та викидів в даних. Origin підтримує створення тривимірних графіків, які корисні для відображення тривимірних даних або розподілу даних в просторі. Контурні графіки (Contour Plots) використовуються для відображення тривимірних даних на площині за допомогою контурних ліній. Це корисно для аналізу залежності між двома незалежними змінними та залежними змінними.

Спектрограми (Spectrograms) використовуються для відображення спектральних даних в часовому аспекті. Спектрограми корисні для аналізу сигналів та спектральних характеристик. Коробкові діаграми (Box Plots) дозволяють відображати статистичну інформацію про розподіл даних, включаючи медіану, кватилі та викиди. Теплові карти (Heatmaps) використовуються для відображення інтенсивності даних на двовимірній сітці. Теплові карти корисні для аналізу матриць даних.

Origin також має багато інших типів графіків та інструментів для візуалізації даних. Ви можете налаштовувати графіки, додавати підписи, легенди та інші елементи, щоб створити професійно виглядаючі графічні представлення ваших даних.

Фур'є-аналіз в Origin – це потужний інструмент для аналізу сигналів та спектральних даних, який допомагає перетворювати дані з часового (або просторового) домену в частотний домен та визначати складові частоти в сигналах. Наведемо схему як використовувати фур'є-аналіз в Origin:

- Спочатку імпортуйте ваші дані до Origin, які ви бажаєте проаналізувати за допомогою фур'є-аналізу.
- Візуалізуйте ваш сигнал на графіку, який ви бажаєте проаналізувати. Це може бути лінійний графік, який показує залежність сигналу від часу.
- Виконання фур'є-аналізу:
 1. Виберіть ваш графік.
 2. Перейдіть до меню "Analysis" (Аналіз) > "Signal Processing" (Обробка сигналу) > "FFT" (Швидке перетворення Фур'є).
- Параметри фур'є-аналізу:

У вікні параметрів фур'є-аналізу ви можете налаштувати різні параметри, такі як кількість точок, тип перетворення, частотний діапазон та інші. Налаштуйте параметри відповідно до вашого завдання.
- Після виконання фур'є-аналізу в Origin ви отримаєте спектральні дані, які представляють частотний спектр вашого сигналу. Це може бути представлено у вигляді графіка амплітудного спектра та фазового спектра.
- Далі можете візуалізувати отриманий спектр за допомогою графічних інструментів Origin. Амплітудний спектр часто відображається як графік амплітуди відносно частоти, а фазовий спектр - як графік фази відносно частоти.
- Аналізуйте спектральні дані для визначення домінуючих частот, амплітуд, фазових відхилень та інших характеристик сигналу.
- Збережіть результати аналізу та спектральні дані для подальшого використання або подальшого аналізу.

Фур'є-аналіз в Origin допомагає виявляти складові частоти в сигналах, а також аналізувати їх амплітуди та фазові характеристики. Цей метод корисний для різних областей, таких як обробка сигналів, спектроскопія, акустика та багато інших дисциплін.

2.2. Методи обробки і фільтрації спектральних даних в Origin

Обробка спектральних даних в Origin може включати в себе різні методи та операції для аналізу, покращення якості даних та підготовки їх до подальшого використання.

- Метод згладжування допомагає зменшити шум та виділити основні особливості спектра. В Origin ви можете використовувати різні фільтри для згладжування, такі як фільтр Савіцького-Голея, фільтр Калмана, низькочастотний фільтр і так далі. Згладжування в Origin може бути виконане різними методами, залежно від вашого завдання та характеристик даних. Нижче наведені приклади використання методів згладжування в Origin:

- Фільтр Савіцького-Голея часто використовується для згладжування спектральних даних. Він дозволяє зменшити шум та виділити основні піки.

- Виберіть ваші дані.
- Перейдіть до "Аналіз" (Analysis) > "Згладжування" (Smoothing) > "Фільтр Савіцького-Голея" (Savitzky-Golay Filter).
- Налаштуйте параметри, такі як ширина фільтра та порядок, відповідно до вашого завдання.

- Фільтр Калмана допомагає покращити якість сигналу та зменшити вплив шуму. Щоб застосувати його в Origin:

- Виберіть ваші дані.
- Перейдіть до "Аналіз" > "Згладжування" > "Фільтр Калмана" (Kalman Filter).
- Налаштуйте параметри фільтра відповідно до потреби.

- Згладжування фільтром низької частоти допомагає видалити високочастотний шум і виділити низькочастотні компоненти. Для цього виконайте такі дії:

- Виберіть ваші дані.
- Перейдіть до "Аналіз" > "Згладжування" > "Фільтр низької частоти" (Low Pass Filter).
- Виберіть параметри фільтра для згладжування.

Це лише кілька прикладів методів згладжування в Origin. Можна експериментувати з різними методами та параметрами, щоб досягти оптимального результату для вашого набору даних.

Фільтри використовуються для видалення шуму зі спектральних даних, щоб покращити якість сигналу. В Origin доступні різні методи фільтрації, такі як медіанний фільтр, фільтр Гауса і інші. Відсівання шуму (Noise Filtering) в Origin може бути важливим для покращення якості спектральних даних шляхом видалення випадкового або систематичного шуму. Origin надає різні інструменти для відсівання шуму. Наведемо кілька прикладів використання відсівання шуму в Origin:

Фільтр медіанного згладжування (Median Filter):

- Відкрийте ваші дані в Origin.
- Виберіть графік або спектр, який містить шум.
- Перейдіть до "Аналіз" (Analysis) > "Згладжування" (Smoothing) > "Фільтр медіанного згладжування" (Median Filter).

- Виберіть розмір вікна фільтра медіанного згладжування та натисніть "ОК". Origin використає медіану значень у вікні для згладжування шуму.

Фільтр Гауса (Gaussian Filter):

- Відкрийте ваші дані в Origin.
- Виберіть графік або спектр, який містить шум.
- Перейдіть до "Аналіз" (Analysis) > "Згладжування" > "Фільтр Гауса" (Gaussian Filter).

- Виберіть параметри фільтра Гауса, такі як ширину та ступінь згладжування, та натисніть "ОК". Origin використає цей фільтр для згладжування шуму.

Фільтр Калмана (Kalman Filter):

- Відкрийте ваші дані в Origin.
- Виберіть графік або спектр з шумом.
- Перейдіть до "Аналіз" (Analysis) > "Згладжування" > "Фільтр Калмана" (Kalman Filter).

- Налаштуйте параметри фільтра Калмана, які включають початковий етап, коефіцієнти шуму тощо, та натисніть "ОК". Origin використає цей фільтр для виділення сигналу та видалення шуму.

Ці приклади показують різні методи фільтрації та відсівання шуму в Origin. Вибір конкретного методу та параметрів залежить від характеристик вашого сигналу та шуму.

Висновок до розділу 2

Представлено і описано сучасні математичні та комп'ютерні методи, які використовуються для аналізу енергетичних спектрів. Зазначені методи сприяють вивченню та обробці енергетичних характеристик, що є критичними для різноманітних досліджень у фізичних науках та інженерії.

Розглянуті засоби комп'ютерної математики дозволяють ефективно аналізувати та інтерпретувати складні енергетичні спектри, отримані в різних дослідженнях. Їх використання відкриває можливості для дослідження енергетичних властивостей матеріалів, фізичних процесів та явищ, що має важливе значення для подальших наукових відкриттів та технологічного прогресу.

Такий аналіз є необхідним у різних областях, включаючи фізику матеріалів, астрофізику, квантову фізику та інші галузі наукових досліджень. Розглянуті методи та засоби є потужним інструментарієм для науковців, які вивчають та аналізують енергетичні спектри з метою отримання важливих даних та зрозуміння фундаментальних принципів фізичних явищ.

РОЗДІЛ 3 ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ТА ВИКОРИСТАННЯ МЕТОДІВ АНАЛІЗУ ЕНЕРГЕТИЧНИХ СПЕКТРІВ В НАВЧАЛЬНОМУ ПРОЦЕСІ

3.1 Імпортування даних при обробці результатів спектрального аналізу

Для аналізу і обробки спектрів за допомогою Origin часто буває необхідно імпортувати дані з зовнішнього носія інформації. нагадаємо основні кроки. Після того, як ви запусите програму Origin, і перед вами з'явиться таблиця, в меню File (файл) виберіть команду Import/Single ASCII (Імпорт/ Одиночний ASCII)

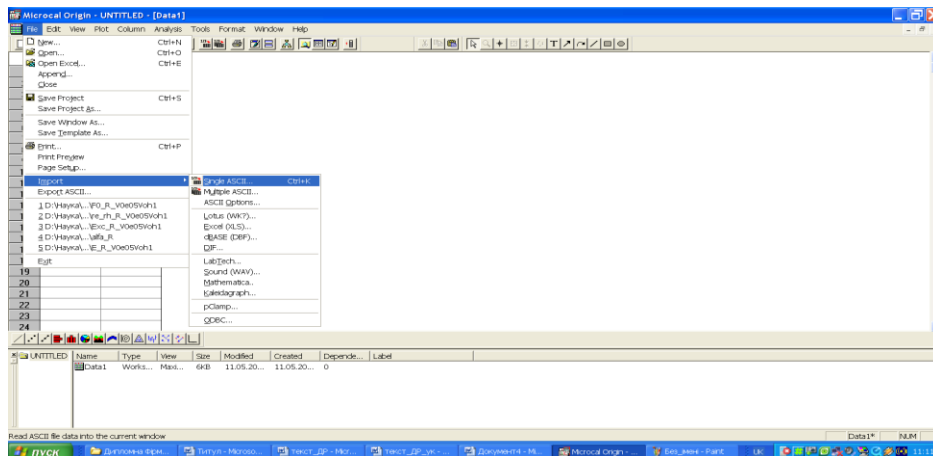


Рис. 1.1. Імпорт даних з зовнішнього носія інформації

(рис. 1.1).

У стандартному запиті імені файлу, що з'явився, виберіть потрібний і натисніть Відкрити (рис. 1.2). Після цього у вас відобразиться таблиця з даними, використовуючи яку, ви і виконуватимете подальші дії. Origin автоматично як ім'я таблиці привласнить ім'я файлу і використає текст з файлу як підписи стовпців.

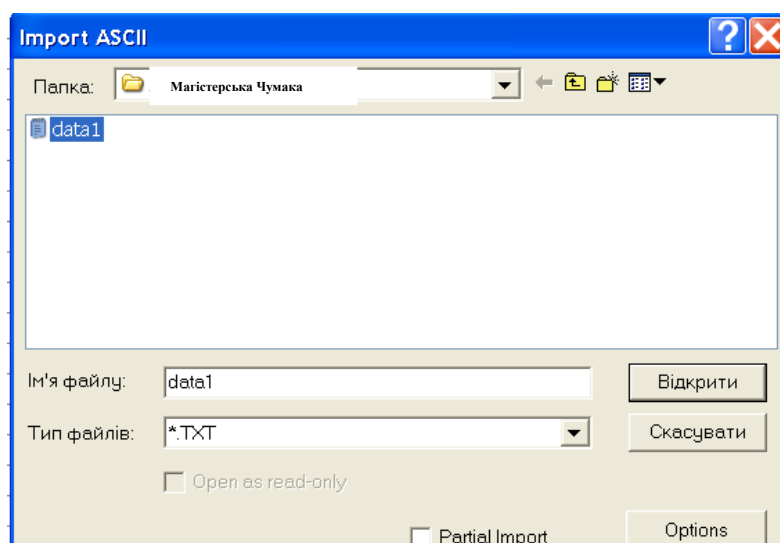
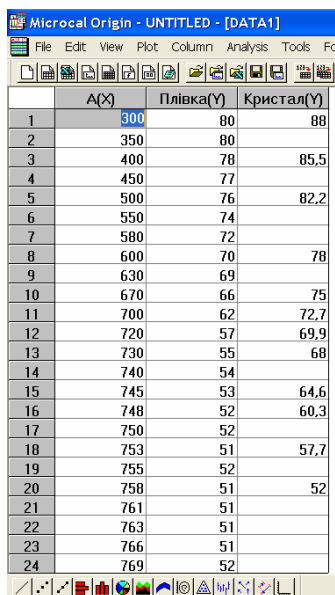


Рис. 1.2. Вікно при здійсненні імпорту даних

3.2 Відображення даних заданих за допомогою координат точок

Після проведення дослідження в файлі експериментальних даних наберіть енергетичні залежності від радіуса мікрочастинки і діелектричної проникності екситонних станів в напівпровідникових сферичних кристалах GaAs/AlAs і полікристалічних плівках. Імпортуйте дані з файлу. Необхідно відобразити ці дані на графіку. Для цього в таблиці виділіть колонки A(X) і Плівка(Y) (див. рис.2.1). При цьому переконайтесь, що роль колонки A – X, а роль B – Y. Під таблицею є панель інструментів, на якій вказані можливі способи відображення експериментальних даних (рис.2.1). Виберіть кнопку Scatter (Точки) (друга зліва).



	A(X)	Плівка(Y)	Кристал(Y)
1	300	80	88
2	350	80	
3	400	78	85,5
4	450	77	
5	500	76	82,2
6	550	74	
7	580	72	
8	600	70	78
9	630	69	
10	670	66	75
11	700	62	72,7
12	720	57	69,9
13	730	55	68
14	740	54	
15	745	53	64,6
16	748	52	60,3
17	750	52	
18	753	51	57,7
19	755	52	
20	758	51	52
21	761	51	
22	763	51	
23	766	51	
24	769	52	

Рис. 2.1. Панель з можливими способами відображення даних

Після натискування на неї у вас з'явиться вікно Graph 1 з відображенням вказаної залежності у вигляді точок (рис. 2.2).

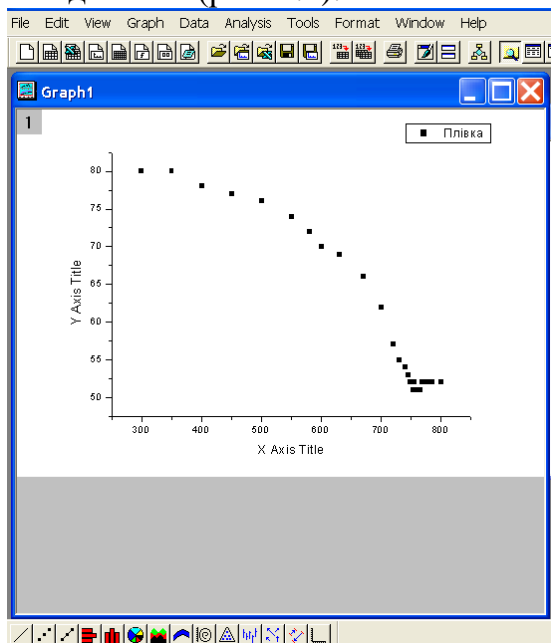


Рис. 2.2. Відображення у вигляді точок залежності енергії екситону від радіуса мікро кристалу

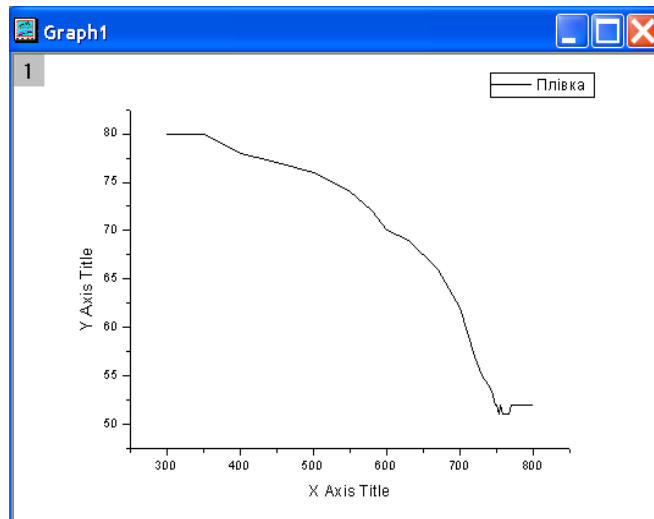


Рис. 2.3. Приклад графіка типу Line (лінія)

На рисунках 2.3 і 2.4 представлені інші варіанти відображення даних за допомогою лінії (рис. 2.3), і точок, сполучених лінією (рис. 2.4).

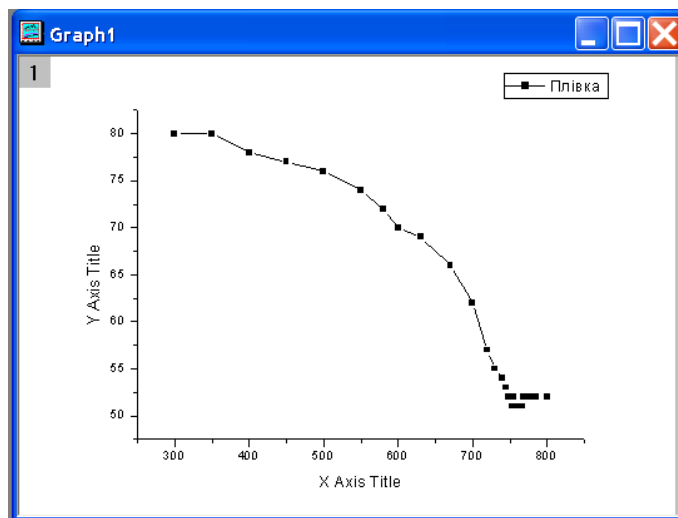


Рис. 2.4. Приклад графіка типу Line+Symbol (лінія +символ)

У таблиці на рис. 2.1 приведені дані для полікристалічних плівок [6]. Їх теж необхідно відобразити на цьому ж графіку. На іконці шару1 (сірий квадратик в лівому верхньому кутку вікна Graph 1) клацніть правою кнопкою миші, з'явиться підменю, в якому виберіть пункт Plot Associations (рис. 2.5).

У вікні Select Columns for Plotting в списку Worksheet знайдіть ім'я вашої таблиці і виберіть її. У списку перерахованих колонок таблиці виберіть колонки A і C (або Кристал), задавши їм ролі X і Y відповідно. Додайте новий набір даних, натиснувши кнопку Add (додати), після чого натисніть ОК (рис. 2.6). На графіці відобразяться нові точки (рис. 2.7).

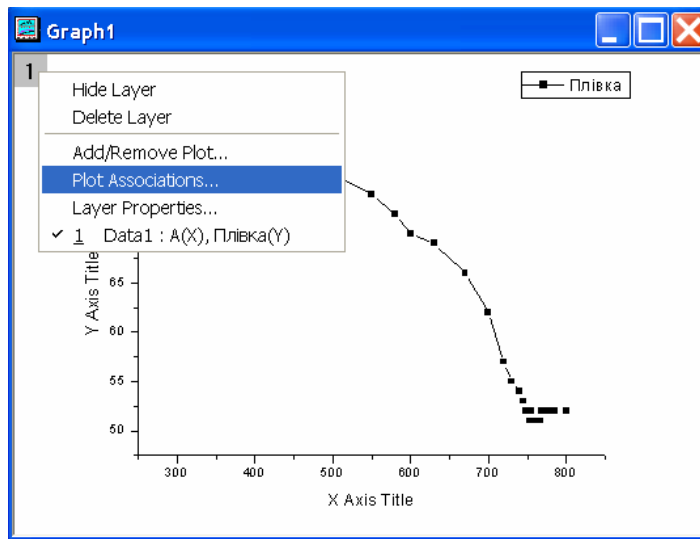


Рис. 2.5. Добавляння нового шару на графік

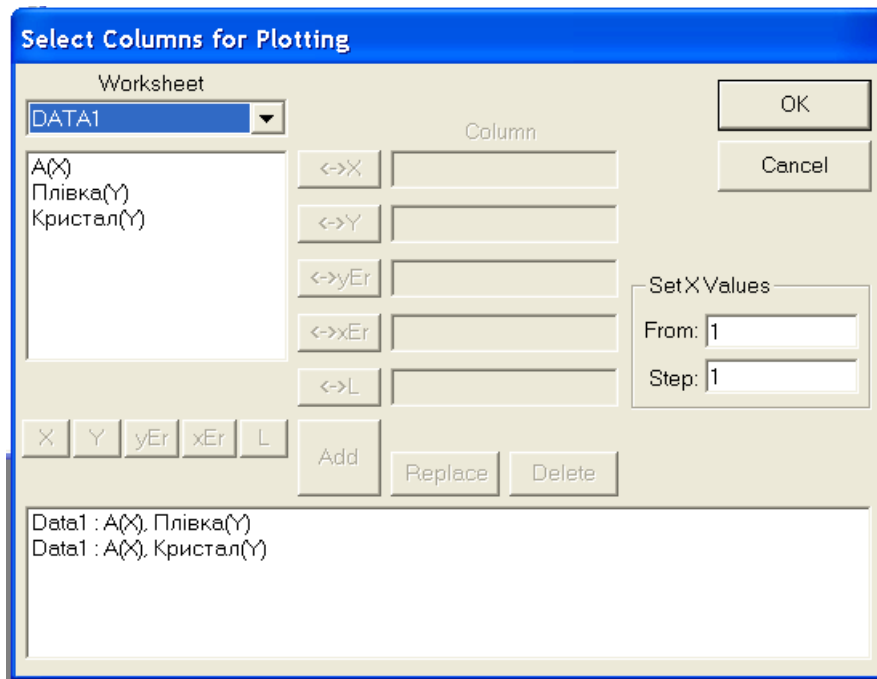


Рис. 2.6. Додавання нових наборів даних

Зовнішній вигляд символів за бажанням можна змінити. Після подвійного клацання по одній з точок будь-якого набору даних на графіці, з'явиться вікно **Plot Details** (Параметри графіка), де на закладці **Symbol** (Символ) можна змінити вигляд символів, натиснувши кнопку **Preview** (Попередній перегляд) з чорною трикутною стрілкою. Тут також можна задати розмір символів в списку **Size** (Розмір), колір – в списку **Symbol Color** (Колір маркера), товщину ліній – в списку **Edge Thickness** (товщина ліній) (рис. 2.8).

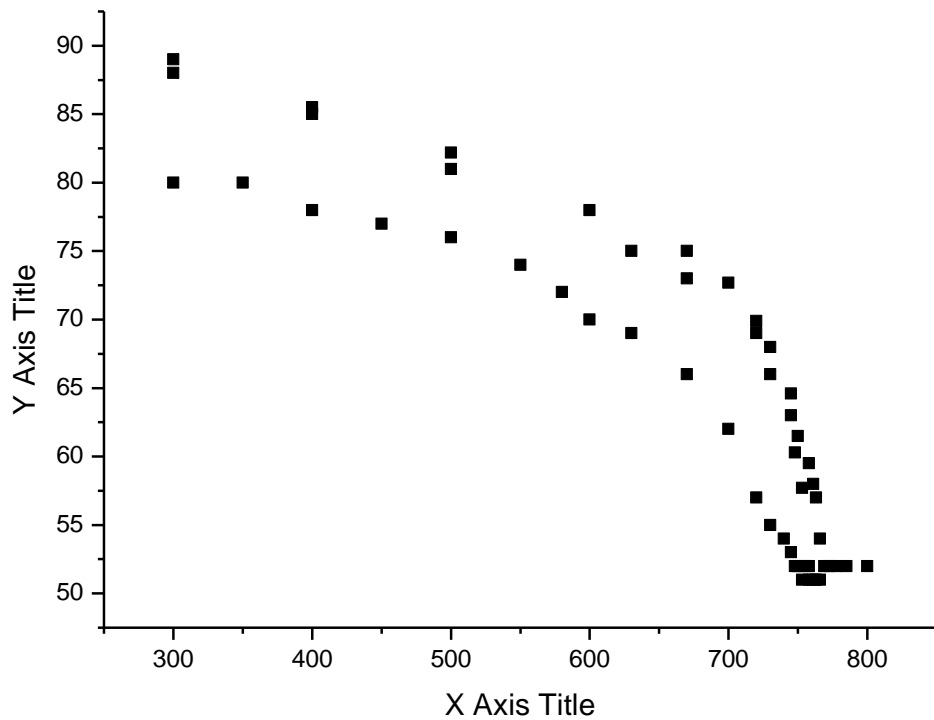


Рис. 2.7. Відображення на графіці іншого набору даних

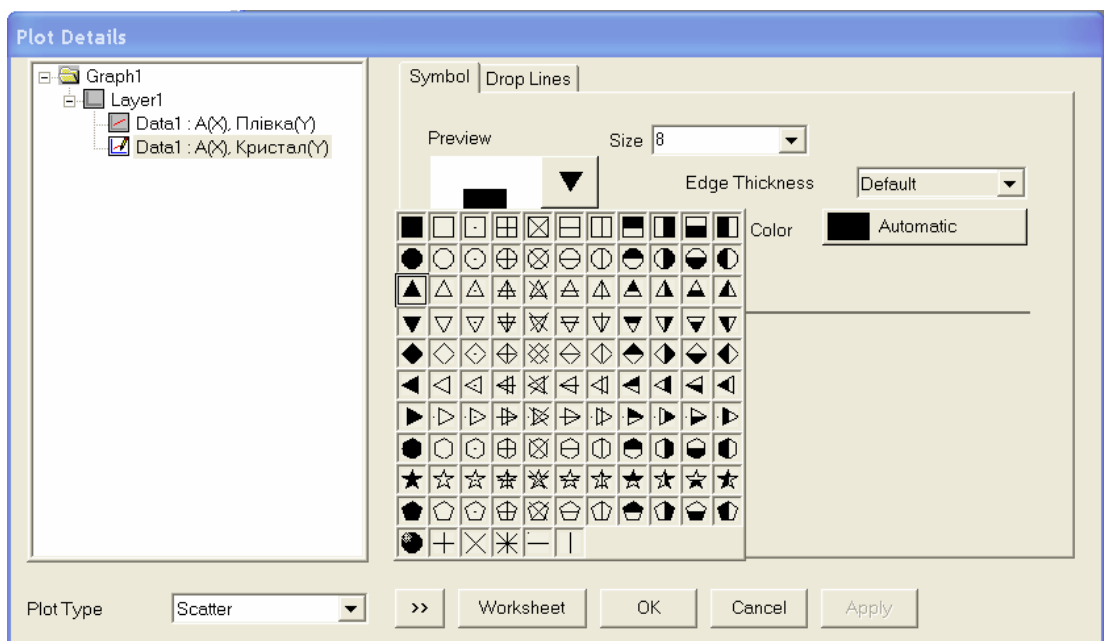


Рис. 2.8. Елементи налаштування символів для графіка

Можна зіставити експериментальні дані, з'єднавши точки графіка з осями за допомогою ліній, які відобразяться після того, як на закладці Drop Lines (Лінії з'єднання) ви встановите перемикачі Horizontal (Горизонтальні) і Vertical (Вертикальні) (рис. 2.9). Параметри цих ліній теж можна міняти.

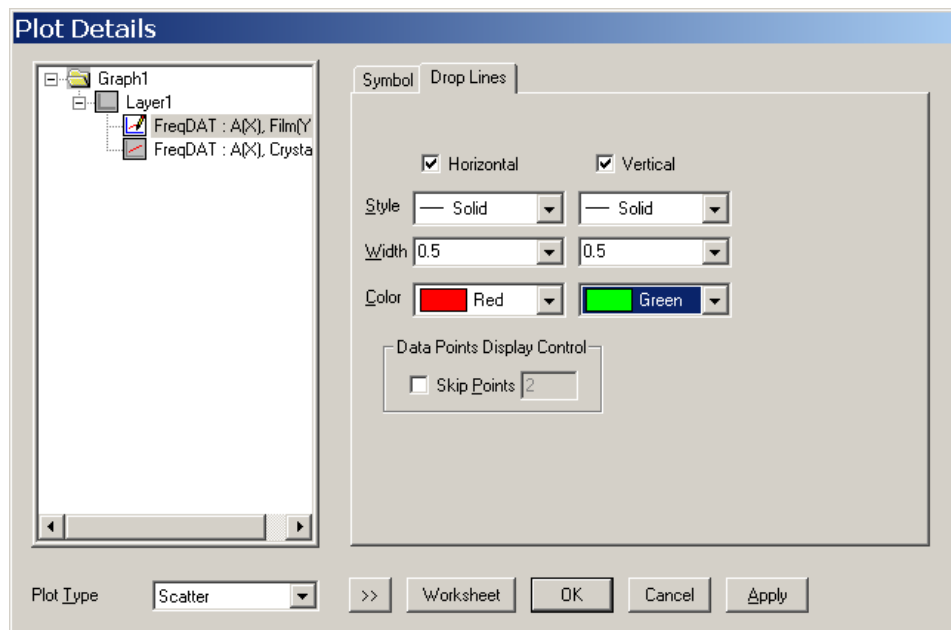


Рис. 2.9. Специфічні налаштування графіка

У оформленні графіка завершальним етапом опишемо, як змінити підписи до координатних осей. Подвійним клацанням по одній з осей викличе діалогове вікно для визначення властивостей осей (Рис. 2.10).

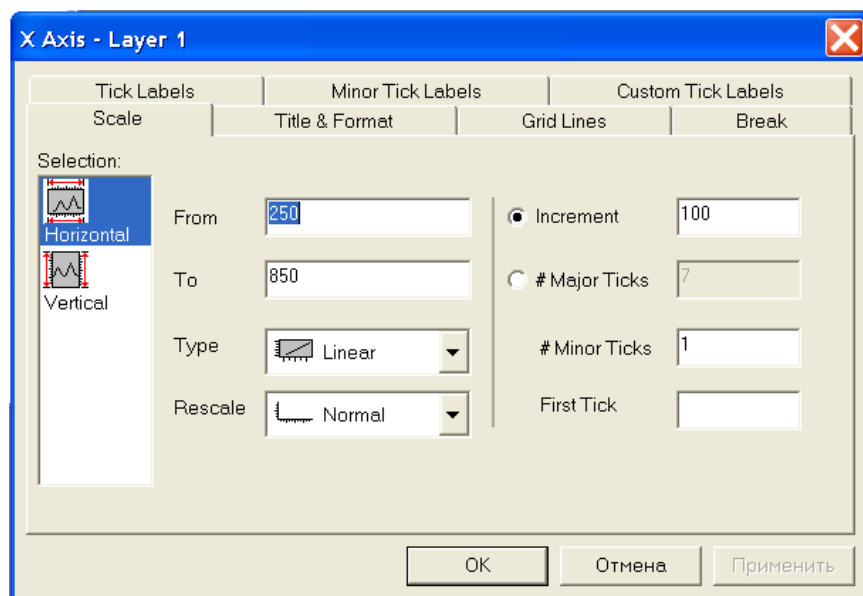


Рис. 2.10. Діалогове вікно для визначення властивостей осей

Розмір шкали осі (як для горизонтальної, так і для вертикальної), що відображається, можна встановити на закладці **Scale** (Шкала) в полях **From** (Від) і **To** (До). На закладці **Title&format** (Заголовок і формат) можна задавати назву осей в полі **Title** (Заголовок). Але в нашому випадку краще скористатися іншим способом.

Наприклад, на пропонованому стандартному підписі до осі Y клацніть правою кнопкою миші, в контекстному меню виберіть пункт Properties (Властивості), з'явиться вікно Text Control (Управління текстом), в якому і привласніть осі нове ім'я, - Ширина(A^0) (рис. 2.11).

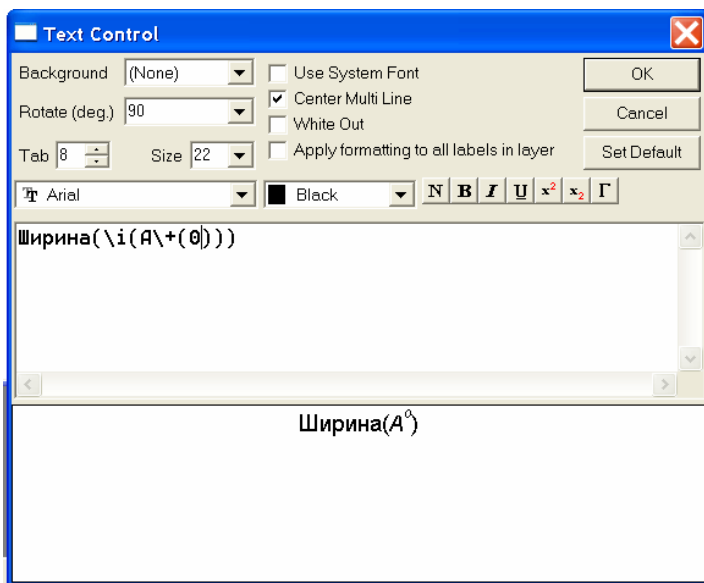


Рис. 2.11. Зміна назви осі

Параметри підписів також можна змінювати. Аналогічним чином замініть стандартний підпис до осі X, привласнивши їй назву Енергія, eV. Для коректного відображення російських букв рекомендується використовувати будь-який русифікований шрифт, тобто шрифт, що має в назві вказівку Cyr (кирилиця), наприклад, Arial Cyr. В результаті виконаної роботи ваш графік повинен мати наступний вигляд (рис. 2.12):

Для відображення на графіці залежності напівширини (Γ) м'якої моди в монокристалі $PbTiO_3$ і полікристалічної плівки від температури за даними, представленими в таблиці на рис.2.1, виконайте дії, описані вище, і отримаєте наступний результат (рис. 2.13):

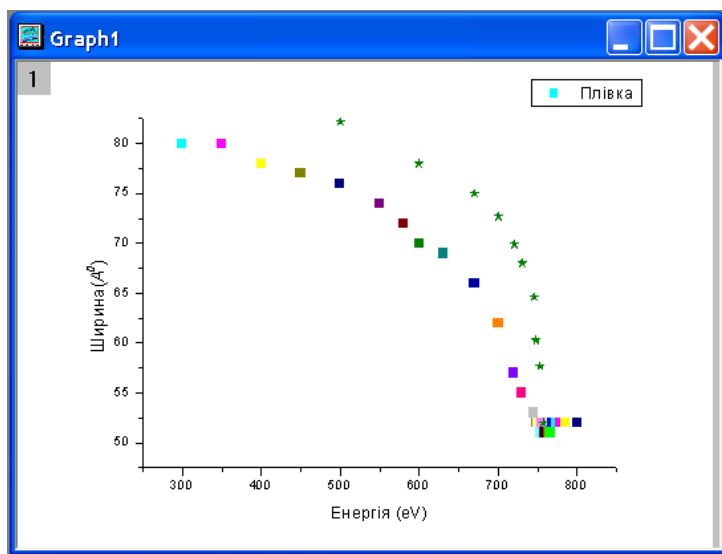


Рис. 2.12. Залежність ширини квантової ями від енергії

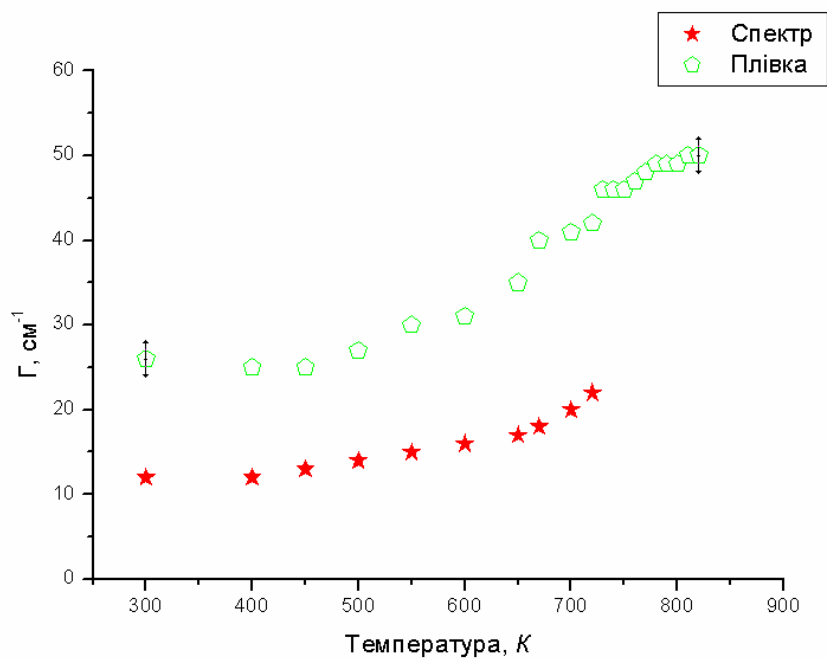


Рис. 2.13. Залежність напівширини м'якої моди від температури

Температурна залежність напівширини (Γ) м'якої моди апроксимується поліномом (2.1):

$$\Gamma = \Gamma_0 + aT + bT^2. \quad (2.1)$$

Для відображення цього полінома на графіці на панелі інструментів в меню Analysis (аналіз) виберіть пункт Non-linear Curve Fit (нелінійна апроксимація) і у випадному списку клацніть Advanced Fitting Tool (розширений інструмент для апроксимації) (рис. 2.14).

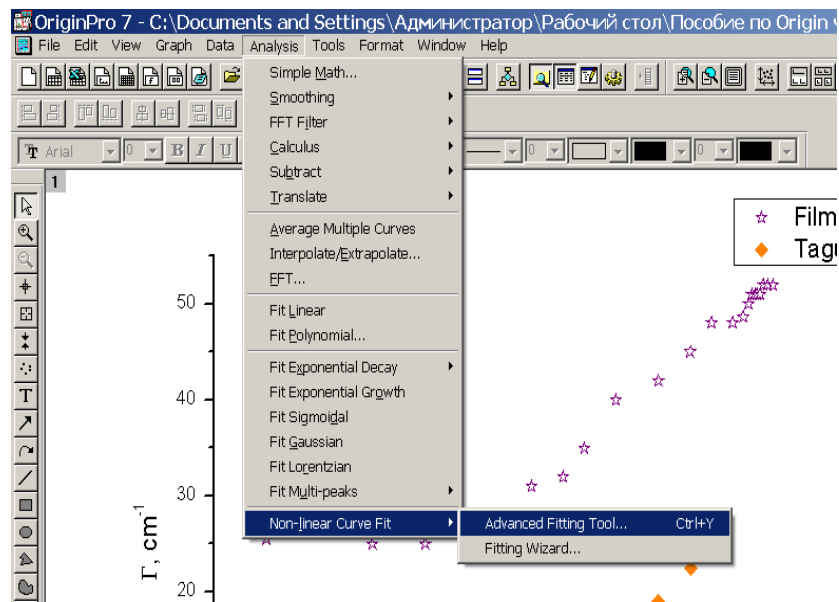


Рис. 2.14. Меню аналізу даних

У вас появиться вікно NonLinear Curve Fitting (рис. 2.15).

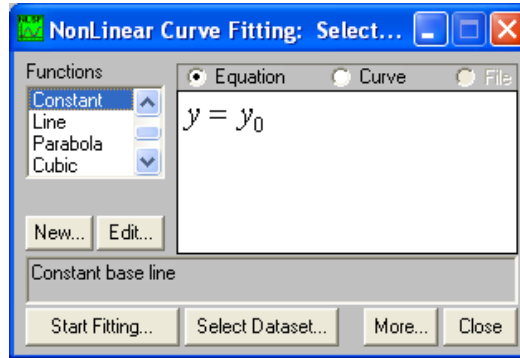


Рис. 2.15. Вікно нелінійної апроксимації

У списку Functions (функції) виберіть поліном 2-го степеня (Parabola), який автоматично відобразиться у вікні формул (рис. 2.16).

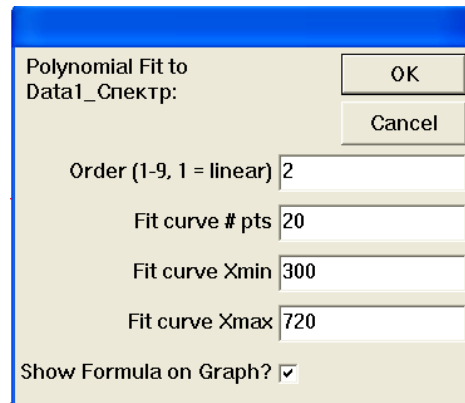


Рис. 2.16. Вибір функції

При натисненні на кнопку **Select Dataset** (вибір набору даних) відбудеться зміна вікна, і в списку **Available Dataset** (доступні набори даних) серед представлених даних, виберіть ті, які відносяться до температурної залежності напівширини (Γ) м'якої моди. Клацніть двічі по одному з необхідних наборів; у списку **Variables** йому привласнюється значення **Dep** (залежний), а значення **Indep** (незалежний) привласнюється автоматично (рис. 2.17).

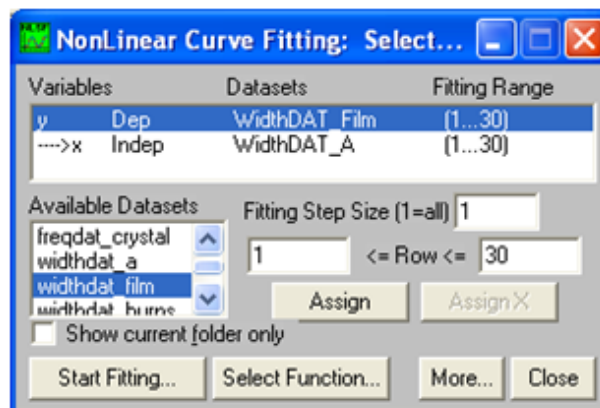


Рис. 2.17. Вибір необхідного набору даних

Після вибору набору даних і підгоночного полінома можна проводити апроксимацію. Для цього клацніть по кнопці **Start Fitting** (почати апроксимацію), знову відбудеться зміна вікна, в якому в полі **Value** представлені значення параметрів полінома (рис. 2.18), а на графіці відобразиться крива (рис. 2.19).

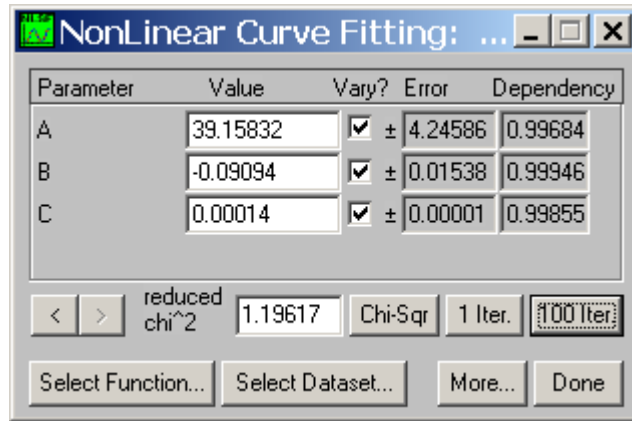


Рис. 2.18. Значення параметрів полінома

Тепер апроксимацію необхідно провести для решти наборів даних. Натисніть знову кнопку **Select Dataset** і виберіть новий набір даних. Потім виберіть функцію, натиснувши кнопку **Select Functions**, і для того, щоб апроксимувалися нові дані, необхідно провести оновлення, натиснувши на кнопку **New** (новий). З'явиться віконце **Attention** (увага), в якому вам потрібно буде підтвердити, що ви дійсно хочете закінчити апроксимацію попереднього набору, натиснувши кнопку **Yes** (так) (рис. 2.20).

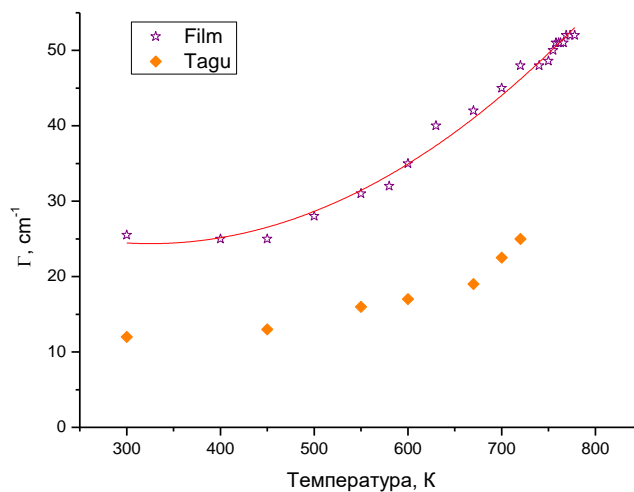


Рис. 2.19. Результат апроксимації поліномом

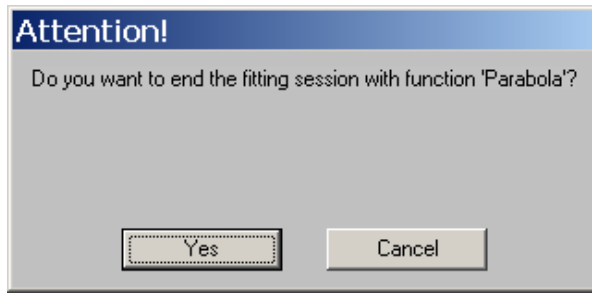


Рис. 2.20. Кнопка для закінчення апроксимації набору

Результат апроксимації представлений на рис. 2.21. Значення параметрів відображаються в протоколі результатів Results Log. У вікні (рис. 2.22), що змінилося, натисніть кнопку **Accept** (прийняти), і лише після цього почніть апроксимацію (**Start Fitting**).

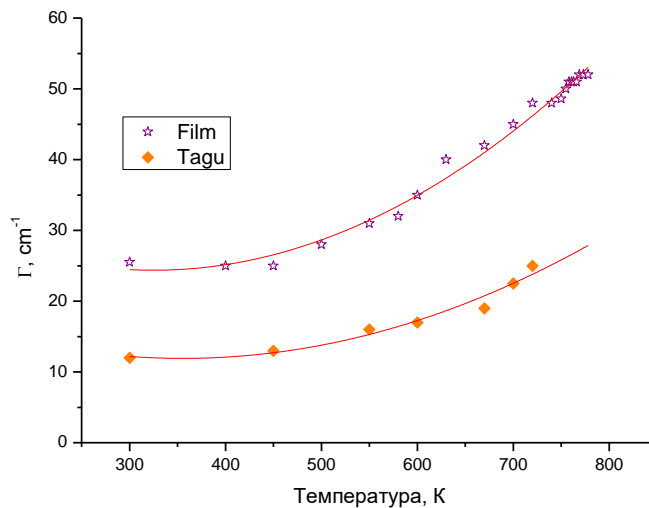


Рис. 2.21. Результат апроксимації другого набору даних

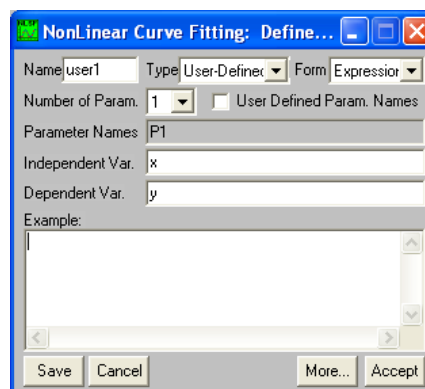


Рис. 2.22. Вікно завершення апроксимації

Параметри апроксимації записуються в протокол результатів (див. нижче).

[24.11.2008 15:01 "/Graph3" (2454428)]

Data: WidthDAT_Film

Model: Parabola

Equation: $y = A + B*x + C*x^2$

Weighting:

y No weighting

Chi²/DoF R²

1.19617 0.9899

Parameter Value Error

A 39.15832 4.24586
B -0.09094 0.01538
C 0.00014 0.00001

[24.11.2008 15:03 "/Graph3" (2454428)]

Data: WidthDAT_Tagu

Model: Parabola

Equation: $y = A + B*x + C*x^2$

Weighting:

y No weighting

Chi²/DoF R²

1.30671 0.96155

Parameter Value Error

A 23.20408 6.34484
B -0.06352 0.02593
C 0.00009 0.00002

В більшості випадків апроксимацію поліномами можна проводити істотно простішим способом, просто вибравши пункт меню **Analysis / Fit Polynomial**.

Вправа(самостійна робота). Проведіть апроксимацію напівширини м'якої моди, використовуючи Analysis / Fit Polynomial.

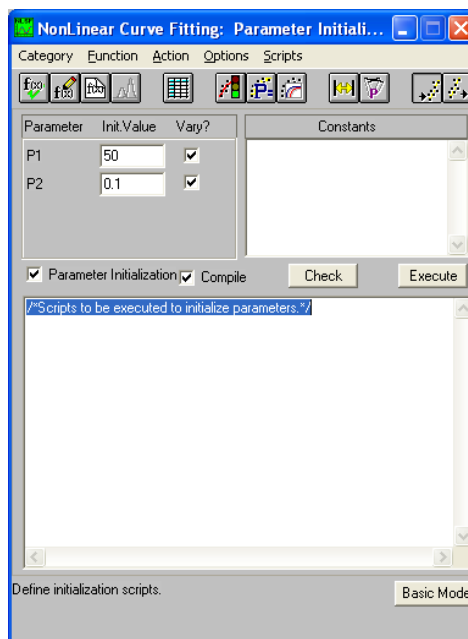


Рис. 2.23. Вікно ініціалізації параметрів

Для всіх наборів даних, що відносяться до температурних залежностей частоти м'якої моди, необхідно провести ті ж дії. Апроксимується дана залежність функцією вигляду

$$v = A \cdot (T_c - T)^\alpha, \quad (2.2)$$

де $T_c = 766$ К для титанату свинцю.

У стандартному наборі пакету Origin, як вже наголошувалося раніше, є величезний список функцій, але іноді виникає необхідність удатися до введення своєї функції. Створити запис можна у вікні Nonlinear Curve Fitting після натиснення на кнопку New (новий). У вікні, що з'явилося, в полі Name (ім'я) задайте ім'я вашої функції, або пакет Origin автоматично привласнить їй ім'я User (користувач). У списку Form (форма) виберіть Y-script. У списку Number of Param. (кількість параметрів) вкажіть, скільки параметрів вам знадобиться при записі нової функції. У нашому випадку кількість параметрів – 2 (A, α), і вони автоматично відображаються в полі Parameter Name (ім'я параметра). Задайте незалежну змінну в полі Independent Var і залежну змінну в полі Dependent Var. А зараз у вікні Example (приклад) задайте вид нової функції

$$y = P1 * (766 - x) ^ P2.$$

Для проведення апроксимації потрібно задати значення параметрів P1 і P2. Натисніть кнопку More (додатково) і в пункті меню Scripts виберіть Parameter Initialization (ініціалізація параметрів). У списку Init.Value задайте значення цих параметрів, поставте галочки в пунктах Parameter Initialization (ініціалізація параметрів) і Compile (компіляція) (рис. 2.23).

Задані значення параметрів P1 і P2 є приблизними, тому під час апроксимації для кращого результату їх можна варіювати, якщо, звичайно, це буде необхідно.

Отриману функцію необхідно зберегти для подальшого використання, вибравши на панелі меню Function (функція) і натиснувши пункт Save (рис. 2.24).

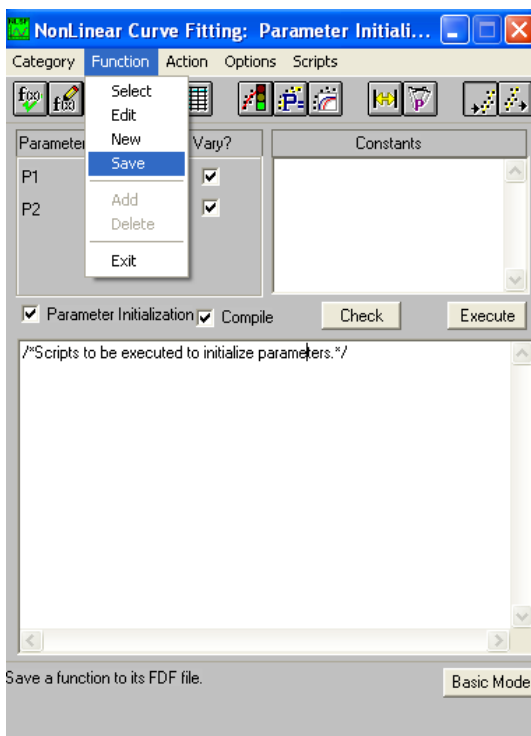


Рис. 2.24. Збереження початкових значень параметрів

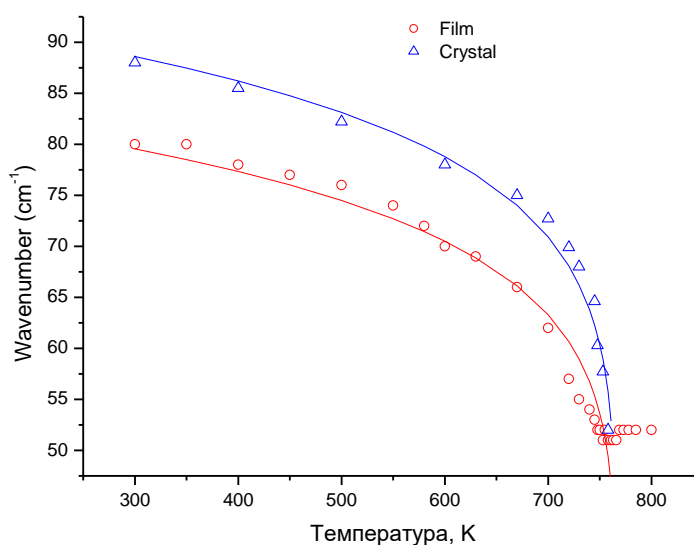


Рис. 2.25. Результат апроксимації функцією вигляду (2.2)

Потім, натиснувши клавішу **Basic Mode** (основний режим), ви повернетесь до первинного вікна. Вибираючи по черзі потрібні набори даних для температурних залежностей частоти м'якої моди, виконаєте апроксимацію. В результаті після відповідного форматування отримаєте графіки, представлені на рис. 2.25.

Параметри апроксимації приведені нижче у вигляді протоколу результатів.

[24.11.2008 13:46 "/Graph1" (2454428)]

Data: FreqDAT_Crystal

Model: user5

Equation: $y = P1*(766-x)^{P2}$

Weighting:

y No weighting

Chi²/DoF R²

3.51163 0.97484

Parameter	Value	Error
P1	44.00888	1.21017
P2	0.1139	0.00586

[24.11.2008 13:47 "/Graph1" (2454428)]

Data: FreqDAT_Film

Model: user5

Equation: $y = P1*(766-x)^{P2}$

Weighting:

y No weighting

Chi²/DoF R²

625.0644 -3.98671

Parameter	Value	Error
P1	38.74399	10.82818
P2	0.11711	0.05912

Вправа (самостійна робота). Виконати апроксимацію експериментальних даних за формулою, використаній в [7] для переходів першого роду, коли частота м'якої моди не досягає нульового значення при $T_c : \nu = \nu_0 + A(T_c - T)^\alpha$, де в якості ν_0 слід узяти значення частоти, що досягається при T_c (у нашому випадку це 51).

3.3 Зсув однотипних графіків експериментальних спектрів

У файлі **Bstat77k** наведена таблиця, яка складається з 5 колонок: колонка А – частота, а решта 4 колонки – інтенсивності експериментальних спектрів (титанату барію, твердого розчину 70% Ва і 30 % Sr, твердого розчину 50% Ва і 50% Sr, твердого розчину 30% Ва і 70 % Sr відповідно).

Спектри зняті за однакових умов експерименту і частотні шкали у них збігаються. Якщо побудувати всі ці графіки, використовуючи навикі відображення даних, на одному і тому ж малюнку, то вийде, що всі 4 спектри практично накладуться один на одного. І навіть використовуючи різні кольори, нелегко зрозуміти, що до чого відноситься (рис. 3.1).

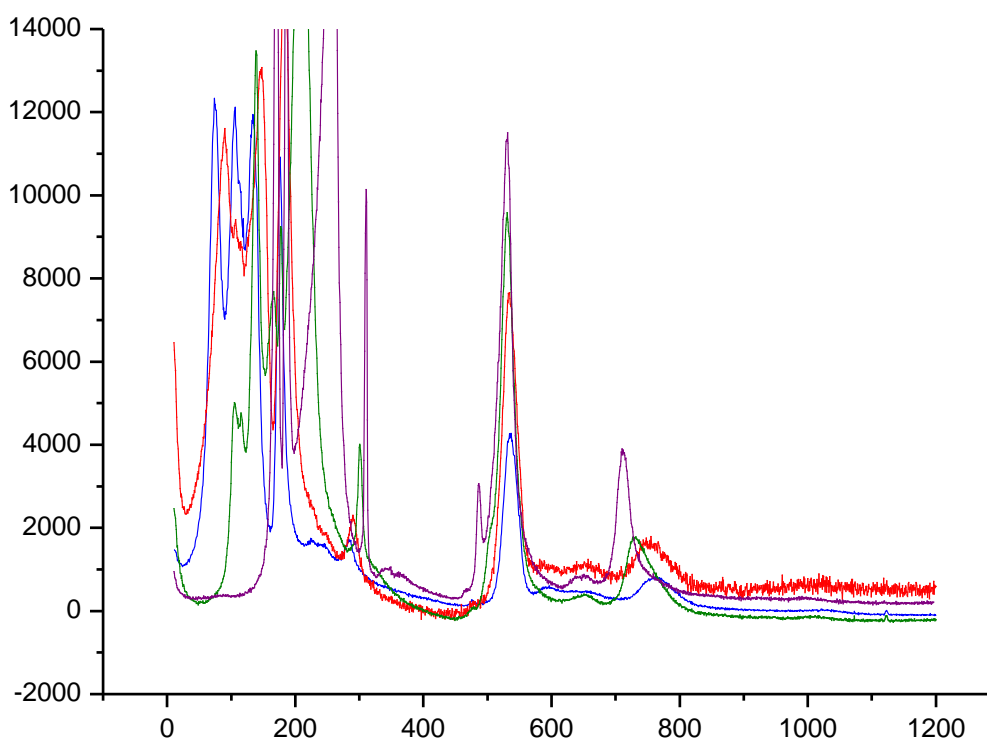


Рис. 3.1. Чотири однотипних експериментальні графіки на одному рисунку

Тому зручно було б спектри зсунути. У пакеті **Origin** для цього є спеціальна функція **Waterfall** (водопад). Виділивши всі колонки таблиці, на панелі інструментів в меню **Plot** (графік) виберіть пункт **Special Line/ Symbol** (спеціальні лінії/ символи).

У випадковому списку знайдіть функцію **Waterfall** (водопад) (рис.3.2), і як тільки ви клацнете по ній, всі спектри, які раніше були накладеними один на одного, виявляться автоматично зміщеними по осях X і Y (рис. 3.3).

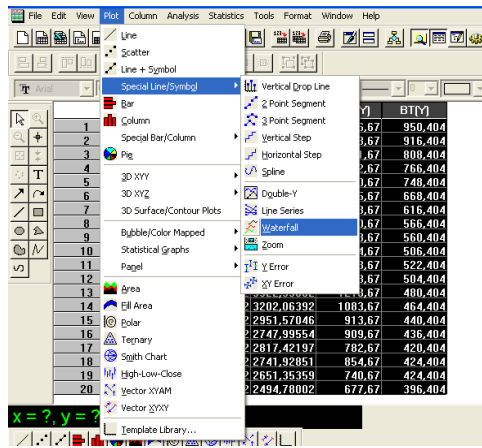


Рис. 3.2. Вибір типу графіка Waterfall

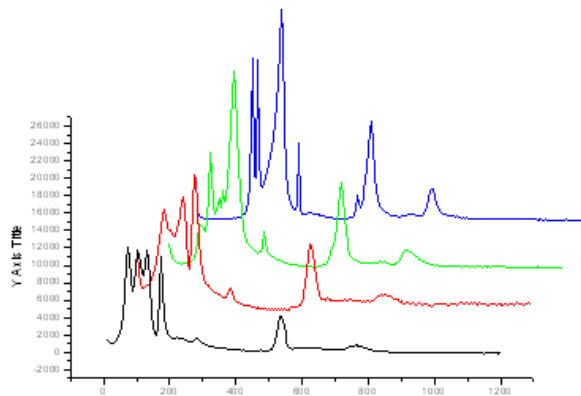


Рис. 3.3. Вікно опцій Waterfall

Так як частотні шкали спектрів збігаються, то логічно було б змістити графіки тільки по осі Y. У функції Waterfall (водопад) є деякі опції, які при зсуві графіків автоматично відкриваються у вигляді вузької панелі Waterfall Options у верхній частині рисунка (рис. 3.3). Це наступні опції: **Offset Amount** (величина зсуву), **Reverse Order** (зворотний порядок), **Fill Area** (заливка). Для зсуву графіків тільки по осі Y скористайтесь опцією **Offset Amount** (величина зсуву). Після натиснення на цю кнопку у вас з'явиться вікно (рис. 3.4), в якому в списку **XY offset** (зсув по XY) виберіть стан **Enable** (допустимий), в списку **Total Y offset (%)** (зсув по осі Y в %) встановіть значення, відповідатиме майбутньому зсуву графіків, а в списку **Total X offset (%)** (зсув по осі X в %) задайте значення 0. Після чого натисніть **OK**.

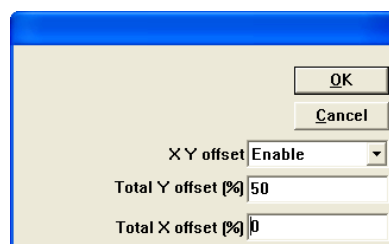


Рис. 3.4. Налаштування параметрів зсуву графіків

В результаті графік прийме наступний вигляд (див. рис. 3.5).

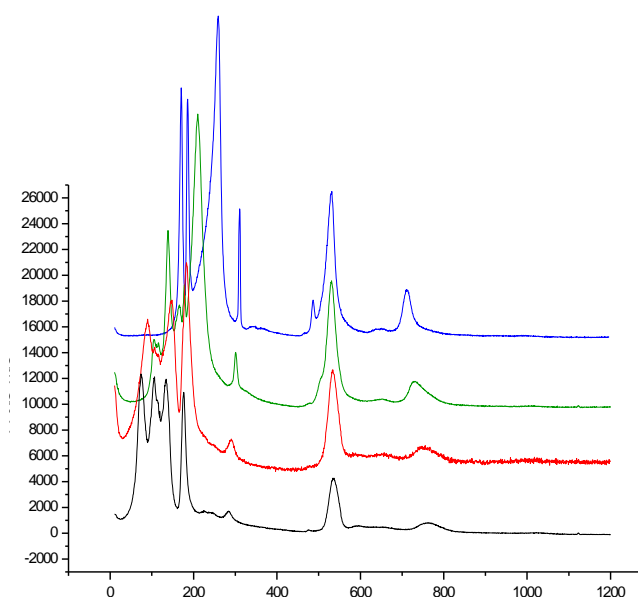


Рис. 3. 5. Графіки, зміщені вздовж осі ординат

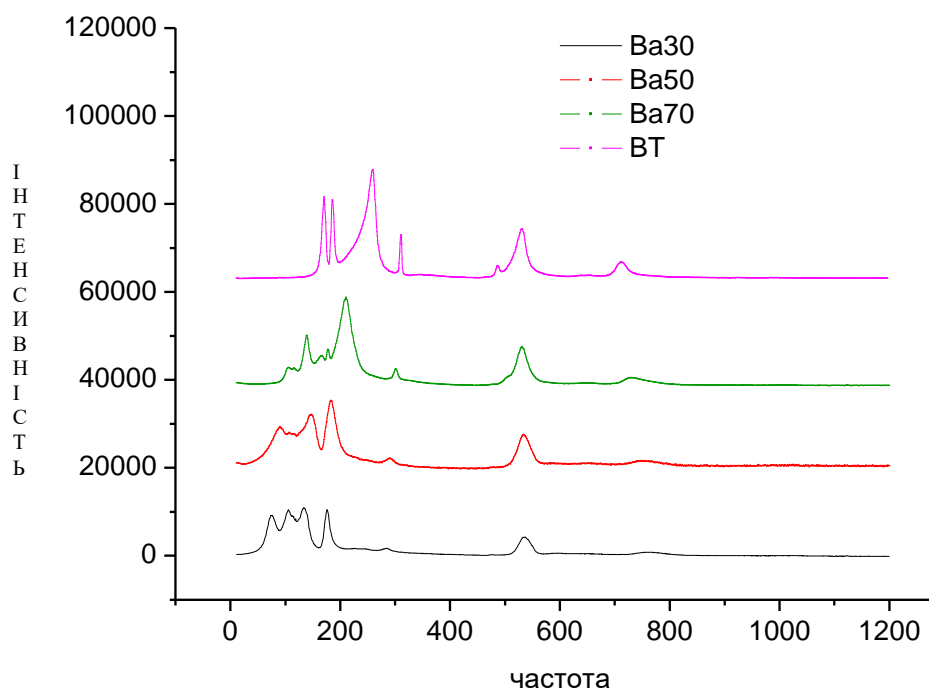


Рис. 3.6. Результат зсуву графіків вручну

Спектри можна зсувати і вручну. В цьому випадку до спектру додається постійний фон. При такому підході величину зсуву можна зробити різною. Іноді це зручно. Для цього значення колонки В залиште постійними, а до решти колонок, використовуючи опцію **Set Column Values** (задати значення колонки), додайте числа залежно від величини зсуву. В результаті вийде наступний графік (рис. 3.6):

3.4 Коректування спектрів комбінаційного розсіяння

У файлі Ptoat750k міститься експериментальний спектр титанату свинцю при температурі 750 К. Для початку необхідно імпортувати цей файл в таблицю. Колонка А – частота, колонка В – інтенсивність експериментального спектру. Дійсна інтенсивність ліній в спектрах комбінаційного розсіяння (КРС) знаходиться за формулою:

$$I_{\text{експ}} = (n(\omega, T) + 1) I_{\text{іст}}, \quad (4.1)$$

де

$$n(\omega, T) = (e^{\hbar\omega/kT} - 1)^{-1} \quad (4.2)$$

– фактор температурної заселеності. Температура вимірюється в Кельвінах. Якщо частота береться в сантиметрах в мінус першому (см^{-1}), то $\hbar/k = 1,4388$.

Проведемо корекцію спектру на температурний фактор заселеності. Для цього додайте нову колонку С, клацнувши правою кнопкою миші і вибравши пункт Add New Column (додати новий стовпець) (рис. 4.1).

У даній колонці записуватимемо дійсну інтенсивність ліній в спектрах, тобто проведемо їх коректування. Виділіть колонку С і, викликавши контекстне меню, натиснувши праву кнопку миші, виберіть пункт Set Column Values (встановити значення стовпця). У вікні (рис. 4.2), що з'явилося, введіть формулу для дійсної інтенсивності $I_{\text{іст}}$.

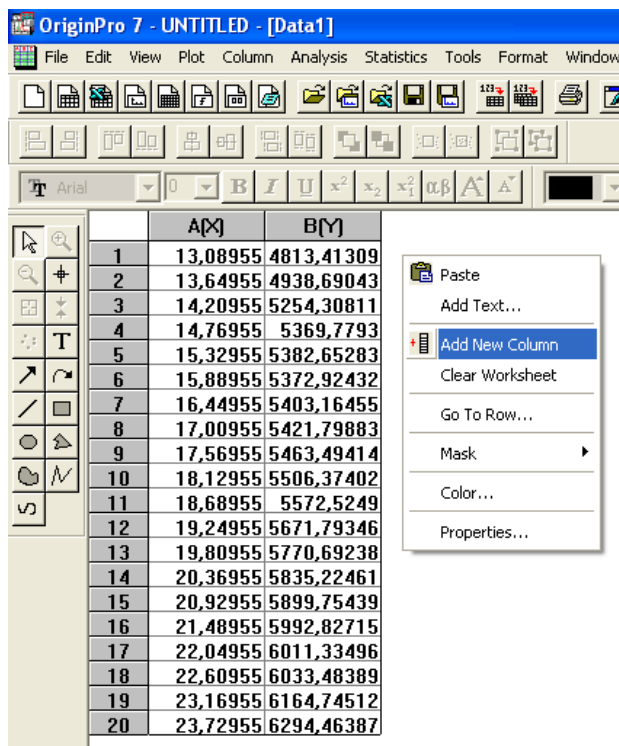


Рис. 4.1. Додавання нового стовпця до таблиці

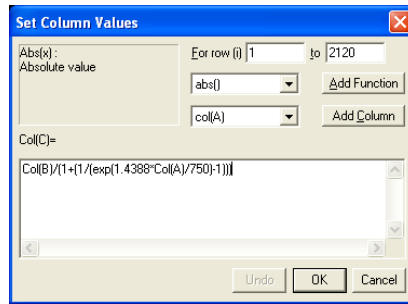


Рис. 4.2. Введення формули для обчислення значень в стовпці таблиці

Підтвердивши введену формулу натисненням кнопки ОК, колонка С автоматично заповниться значеннями дійсної інтенсивності. Це зручно, оскільки в таблиці збереглися і експериментальний і скоректований спектри (таблиця 4.1).

Таблиця 4.1.

	А[°]	В[γ]	С[γ]
1	13,08955	4813,41309	119,3646
2	13,64955	4938,69043	127,64258
3	14,20955	5254,30811	141,29573
4	14,76955	5369,7793	150,01155
5	15,32955	5382,65283	155,98922
6	15,88955	5372,92432	161,30916
7	16,44955	5403,16455	167,84439
8	17,00955	5421,79883	174,06394
9	17,56955	5463,49414	181,08053
10	18,12955	5506,37402	188,21811
11	18,68955	5572,5249	196,25811
12	19,24955	5671,79346	205,62973
13	19,80955	5770,69238	215,18679
14	20,36955	5835,22461	223,62497
15	20,92955	5899,75439	232,18992
16	21,48955	5992,82715	242,03431
17	22,04955	6011,33496	248,97564
18	22,60955	6033,48389	256,10299
19	23,16955	6164,74512	268,01293
20	23,72955	6294,46387	280,11717

Зобразивши спектри на графіці, ви повинні отримати наступне (див. рис.4.3):

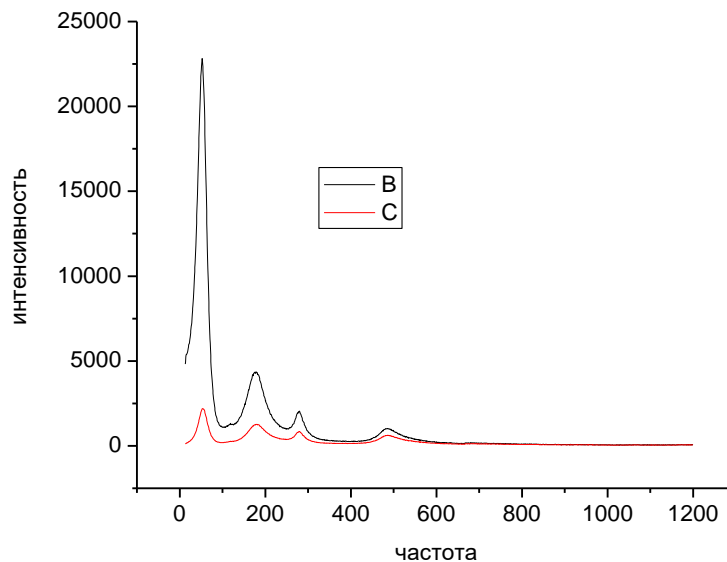


Рис. 4.3. Початковий спектр і спектр, скоректований з урахуванням температурного фактора заселеності

3.5 Прості операції із спектрами

У цьому розділі на прикладі даних з файлу Pzframesh ми розглянемо можливі прості операції із спектрами. Спершу відобразить на графіці спектр гетероструктури, який містить спектр SrRuO_3 і $\text{Pb}(\text{Tizr})\text{O}_3$ (колонка FILMSRO). Для того, щоб із спектру відняти лінійний фон, скористайтеся меню Tools (інструменти), в якому виберіть пункт Baseline (базова лінія) (рис. 5.1). З'явиться вікно Baseline (рис. 5.2).

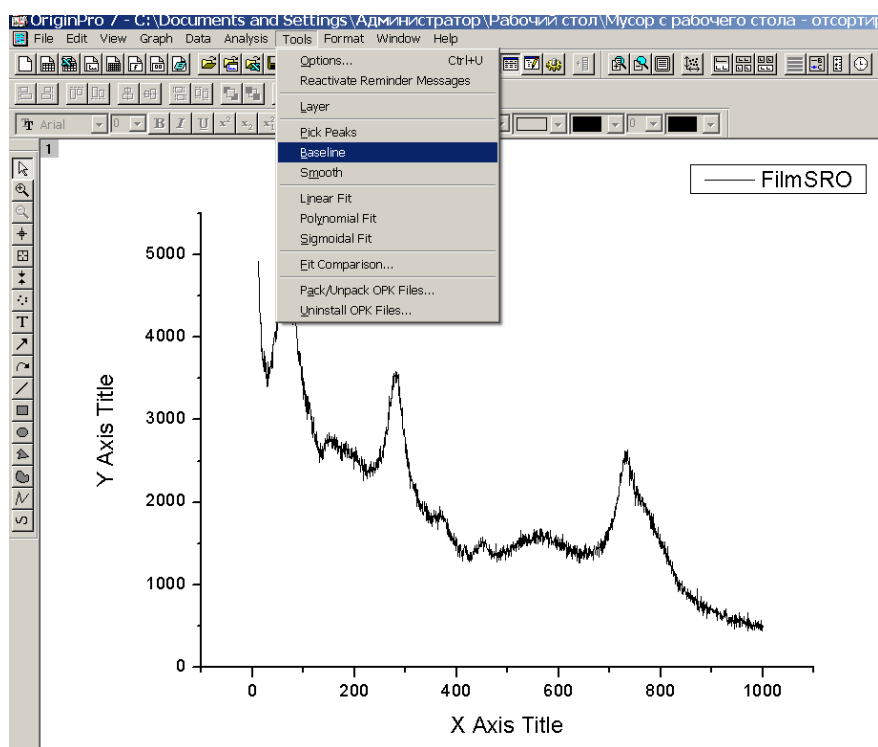


Рис. 5.1. Вибір пункту меню Baseline

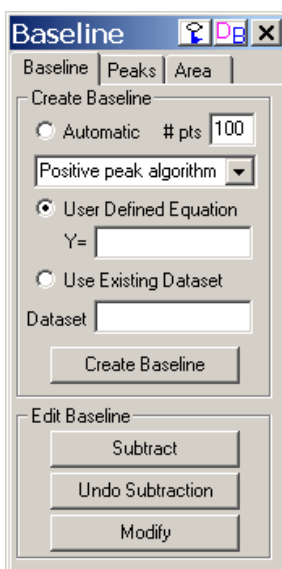


Рис. 5.2. Вікно для задання параметрів базовій лінії

У цьому вікні на закладці **Baseline** в полі **Create Baseline** (створити базову лінію) в рядку **User Defined Equation** (рівняння, яке визначається користувачем) задайте значення фону, який відніматимете. Після цього створіть цю базову лінію, натиснувши на кнопку **Create Baseline** (створити базову лінію). На графіці

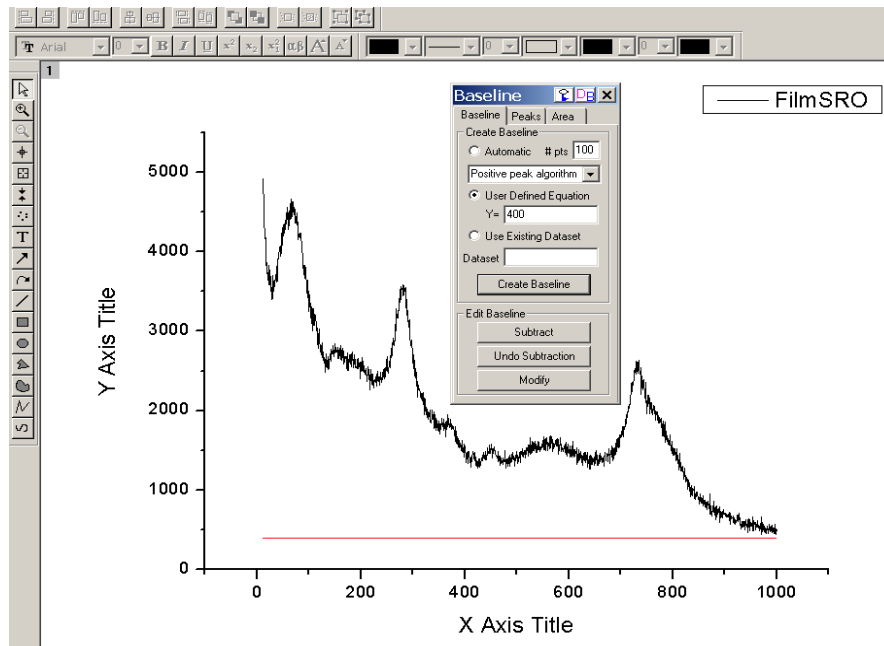


Рис. 5.3. Задання базовій лінії у вигляді константи

відобразиться ця сама лінія (рис. 5.3).

Тепер, щоб відняти із спектру вказаний вами фон, потрібно натиснути на кнопку **Subtract** (відняти) (рис. 5.4), відобразиться результат віднімання (зверніть увагу на те, що графік цілком опустився вниз на 400 одиниць).

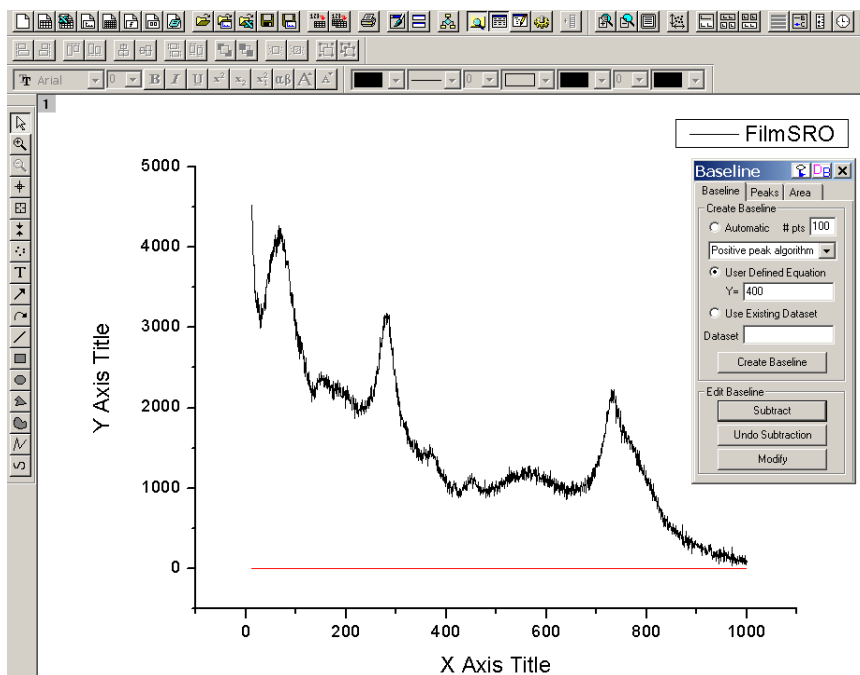


Рис. 5.4. Результат віднімання із спектру постійного фону

Для того, щоб відняти лінійний похилий фон з початкового спектру, потрібно в рядку **User Defined Equation** задати значення функції. Наприклад, якщо ввести функцію $2900 - 4 \cdot X$, то після натиснення на кнопку **Create Baseline** базова лінія виглядатиме таким чином (див. рис. 5.5).

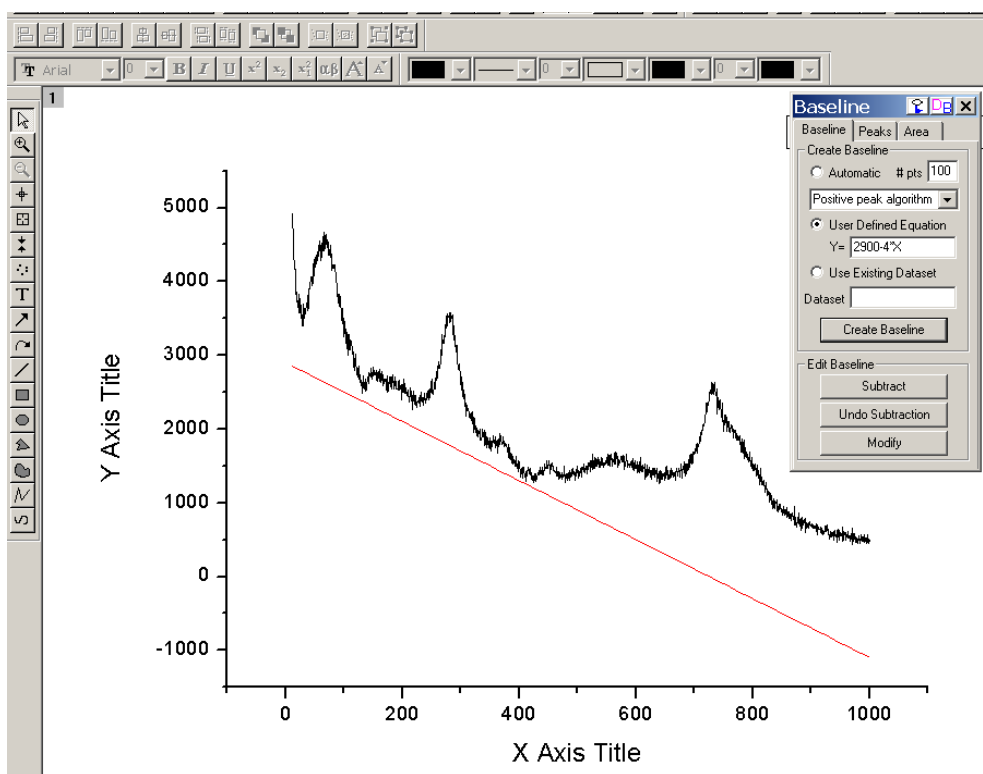


Рис. 5.5. Задання базовій лінії у вигляді лінійної функції

Результат віднімання представлений на рис. 5.6.

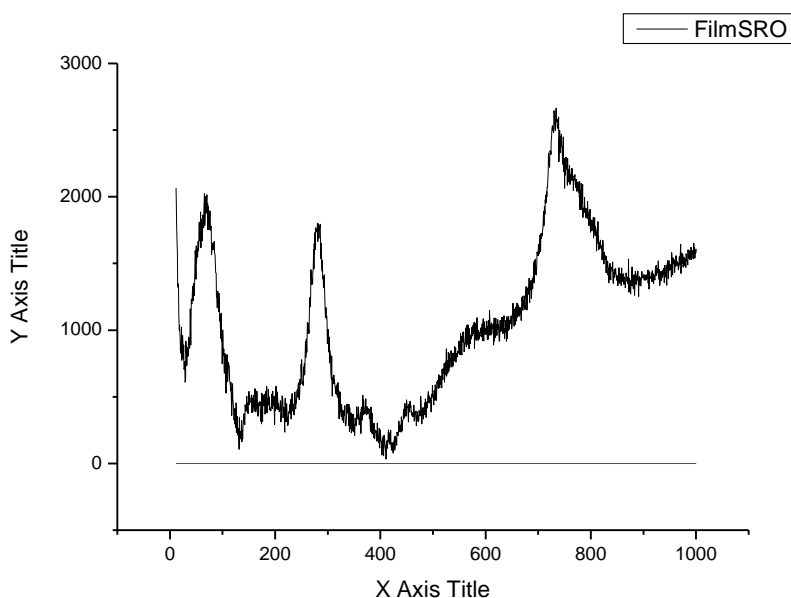


Рис. 5.6. Результат віднімання із спектру лінійного фону

Також із спектру можна віднімати і нелінійний фон. Виконавши аналогічні дії, задайте нелінійну функцію, наприклад

$$1/(0,00022 + X \cdot 0,0000007) - 800.$$

Вид базової лінії представлений на рис. 5.7., а результат віднімання - на рис.5.8.

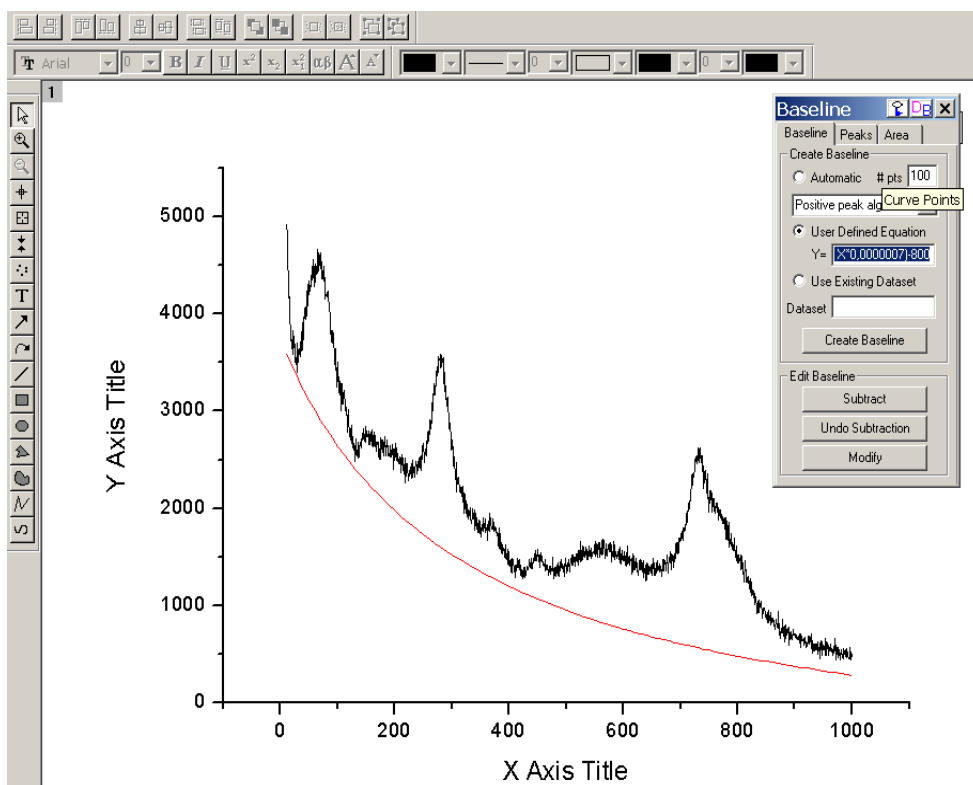


Рис. 5.7. Задання базової лінії у вигляді нелінійної функції

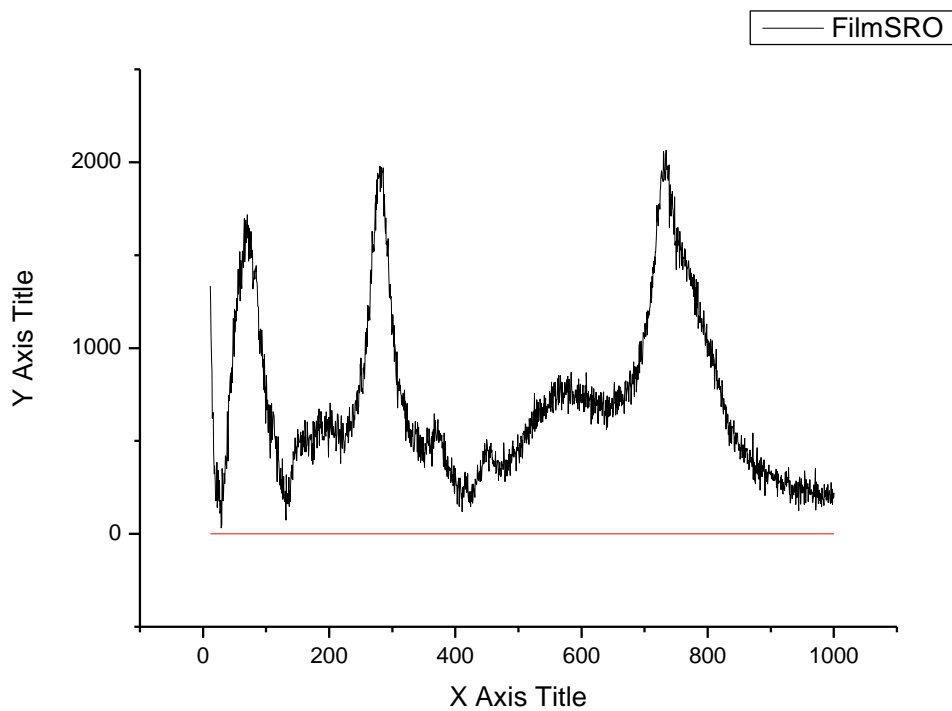


Рис. 5.8. Результат віднімання із спектру нелінійного фону

Зверніть увагу, що при відніманні фону змінюється не тільки графік, але і початкова таблиця даних!

Відняти із спектру лінійний фон можна і іншим способом, скориставшись меню Analysis/ Subtract/ Straight Line (аналіз/ віднімання/ пряма лінія) (рис.5.9).

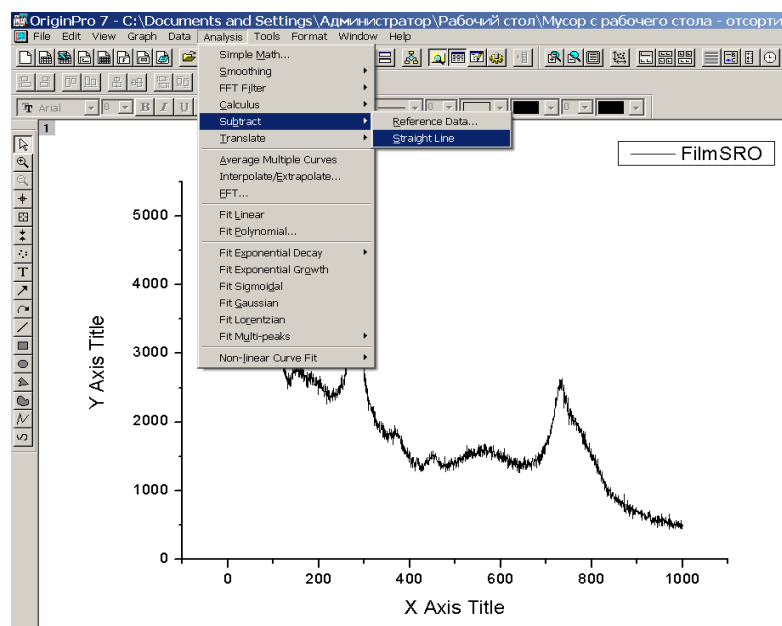


Рис. 5.9. Вибір пункту меню Analysis/ Subtract/ Straight Line

Після вибору даної опції курсор придбає вид хрестика (рис. 5.10), за допомогою якого ви задаєте початок і кінець прямої лінії, натискаючи клавішу Enter. Лінія з'явиться на дуже короткий проміжок часу, і автоматично відобразиться результат віднімання лінійного фону (рис.5.11).

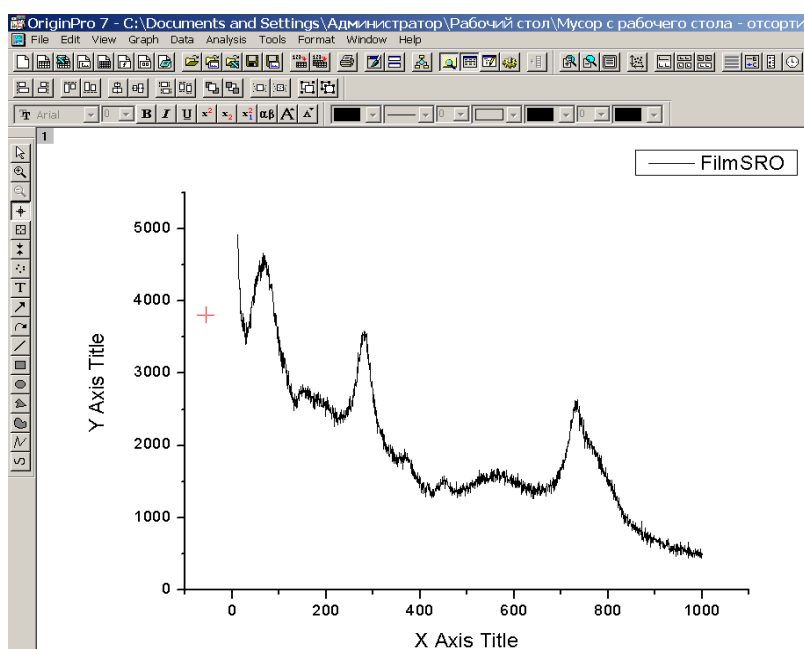


Рис. 5.10. Результат віднімання із спектру лінійного фону

Окрім віднімання фонів, можна віднімати спектри один з одного. Як приклад розглянемо той же файл Pztramesh. Відобразить на графіці спектр Sr₂UO₃ (колонка SRO) і спектр гетероструктури, що містить спектр Sr₂UO₃ і Pb(TiZr)O₃ (колонка FILMSRO). Скористайтеся меню Analysis/ Subtract/ Reference Data (аналіз/ віднімання/ посилання на дані) (рис. 5.12).

У вас повинне з'явитися діалогове вікно Math on/ between Data Set (математичні дії з наборами даних) (рис. 5.13), в якому в списку Available Data (доступні дані) виберіть і перемістіть бажані набори даних в поля Y1 і Y2, використовуючи кнопку =>. Вкажіть у віконці operator (операція) необхідну математичну дію з представлених в списку (+, -, *, /, ^) Після натиснення на кнопку ОК на графіці відобразиться результат віднімання і графік, що віднімається (рис.5.14).

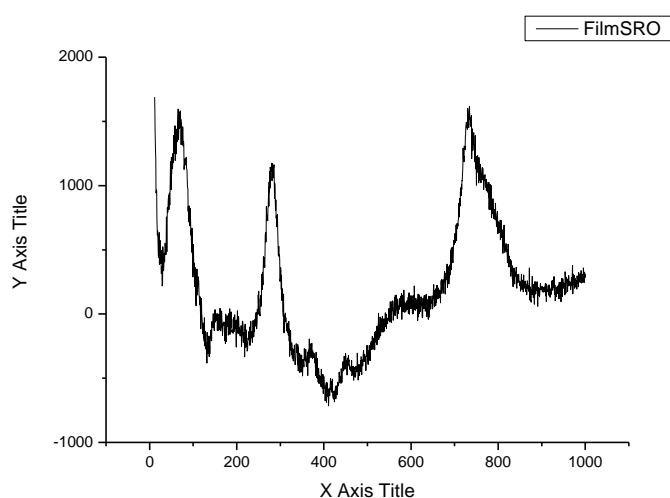


Рис. 5.11. Результат віднімання лінійного фону з використанням меню Analysis/ Subtract/ Straight Line

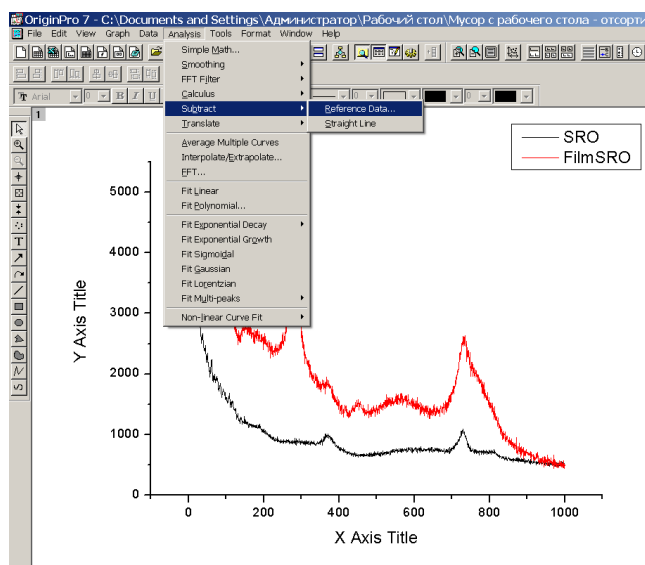


Рис. 5.12. Вибір пункту меню Analysis/ Subtract/ Reference Data

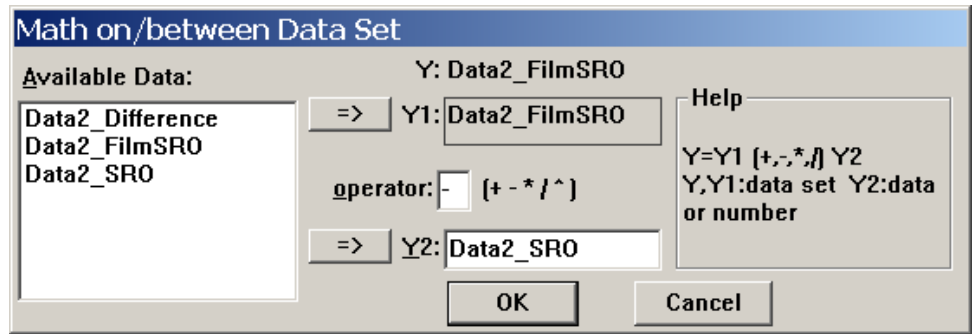


Рис. 5.13. Вікно математичних дій із спектрами

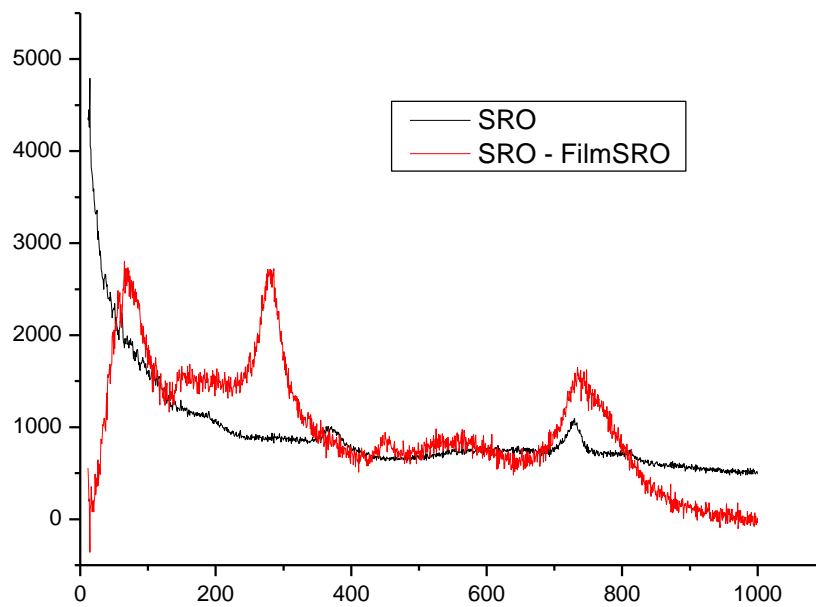


Рис. 5.14. Результат віднімання спектрів

3.6 Згладжування спектрів з метою усунення шуму

Дано спектр гетероструктури: на підкладку SrTiO_3 нанесена плівка SrRuO_3 , яка є провідним електродом і повністю екранує спектр підкладки. На електрод нанесена плівка сегнетоелектрика $\text{Pb}(\text{TiZr})\text{O}_3$ товщиною 150 нм (файл Pztramesh).

У колонці A представлені значення частоти, колонка SRO відповідає спектру SrRuO_3 на аналогічній підкладці, але ще до нанесення плівки $\text{Pb}(\text{TiZr})\text{O}_3$, в колонці film+SRO представлений спектр гетероструктури, який містить спектр SrTiO_3 і $\text{Pb}(\text{TiZr})\text{O}_3$. Колонка Difference – це різниця між спектрами – із спектру гетероструктури віднімаємо спектр електроду і отримуємо спектр тільки $\text{Pb}(\text{TiZr})\text{O}_3$. Спектр Difference дійсно дуже близький до спектру $\text{Pb}(\text{TiZr})\text{O}_3$. Отримані графіки представлені на рис. 6.1.

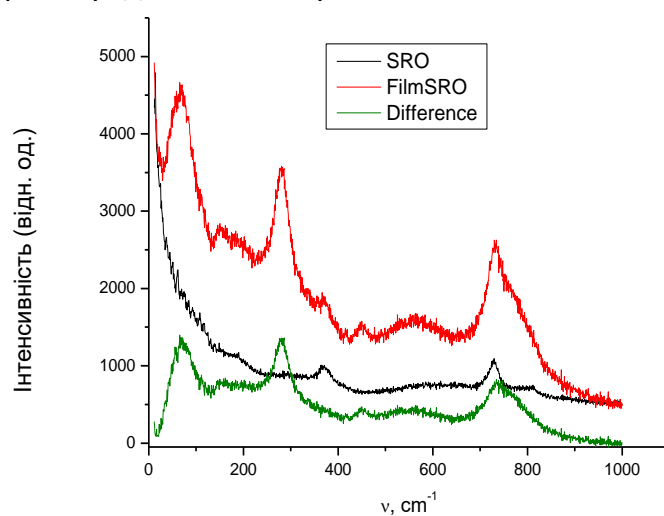


Рис. 6.1. Спектри з помітним тепловим шумом

Можна провести згладжування, тобто усунення теплового шуму. Для цього скористайтеся на панелі інструментів меню **Analysis** (аналіз) і у випадному списку виберіть **Smoothing/ FFT Filter** (згладжування/ фільтрація Фур'є) (рис. 6.2).

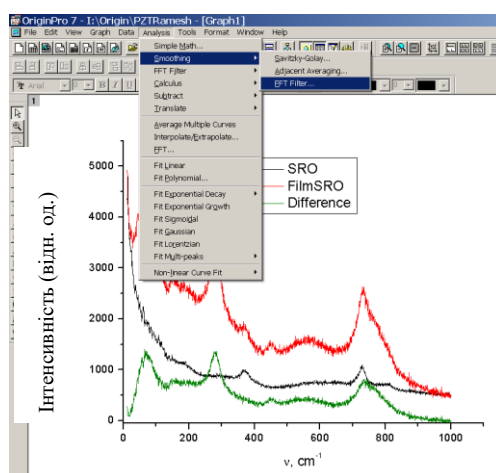


Рис. 6.2. Вибір способу згладжування даних

Повинне з'явитися вікно Smoothing (рис. 6.3), в якому в списку Enter Number of Points (введіть кількість точок) пакет Origin за замовчуванням припускає число точок 5. Визначити оптимальне число точок для згладжування можна тільки дослідним шляхом. Якщо графік виходить дуже «кошлатим», то число точок треба збільшити. Якщо на графіці зникають деякі важливі деталі, то

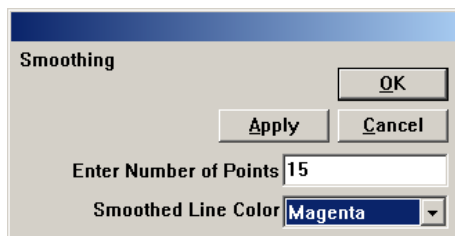


Рис. 6.3. Параметри згладжування

число точок треба зменшити. У списку Smoothed Line Color (колір згладжуючої лінії) виберіть колір кривої, натисніть Apply (застосувати) і OK.

За умовчанням пакет Origin проводить згладжування для колонки SRO, тобто для першого набору даних, відповідних спектру SrRuO₃ (рис. 6.4).

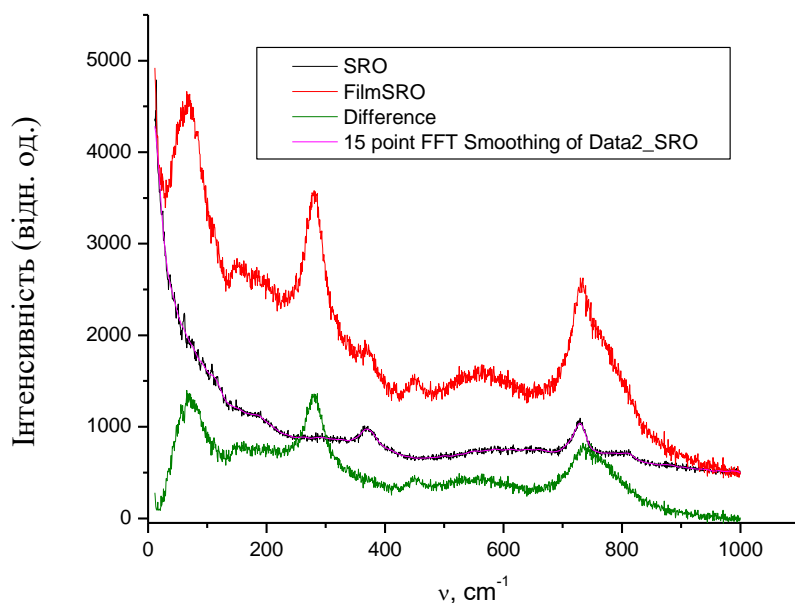


Рис. 6.4. Результати згладжування

Для вибору інших наборів даних клацніть правою кнопкою на іконці шару (сірий квадратик у верхньому лівому кутку), і в запропонованому списку відзначте галочкою необхідні вам дані (рис. 6.5).

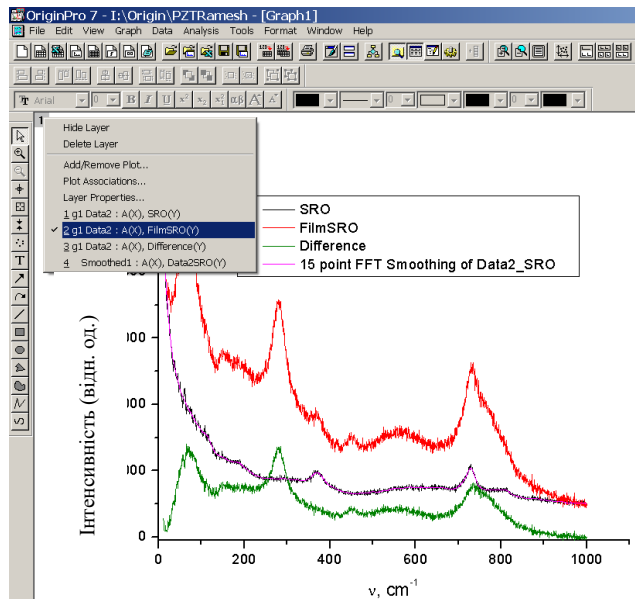


Рис. 6.5. Выбор набора данных для сглаживания

Згладжування можна провести і іншим способом: у меню **Analysis/Smoothing** (аналіз/ згладжування) скористайтеся функцією **Adjacent Averaging** (усереднювання по декількох точках). З'явиться таке ж вікно (рис. 6.3), як і при використанні **FFT Filter** (фільтрація Фурье). Виконавши необхідні дії, ви отримаєте результат, схожий на результат, зображений на рис. 6.6.

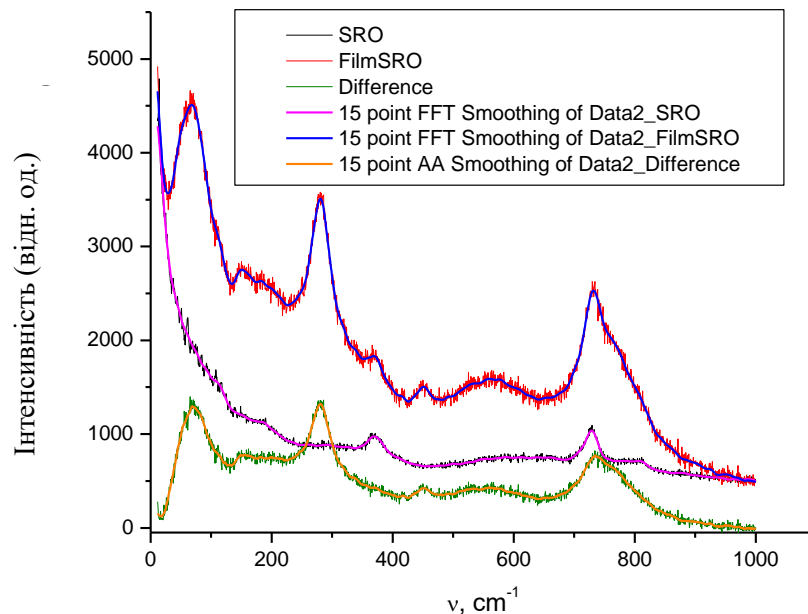


Рис. 6.6. Результат згладжування всіх спектрів методом Фурье-фільтрації

Відмінність полягає в тому, що в легенді відображається та опція, яку ви використовували для згладжування: для фільтрації Фурье - аббревіатура **FFT**, для усереднювання по декількох суміжних точках - **AA** (рис. 6.7).

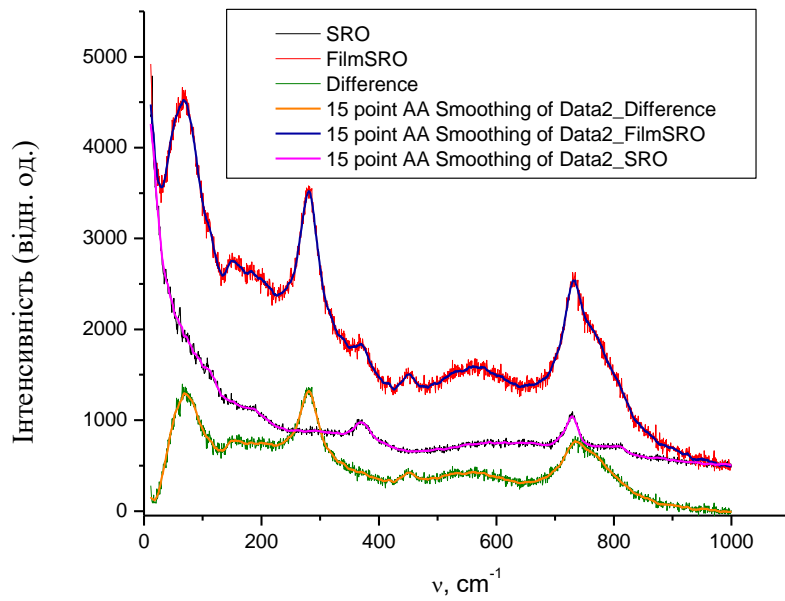


Рис. 6.7. Результат згладжування всіх спектрів методом усереднювання

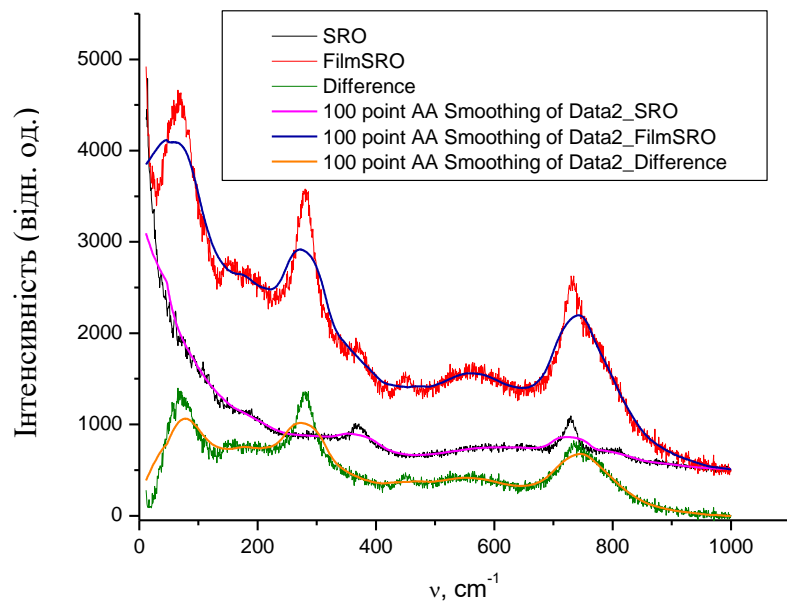


Рис. 6.8. Приклад неправильного вибору кількості точок для усереднювання: втрачені важливі деталі спектру

3.7 Апроксимація спектрів лоренціанами

У файлі D16fig3rus приведені експериментальні значення спектру, які ми використовуватимемо для демонстрації можливості пакету Origin апроксимувати спектр набором лоренціанів

$$y = y_0 + \frac{2A}{\pi} \frac{w}{4(x - x_c)^2 + w^2},$$

де A - інтегральна інтенсивність піку, x_c - частота максимуму, w - напівширина, y_0 - зсув.

Для початку необхідно провести коректування спектру на температурний фактор. Додавши до таблиці нову колонку і виділивши її, у вікні **Set Column Values** (встановити значення стовпця) введіть формулу (7.1), після чого в новій колонці з'являться значення скоректованого спектру. Відобразьте отриманий спектр на графіці у вигляді **Line** (лінія). Тепер в меню **Analysis** (аналіз) виберіть пункт **Fit Multi-peaks/ Lorentzian** (апроксимація функцією з декількома максимумами / лоренціан) (рис. 7.1).

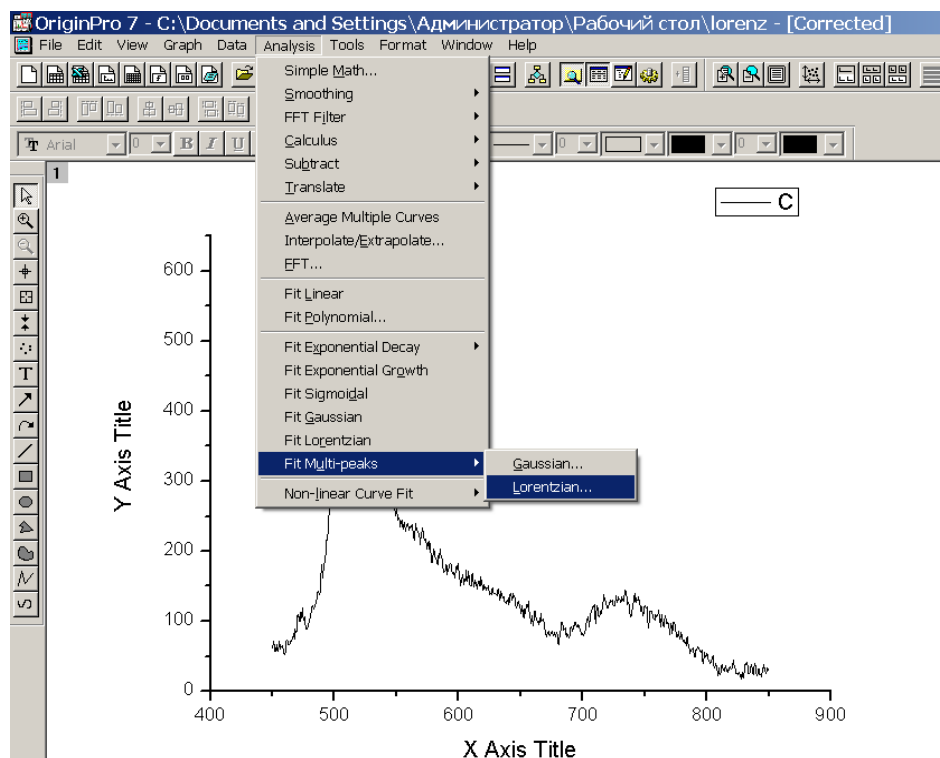


Рис. 7.1. Вибір режиму апроксимації функцією Лоренца

На екрані з'явиться вікно, в якому в списку **Number of Peaks** вам потрібно буде вказати кількість піків, - б і підтвердити цю кількість натисненням кнопки **OK** (рис. 7.2).

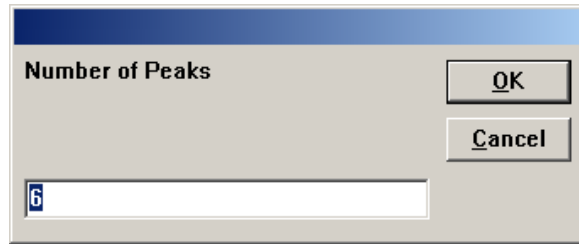


Рис. 7.2. Введення числа піків

У вікні, що змінилося, в списку **Initial half width estimate** (початкова оцінка напівширини) за умовчанням буде запропоноване значення напівширини кривої, яке потрібно також підтвердити натисненням кнопки **OK** (рис. 7.3).

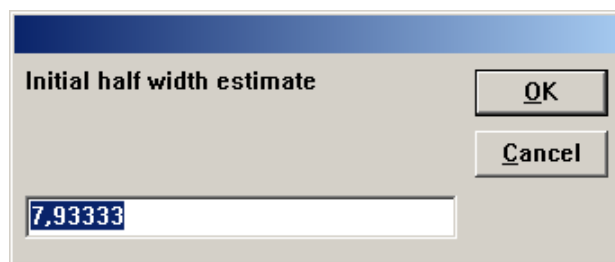


Рис. 7.3. Введення початкової оцінки напівширини піку

Потім курсором у вигляді хрестика відзначити всі ці піки на спектрі. Фіксація положення максимуму відбувається при натисненні на клавіші **Enter** (рис.7.4).

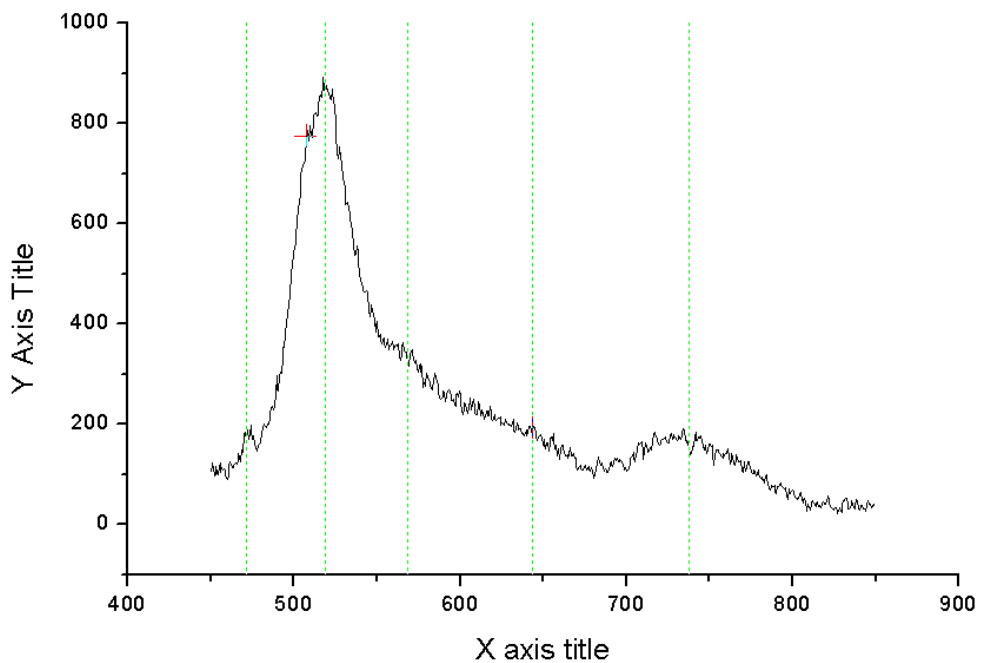


Рис. 7.4. Графічне введення положення максимумів на графіці спектру

Після вказування останнього піку на графіці відобразиться апроксимуюча лінія і 6 лоренціанів, які використовувалися для підгонки спектру (рис. 7.5). У протоколі результатів Results Log будуть записані всі значення параметрів піків.

Lorentz(6) fit to Data1_C:

Chi²/DoF 74,23194

R² 0,99503

Peak	Area	Center	Width	Height
1	15495	739,06	88,554	111,40
2	22049	520,57	32,641	430,05
3	3797,9	505,50	15,791	153,11
4	156,56	471,62	4,2640	23,375
5	20069	564,22	86,666	147,42
6	8930,4	628,71	76,767	74,059

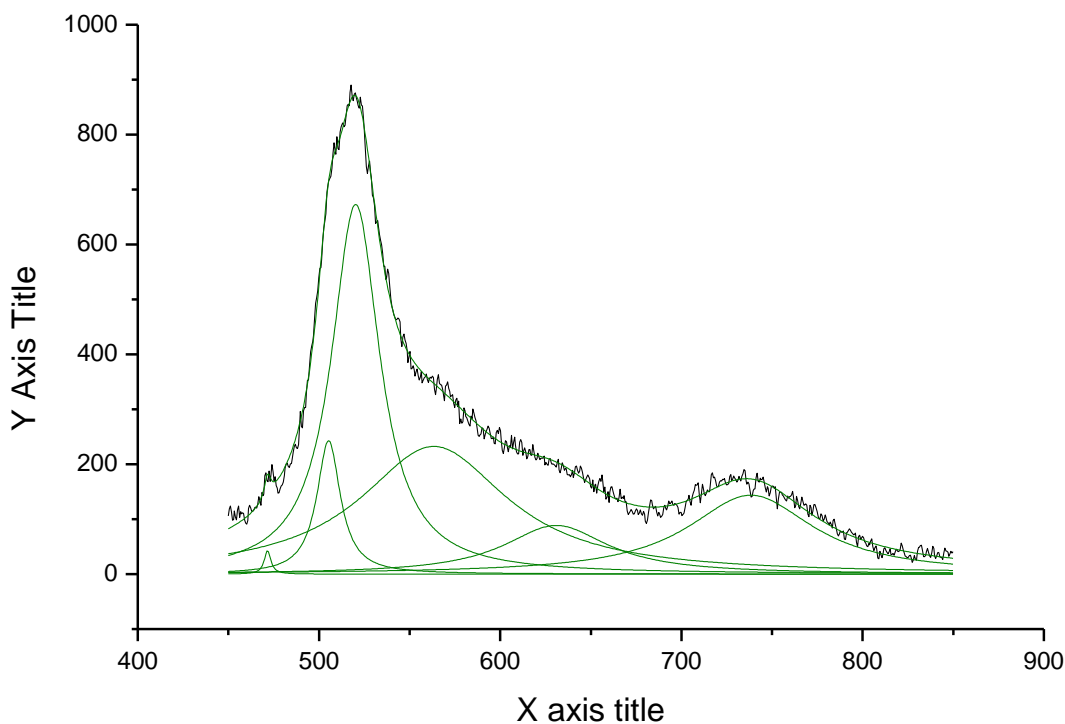


Рис. 7.5. Результат апроксимації спектру набором лоренціанів

Параметри мають зміст: area (A) – інтегральна інтенсивність піку, center (x_c) – частота максимуму, width (w) – напівширина, height $\left(\frac{2A}{\pi w}\right)$ – амплітуда.

Апроксимацію спектру лоренціанами можна провести і за допомогою майстра апроксимацій NLSF Wizard, який викликається з пункту меню Analysis/non-linear Curve Fit/fitting Wizard. На етапі вибору даних Select Data серед запропонованих даних як залежна змінна в списку Dependent Variable можна вибрати потрібний набір даних вручну, заздалегідь встановивши прапорець в пункт Select Dataset Manually Незалежна змінна (Indep. Var.) встановлюється за умовчанням. У цьому ж вікні в списку Independent Variable Range (діапазон незалежної змінної) ви можете вказати значення діапазону, для якого проводитиметься апроксимація, а також в списку Data Display Options поміняти параметри даних, що відображаються (рис. 7.6). Перехід до наступного етапу здійснюється натисненням кнопки Next (далі).

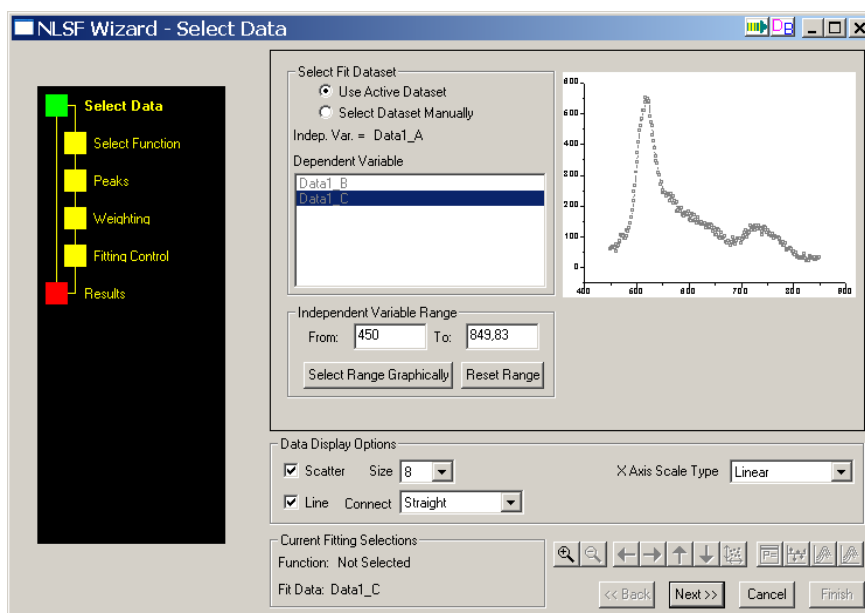


Рис. 7.6. Вибір набору даних

На етапі вибору функції Select Function вам пропонується безліч різних категорій Category, серед яких виберіть Spectroscopy (спектроскопія), при цьому в списку функцій Function автоматично відображаються всі функції, що

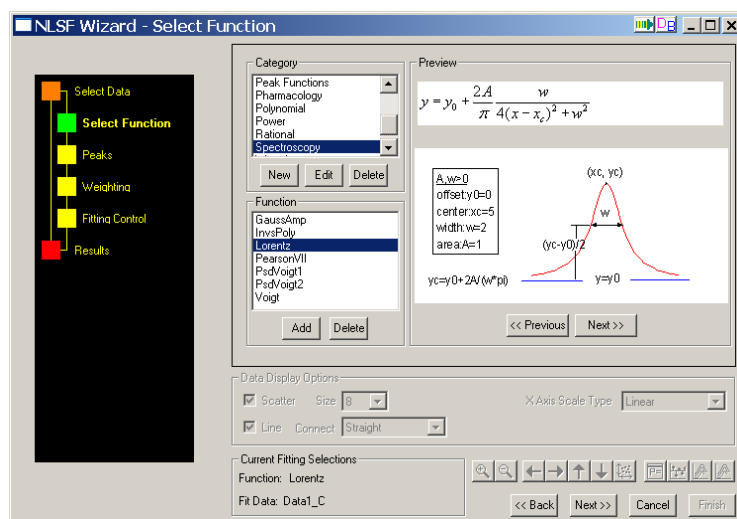


Рис. 7.7. Выбор аппроксимирующей функции

відносяться до даної категорії. Виберіть функцію Lorentz. У вікні Preview (перегляд) представлені формула і зовнішній вигляд даної функції (рис. 7.7).

На кроці Peaks (піки) встановите прапорець в списку Multiple Peaks, вкажіть число піків, після цього натисніть на кнопку Pick Peaks і відзначте їх на графіці за допомогою курсора у вигляді хрестика, натискаючи Enter. У вас з'являться вертикальні прямі, що проходять через списи (рис. 7.8). Після натиснення на кнопку Next (далі) майстер апроксимацій переходить до наступного

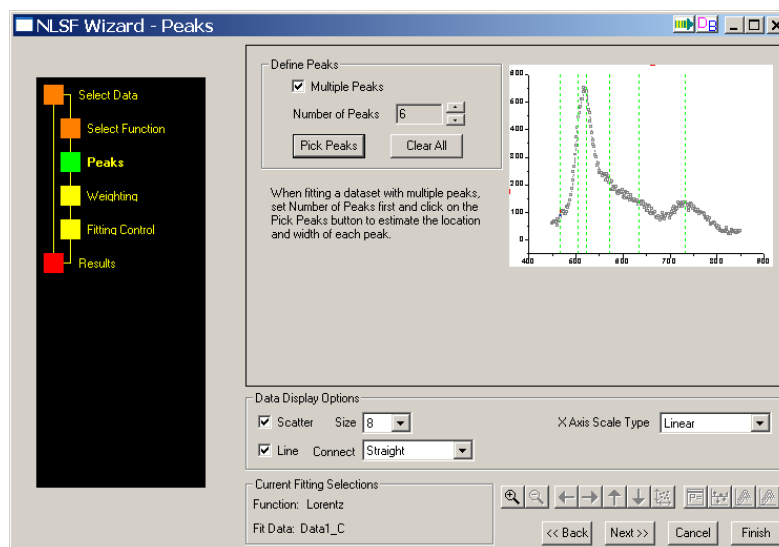


Рис. 7.8. Вказівка положення піків на графіці

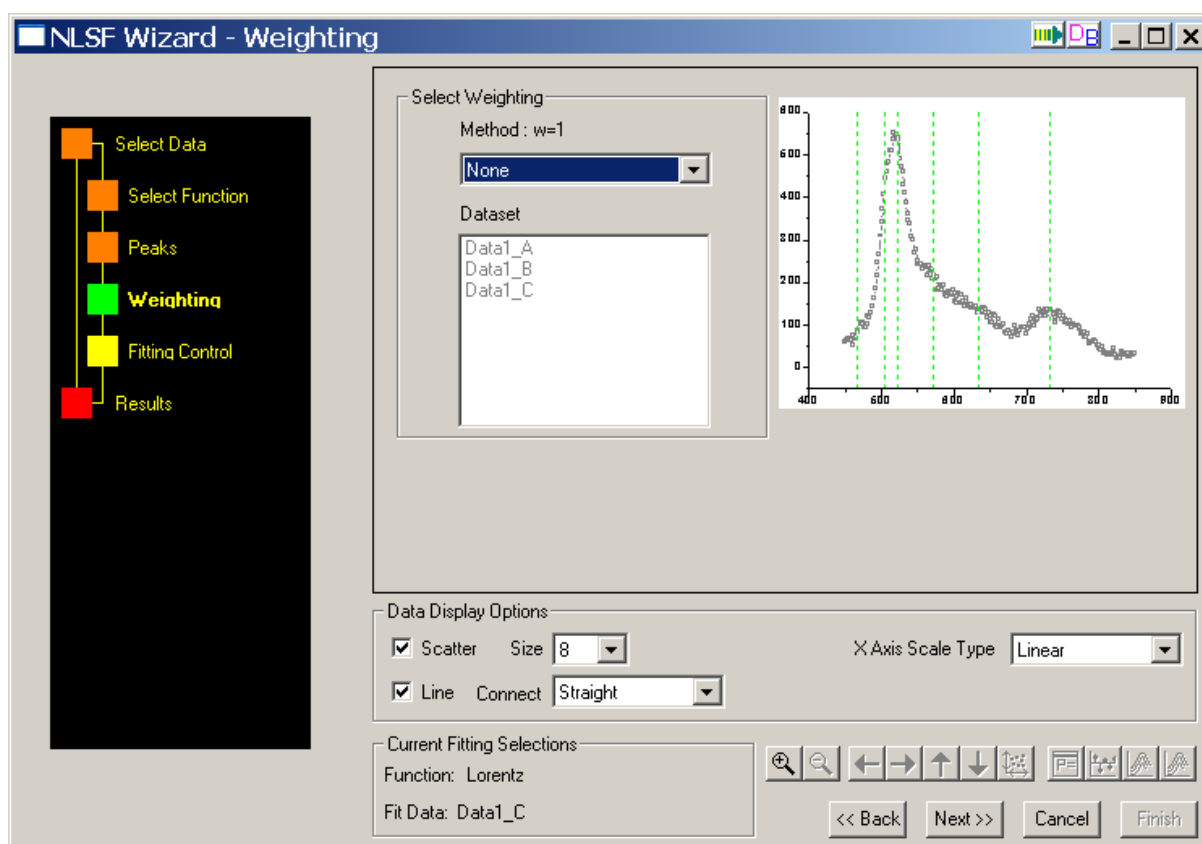


Рис. 7.9. Вибір способу обліку експериментальних даних

етапу і пропонує врахувати ваги даних (рис. 7.9). Ми виберемо варіант None (без урахування вагів), пропонований за умовчанням.

Після натиснення на кнопку **Next** (далі) відбувається перехід до наступного етапу **Fitting Control** (управління апроксимацією), на якому проводиться апроксимуюча лінія, і якщо апроксимація пройшла не дуже добре, то доведеться самим ввести деякі параметри, клацнувши по кнопці **Parameter Display** в правому нижньому кутку (рис. 7.10). З'явиться вікно **Parameter** (параметри) (рис. 7.11), в якому, швидше за все, доведеться міняти значення x_i і w_i . У колонці **Fixed** потрібно поставити галочок напроти параметрів, які можна зафіксувати, потім

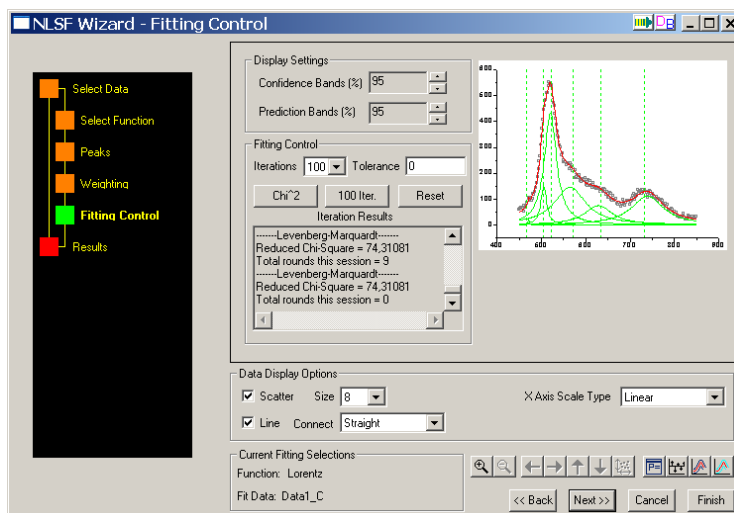


Рис. 7.10 Управління апроксимацією

руками набрати передбачувані значення x_i і w_i .

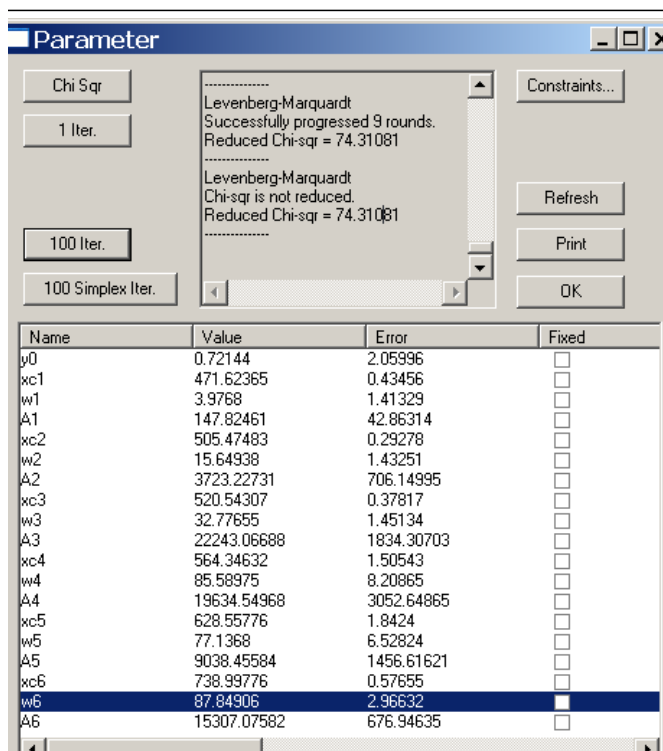


Рис. 7.11. Параметри апроксимації

Після того, як ви підберете параметри, натисніть кнопку 100 Iter. (100 ітерацій), апроксимуюча лінія «ляже» на початковий спектр. Тепер можна переходити до завершуючого етапу Results (результати) (рис. 7.12), де після

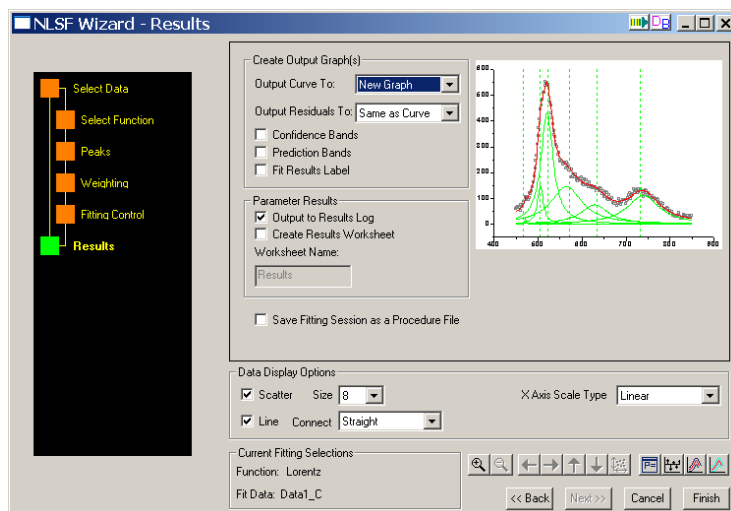


Рис. 7.12. Результат апроксимації

натиснення кнопки Finish (готово) на графіці відобразяться апроксимуюча лінія з шести лоренціанами.

Під основним графіком з'явиться графік, що демонструє відхилення

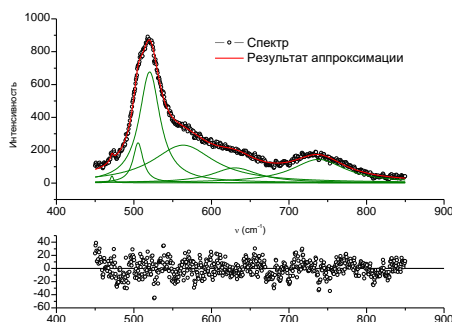


Рис. 7.13. Результат апроксимації і відхилення експериментальних даних від апроксимуючої кривої

експериментальних даних від апроксимуючої кривої (рис. 7.13).

Якщо вам потрібно апроксимувати лише певну ділянку спектру, то це теж можна зробити за допомогою майстра апроксимацій, вказавши лише необхідний діапазон незалежної змінної (див. вище). Заданий діапазон відобразиться на графіці у вигляді стрілок на кінцях відрізування після натиснення на кнопку Select Range Graphically (вибрати діапазон графічно) (рис. 7.14).

Частіше спектри апроксимуються не лоренціанами, а функціями осциляторів із загасанням. Спектр зазвичай апроксимується набором N адитивних осциляторів за формулою (7.1):

$$I(\omega, T) = (n(\omega, T) + 1) \left[\sum_{i=1}^N \frac{A_i \Gamma_{0i} \omega_{0i}^2 \omega}{(\omega_{0i}^2 - \omega^2)^2 + \Gamma_{0i}^2 \omega^2} \right], \quad (7.1)$$

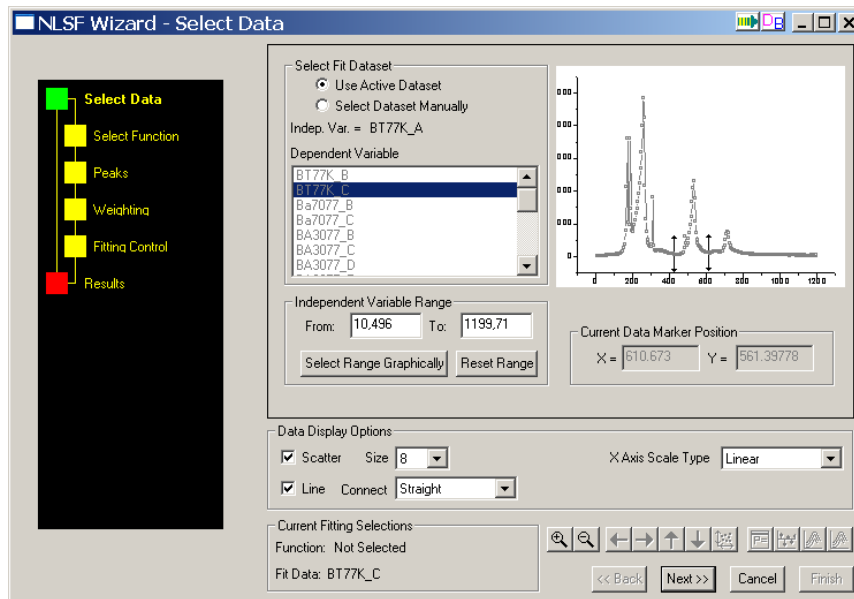


Рис. 7.14. Вибір необхідної ділянки графіка

де ω_{0i} - власна частота, Γ_{0i} - загасання (damping), A_i - константа, пропорційна силі i -го осцилятора, N - число передбачуваних піків в спектрі, а $n(\omega, T)$ - чинник температурної заселеності (4.2). Якщо спектр вже скоректований на температуру, то береться тільки частина формули в квадратних дужках.

Імпортуйте файл Vstat77k і відобразіть спектр на графіці.

Для того, щоб ввести свою формулу для апроксимації спектру, скористаємося отриманими раніше навиками. Відобразивши на графіці дані, в меню Analysis (аналіз) виберіть пункт Non-linear Curve Fit/ Advanced Fitting Tool

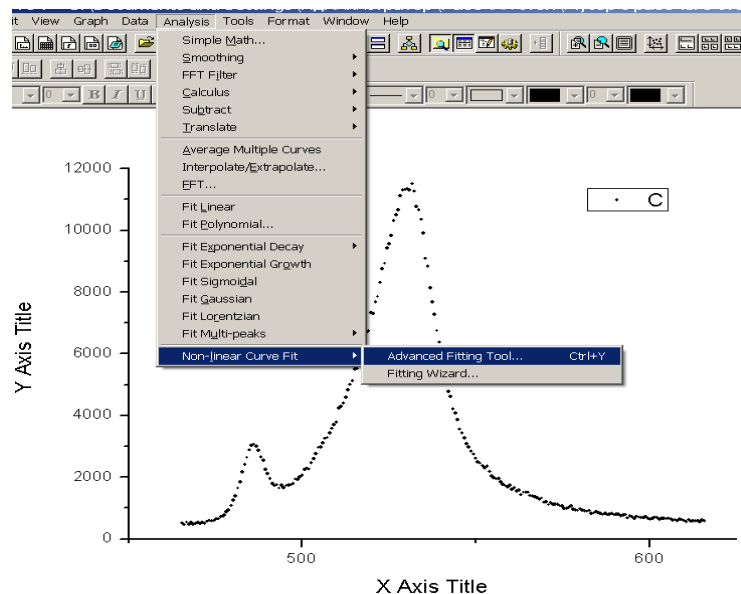


Рис. 7.15. Вибір режиму апроксимації

(нелінійна апроксимація/ розширений інструмент для апроксимації) (рис. 7.15).

З'явиться вікно **Nonlinear Curve Fitting**, в якому вам потрібно ввести нову функцію, натиснувши кнопку **New** (новий) (рис. 7.16).

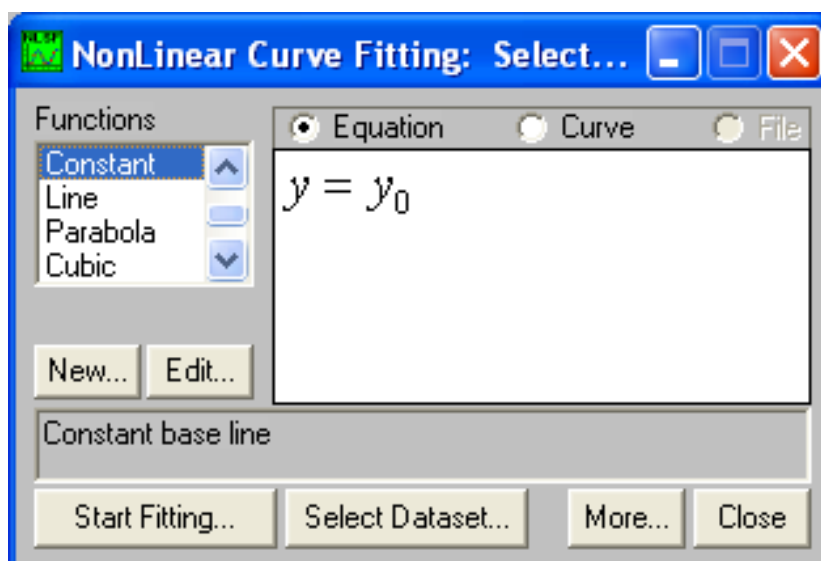


Рис. 7.16. Вибір апроксимуючої функції

У вікні, що змінилося, задайте ім'я нової функції, в списку **Number of Param.** вкажіть число параметрів - 6, і в полі **Example** введіть формулу (7.1) (рис.7.17). Зберігши функцію натисненням кнопки **Save**, перейдіть до вибору даних (**Select Dataset**), клацнувши кнопку **Accept** (прийняти).

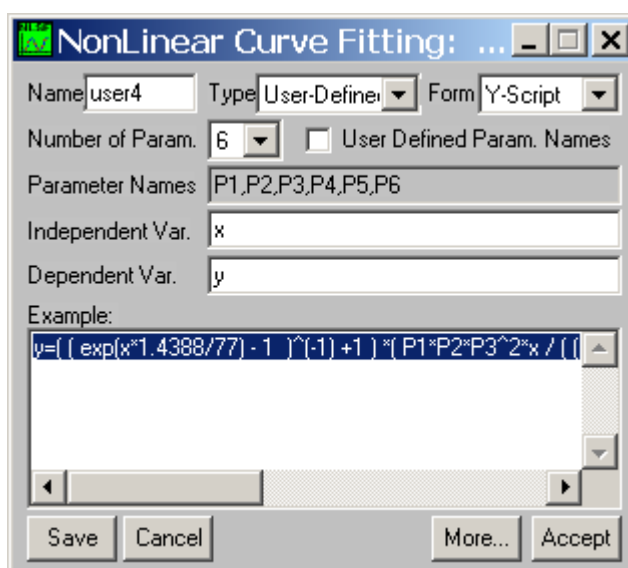


Рис. 7.17. Подання рівняння апроксимуючій функції

$$y = ((\exp(x * 1.4388 / 77) - 1)^{-1} + 1) * (P1 * P2 * P3^2 * x / ((P3^2 - x^2)^2 + P2^2 * x^2) + P4 * P5 * P6^2 * x / ((P6^2 - x^2)^2 + P5^2 * x^2))$$

Вибравши потрібний набір даних, в списку **Row** вкажіть діапазон, для якого проводитиметься апроксимація (рис. 7.18).

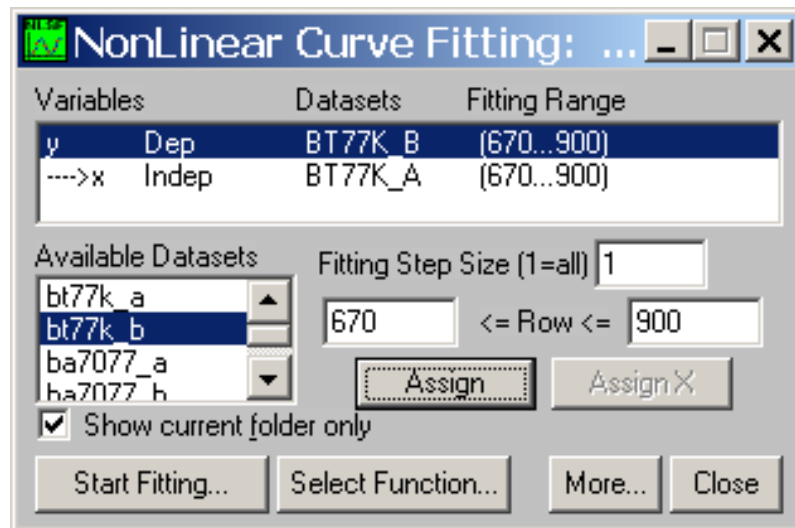


Рис. 7.18. Подання набору і діапазону апроксимуючих даних

Натисніть кнопку **More** (більше), вікно розгорнеться і з'явиться панель інструментів, на якій виберіть меню **Options/ Constrains** (опції обмеження). У списку **Lower Bounds** (нижня межа), встановлюючи прапорці для кожного параметра, задайте значення обмеження - нижня межа > 0 для всіх параметрів (рис.7.19). Якщо відомі області можливих змін деяких параметрів, то їх можна задати у вигляді подвійних нерівностей. Наприклад, можна вказати приблизні області розташування піків, задаючи допустиму нижню межу (**Lower Bounds**) і допустиму верхню межу (**Upper Bounds**).

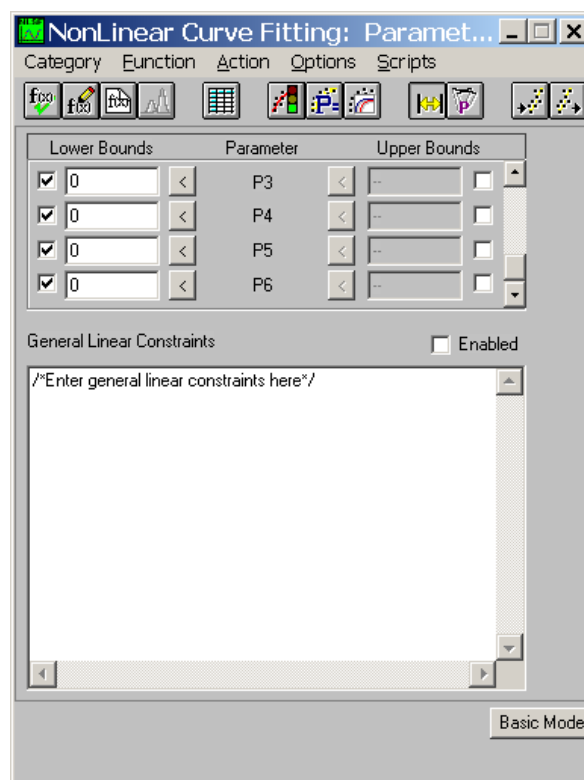


Рис. 7.19. Введення обмежень на діапазон зміни параметрів

Повернувшись до основного режиму (Basic Mode), можна приступити до апроксимації (Start Fitting). У вас з'явиться вікно, в якому потрібно задати початкові наближення для всіх параметрів (рис. 7.20). Якщо функція використовувалася раніше, то як початкові наближення використовуватимуться старі значення параметрів.

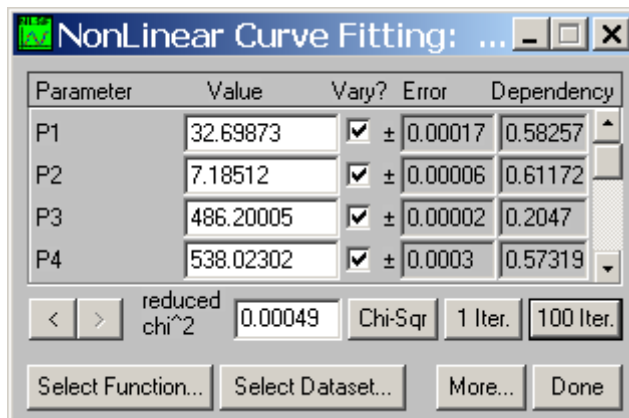


Рис. 7.20. Значення параметрів апроксимації

Від того, наскільки добре вибрано початкове наближення, залежить збіжність і результат апроксимації. Можливо, що початкове наближення виявиться невдалим, тоді значення параметрів доведеться підредагувати, щоб апроксимуюча лінія щонайкраще «лягла» на ділянку спектру. Якщо використовується функція з великим числом параметрів, іноді буває корисно частину параметрів зафіксувати, прибравши галочки в колонці Vary (варіювати). У нашому випадку вдалим початковим наближенням є: P1=1, P2=10, P3=490, P4=10, P5=25, P6=530.

Після проведення апроксимації на графіці з'явиться апроксимуюча крива на тій ділянці спектру, який ви вказали раніше. Також відобразиться легенда зі всіма

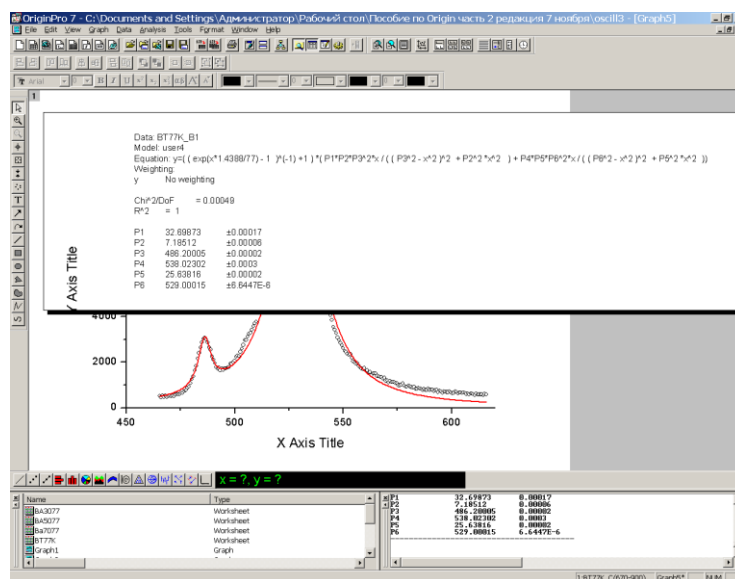


Рис. 7.21. Результат апроксимації

значеннями параметрів, але її можна видалити, оскільки всі параметри є в протоколі результатів (рис. 7.21).

Data: BT77K_B1

Model: user4

Equation: $y = ((\exp(x * 1.4388 / 77) - 1)^{-1} + 1) * (P1 * P2 * P3^2 * x / ((P3^2 - x^2)^2 + P2^2 * x^2) + P4 * P5 * P6^2 * x / ((P6^2 - x^2)^2 + P5^2 * x^2))$

Weighting:

y No weighting

Chi^2/DoF R^2

0.00049 1

Parameter	Value	Error
P1	32.69873	0.00017
P2	7.18512	0.00006
P3	486.20005	0.00002
P4	538.02302	0.0003
P5	25.63816	0.00002
P6	529.00015	6.6447E-6

У властивостях координатних осей на осі X вкажіть лише значення діапазону, на якому проводилася апроксимація, і в результаті вийде наступний

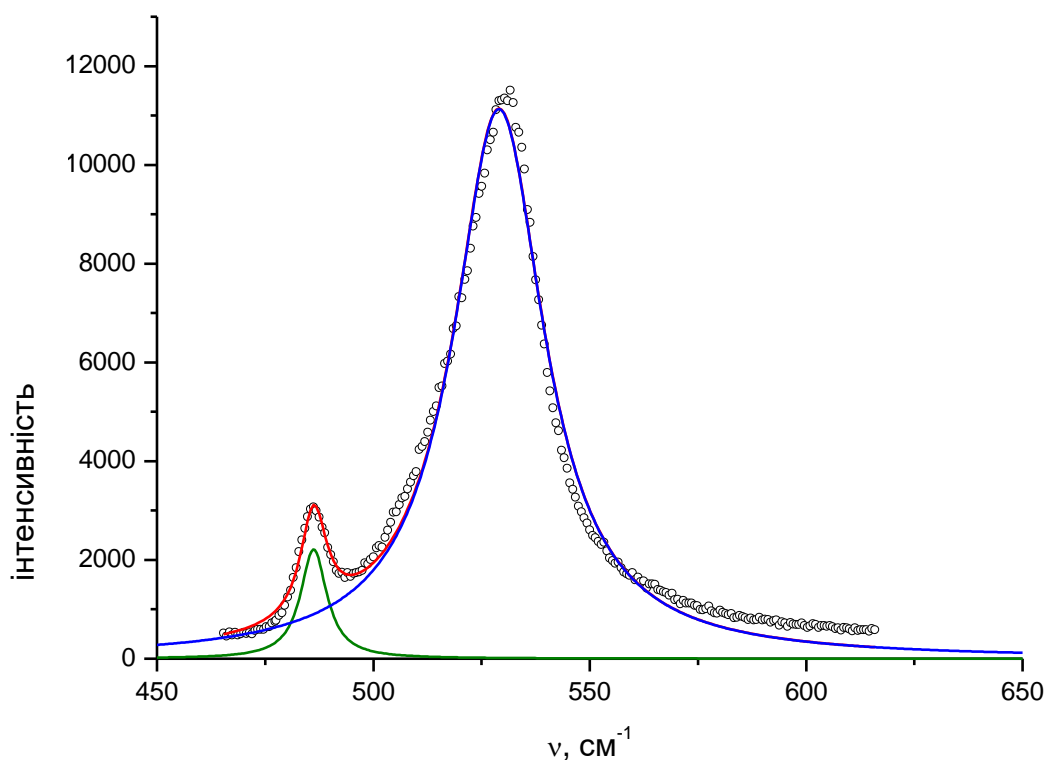


Рис. 7.22 Результат апроксимації ділянки спектру функцією (9.1)

графік (рис. 7.22).

Вправа (самостійна робота). Спробуйте поліпшити результати апроксимації, використовуючи більше число осциляторів (у формулі (7.1)). Як орієнтир див. рис. 7.23 і 7.24.

Потрібно добре розуміти, що «більше», не завжди означає «краще». При проведенні апроксимації важливі фізичні міркування з приводу того, де мають бути (або можуть) бути піки, а де їх бути не повинно. На рис. 7.24 піків на частоті близько 580 см^{-1} , швидше за все, не відповідає реальній фізичній ситуації. Процедура апроксимації додала його, щоб підняти «хвіст» спектру. З математичної точки зору це привело до зменшення похибки апроксимації. Проте з фізичної точки зору зрозуміло, що «хвіст» піднятий за рахунок піків, лежачих правіше даної ділянки спектру. Таким чином, колосальну роль на результати апроксимації може

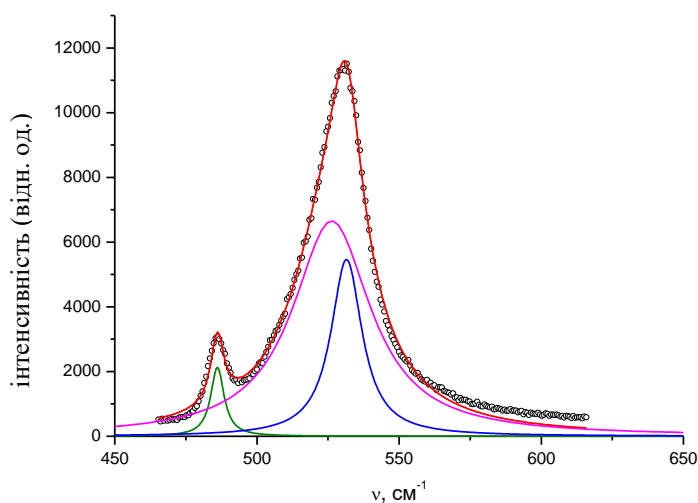


Рис. 7.23 Результат апроксимації ділянки спектру функцією (7.1) з $N=3$

надати ширина досліджуваної ділянки спектру.

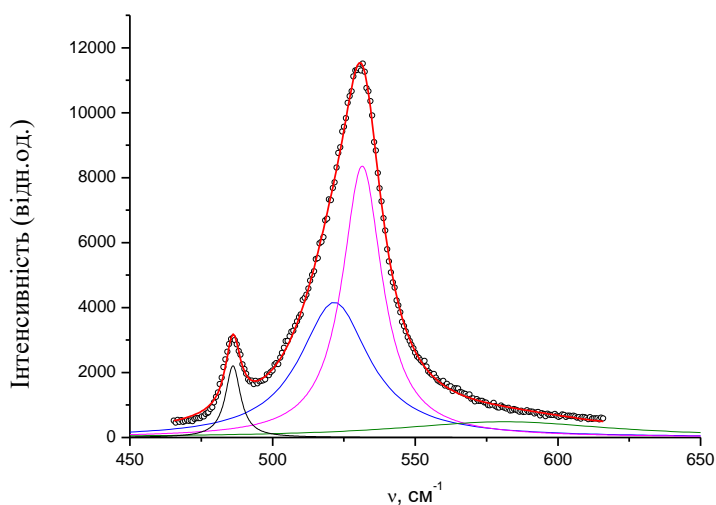


Рис. 7.24 Результат апроксимації ділянки спектру функцією (7.1) з $N=4$

Висновки до розділу 3

Експериментальні дослідження та методи аналізу енергетичних спектрів мають ключове значення для розвитку наукового й технічного поля. Їх використання сприяє розумінню властивостей матеріалів та удосконаленню технологій. Дослідження енергетичних спектрів відкривають нові можливості для діагностики та аналізу різних матеріалів та систем. Ці методи дозволяють студентам не лише отримати практичний досвід, а й розвивати критичне мислення через обробку та інтерпретацію даних. Використання енергетичних спектрів у навчальному процесі сприяє підготовці майбутніх фахівців до роботи з сучасними технологіями й методами досліджень.

ВИСНОВКИ

1. Проведено огляд пакету Origin та його можливостей.
2. Показано, основи та основні принципи імпортування та відображення даних.
3. Розроблена можливість зсуву та суміщення графіків по осі з подальшим аналізом та можливостями ідентифікації.
4. Показана можливість розмістити на рисунку декілька різномасштабних графіків з подальшою їх обробкою.
5. Проведемо корекцію спектру на температурний фактор заселеності та розглянуто можливості проведення простих операцій з спектрами.
6. Розроблено два способи згладжування експериментальних даних та встановлено ефективність кожного з них.
7. Продемонстровано можливості пакету Origin апроксимувати спектр набором лоренціанів.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Бабак В.П., Хандецький А.І., Шрюфер Е. Обробка сигналів : підручник для вузів. Київ : Либідь, 1996. 390 с.
2. Бондарєв В.Н., Трестер Г., Чернега В.С. Цифрова обробка сигналів, методи і засоби: підручник для вузів. Харків : Конус, 2001. 398 с.
3. Гаркавий В.Г., Ярова В.В. Математична статистика. Київ : Професіонал, 2004. 484 с.
4. Ваврук Є.Я., Попович Р.Б. Цифрове опрацювання сигналів та зображень, алгоритми та реалізація : навч. посіб. Львів : Нац. ун-т “Львівська політехніка”, 2008. 147 с.
5. Ваврук Є.Я., Коваль В.А. Моделі контролю і діагностики систем опрацювання сигналів. *Збірник наукових праць “Моделювання та інформаційні технології”*. – Інститут проблем моделювання в енергетиці НАНУ, 2006. Вип. 35. С. 131–139.
6. Величко С.П., Куренівський Д.Г. Розвиток системи навчального експерименту та обладнання з фізики у середній школі. Кіровоград, 1998. 302 с.
7. Величко С., Сірик Е. Нове навчальне обладнання для спектральних досліджень : посіб. для студ. фізмат. фак-тів пед. вищих навч. закладів. 2-е вид., перероб. Кіровоград : ТОВ «Імекс ЛТД», 2006. 202 с.
8. Величко С., Ковальов С. Удосконалення навчального експерименту та обладнання із спектрального аналізу. *Збірник наукових праць Кам'янець-Подільського нац. ун-ту ім. І. Огієнка. Серія педагогічна*. Кам'янець-Подільський, 2010. Вип. 16. С. 140-142.
9. Величко С., Ковальов С. Реалізація засобів ІКТ у створенні сучасного спектрального обладнання з фізики. *Збірник наукових праць Уманського держ. пед. ун-ту*. Умань : ПП Жовтий, 2011. Ч. 3. 326 с.
10. Горват А.А., Молнар О.О., Мінькович В.В. Обробка, візуалізація та аналіз експериментальних даних з використанням пакету Origin : навч. посіб. Ужгород : УжНУ “Говерла”, 2020. 64 с.

11. Засименко В.М. Основи теорії планування експерименту : навч. посіб. Львів : Вид-во ДУ «ЛП», 2000. 205 с.
12. Криксунов В.Г. Спектральний аналіз електричних сигналів. Київ : Техніка, 1971. 193 с.
13. Майстренко В.М. Спектри одномірних функцій розподілу випадкових процесів. *Вісник Національного Технічного Університету «Київський політехнічний інститут», «Приладобудування», 2003. № 26. С. 145-150.*
14. Мельник В.М. Теорія і практика фотограмметричних методів в електронно-мікроскопічних дослідженнях : автореф. дис. на здобуття наук. ступеня докт. техн. наук. : 05.24.01. Львів, 1995. 51 с.
15. Мінцер О.П., Вороненко Ю.В., Власов В.В. Оброблення клінічних і експериментальних даних у медицині : навч. посібник. Київ : Вища школа, 2003. 350 с.
16. Мирончук Г.Л., Замуруєва О.В., Кримусь А.С. Прикладні математичні пакети. Ч. I. Обробка та візуалізація даних за допомогою пакета Origin : навч. посіб. Луцьк : Мрія, 2015. 46 с.
17. Наконечний А.Й., Наконечний Р.А., Павлиш В.А. Цифрова обробка сигналів : навч. посіб. Львів : Вид-во Львівської політехніки, 2010. 368 с.
18. Пісьціо В.П., Медвідь В.Р., Микулик П.М. Методичні вказівки до лабораторної роботи № 9 "Основи цифрового представлення зображень та їх обробки" з курсу "Цифрова обробка сигналів та зображень". Тернопіль : ТНТУ, 2023. 22 с.
19. Рибальченко М.О., Єгоров О.П., Зворикін В.Б.. Цифрова обробка сигналів. навч. посіб. Дніпро : НМетАУ, 2018. 79 с.
20. Савченко Д.В. Основи обробки та візуалізації фізичних даних в програмному середовищі OriginPro 8: Комп'ютерний практикум : навч. посіб. для студ. спеціальності 104 «Фізика та астрономія». Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2021. 111 с.
21. Сайт компанії-розробника Origin [Електронний ресурс]. – Режим доступу : <http://www.originlab.com>

22. Шостак А.В. Методи і моделі мікрофотограмметрії у прикладних наукових дослідженнях : автореф. дис. на здобуття наук. ступеня докт. техн. наук : 05.24.01. Київ, 2012. 28 с.
23. Gales M., Young S. The Application of Hidden Markov Models in Speech Recognition. *Foundations and Trends in Signal Processing*. 2007. Vol. 1, No. 3. P. 195–304.
24. Luhmann T. Close range photogrammetry for industrial applications. *ISPRS Journal of Photogrammetry and Remote Sensing*. 2010. Vol. 64/3. P. 558-569.
25. Nesje Atle, Dahl Svein Olaf. The Greenland 8200 cal. yrs. BP event detected in loss-on-ignition profiles in Norwegian lacustrine sediment sequences. *Journal of Quaternary Science*. 16 (2). 2001. P. 155–166.
26. Origin Help [Електронний ресурс]. – Режим доступу до електронного ресурсу: <https://www.originlab.com/doc/Origin-Help/>
27. Rabiner L., Juang B., Yegnanarayana B. *Fundamental of Speech Recognition*. New Delhi, India : Pearson Education Inc. 2009. 497 p.
28. Shapiro J.M. Embedded Image Coding Using Zerotrees of Wavelet Coefficients. *IEEE Transactions on Signal Processing*. 1993. Vol. 41, No. 12. P. 3445-3462.
29. Sergeev V., Sokolov V. Quantitative morphological analysis in a SEM-microcomputer system. *Journal of microscopy*. 1984. V. 135. P.1-12.
30. Shah G., Bell A., Malkin S. Quantitative characterization of abrasive surfaces using a new profile measuring system. *Wear*. 1977. V. 41. № 2. P. 315-321.
31. Serra J. *Image Analysis and Mathematical Morphology*. London : Academic Press., 1992. 341 p.
32. Theodoridis S., Koutroumbas K. *Pattern recognition, fourth edition*. Elsevier Inc., 2009. 961 p.
33. Ryan W.B., Pitman W.C. *Noah's Flood: The New Scientific Discoveries about the Event That Changed History*. New York : Simon and Schuster, 1999. 319 p.