

Fluo 1.0

Software na korekci a vyhodnocení fluorescenčních spekter

```
4  %=====
5  %inicializace - nacteni absorpcnich spekter
6  %=====
7  slozka0='csv'; %zadani nazvu slozky s absorpcnimi spektry
8
9  file=dir(fullfile('C:', 'fluo', slozka0, '*.csv'));
10 %vytvoreni seznamu souboru s absorpcnimi spektry
11 PS=length(file); %pocet souboru v seznamu
12
13 ABS_NAZEVEV = ''; %vytvoreni stringove matice nazvu souboru
14 ABS_VZOREK = ''; %vytvoreni stringove matice oznaceni vzorku
15 ABS_NAZEVEV(1) = '0'; %vlozeni nuly do nazvu sloupce vlnovych delek
16 ABS_VZOREK(1) = '0'; %vlozeni nuly do oznaceni vzorku ve sloupci vlnovych delek
17
18 for ii=1:PS;%cyklus pres soubory ;
19     file(ii).name; %vypise jmeno zpracovavaneho souboru na obrazovku
20     fid = fopen(fullfile('C:', 'fluo', slozka0, file(ii).name), 'r'); %otevreni vstupniho souboru
21
22     ABShlavicka = textscan(fid, '%s', 2, 'Delimiter', ','); %nacte retesce textu - hlavicky
23     ABShlavicka(:);
24     jmenoabs=file(ii).name; %priradi nazev souboru promenne jmeno
25     pojmenuj1=strrep(jmenoabs, '.csv', ''); %vymaze koncovku
26     ABS_NAZEVEV(ii+1) = pojmenuj1; %prirazeni nazvu sloupce do matice nazvu
27     ABS_pomnazev=textscan(char(ABShlavicka(1)(1)), '%s %s'); %rozlozi hlavicku na nazev a vzorek
28     %ABS_NAZEVEV(ii+1) = char(ABS_pomnazev(1)(1)); %prirazeni nazvu sloupce do matice nazvu
29     ABS_VZOREK(ii+1) = char(ABS_pomnazev(1)(1)); %prirazeni oznaceni vzorku sloupce do matice oznaceni vzorku
30     ABS_NAZEVEV(:); %pomocny vypis
31     ABS_VZOREK(:); %pomocny vypis
32
33     K = textscan(fid, '%s %s', 'Headerlines', 1, 'Delimiter', ','); %nacte absorpcni spektra jako string do dvou cell array
34     fclose(fid);
35     KI = [K(1) K(2)]; %prevedeni stringu z cell array do matice stringu
36     KII=strrep(KI, ',', '.'); %nahrada carek za tecky
37     KIII=str2double(KII); %prevedeni stringu na cisla
38     length(KIII); %zjisteni delky sloupce
39
40
41     delkas1=length(KIII); %zjisteni delky sloupce
42     mazat=1;
43     smazal=0;
44     while mazat<delkas1 %smaze radky s vlnovou delkou vetsi nez 798nm
45         if isnan(KIII(mazat-smazal,1)) || KIII(mazat-smazal,1)>=798
46             KIII(mazat-smazal,:)= '';
47             smazal=smazal+1;
```

Apollo ID: 24880

Datum: 16. 12. 2010

Typ projektu: R – software

Autoři: Ing. František Lízal

Popis funkce

Program provádí výpočet korekcí na absorpci vzorku a citlivost spektrometru a automaticky odečítá blank vzorek na velkém množství datových souborů vytvořených měření na spektrometrech. Načtení celého souboru dat probíhá automaticky, výsledek je zapsán do výstupního datového souboru. Zároveň je z každého vzorku vytvořen graf korigovaného emisního spektra.

Popis algoritmu

1) Načtení absorpčních spekter

Program načte absorpční spektra ve formátu csv, přičemž vyžaduje, aby data byla uspořádána do dvou sloupců - v prvním sestupně vlnová délka, ve druhém absorpce při patřičné vlnové délce. Na prvním místě v levém sloupci musí být uvedeno označení vzorku, první řádek druhého sloupce zůstává prázdný. Od druhého řádku následují samotná data. Z nich se pak vytvoří matice ABSOR, která

obsahuje v prvním sloupci vlnové délky uspořádané vzestupně a v dalších sloupcích příslušné absorpce dalších vzorků.

2) Načtení emisních spekter

Emisní spektra se načítají z txt souborů, data musí být opět uspořádána do dvou sloupců, v prvním vzestupně emisní vlnová délka a ve druhém intenzita fluorescence. Hlavička musí vypadat přesně definovaným způsobem. Program ukládá následující údaje: název souboru, citlivost (např. "1000V"), excitační vlnovou délku (např. "295nm") a označení vzorku (např. "FD1"). Do matice AI uloží do prvního sloupce emisní vlnové délky a do dalších sloupců postupně intenzity fluorescencí jednotlivých vzorků.

3) Korekce na absorpci

Program po sloupcích prochází matici emisních spekter. Nejprve si zapamatuje označení vzorku i-tého sloupce a hledá jemu odpovídající sloupec v absorpční matici. Po jeho nalezení provede výpočet korekce.

4) Odečet blank vzorku

Program po sloupcích prochází matici emisních spekter. Do proměnné citlivost uloží citlivost daného sloupce a do proměnné exvln delka excitační vlnovou délku. Pak najde vždy patřičný sloupec s blankem a odečte od aktuálního sloupce. Sloupce s blankem nechává beze změny.

5) Korekce na citlivost

Nejprve najde sloupce, které obsahují stejné vzorky se stejnou excitační vlnovou délkou, ale jinou citlivostí. Jejich citlivosti uloží do proměnných citjedna a citdva a pořadí jim příslušných sloupců na stejná místa v maticích poradicitjedna a poradicitdva. Potom seřadí nalezené citlivosti podle velikosti a podělí patřičné sloupce. V rozsahu vlnových délek 500 až 550 nm zprůměruje hodnotu podílu a uloží do korekčních proměnných kor1 a kor2. Pak vynásobí sloupce s nejnižší citlivostí oběma korekcemi, střední citlivost jednou korekcí a nejvyšší citlivost nechá být. Program dokáže pracovat maximálně se třemi úrovněmi citlivostí, použití více citlivostí není běžné.

6) Zápis výsledku do textového souboru

Korigované hodnoty intenzit fluorescence jsou ukládány do souboru "data.txt". V prvním sloupci jsou hodnoty emisní vlnové délky, v dalších sloupcích jsou intenzity fluorescencí jednotlivých vzorků. Hlavička každého sloupce obsahuje postupně v řádcích: název původního datového souboru daného vzorku, označení vzorku, původní citlivost a excitační vlnovou délku.

7) Vytvoření grafů a jejich uložení do jpg souborů

Korigované intenzity fluorescence jednotlivých vzorků jsou nakonec vykresleny do grafů, které jsou uloženy ve formě jpg souborů

Technické a programové požadavky

Pentium IV a vyšší, 512 MB RAM, HD 510 MB. Před spuštěním programu FLUO 1.0 je nutné (pokud na počítači není nainstalován program Matlab 2007b) spustit příložený program MCRInstaller a provést zavedení příslušné proměnné systému path.

Popis použití

Datové soubory emisních spekter musí být ve formátu txt, absorpční spektra ve formátu csv v definované složce. Program se spustí souborem fluo.exe a samostatně provede veškeré výpočty korekcí, vykreslení grafů a uložení výstupních dat.

Vazba na projekt

GD101/09/H050 Výzkum energetických úsporných zařízení pro dosažení pohody vnitřního prostředí
OC10052 Experimentální výzkum transportu a depozice částic v oscilujícím turbulentním proudu

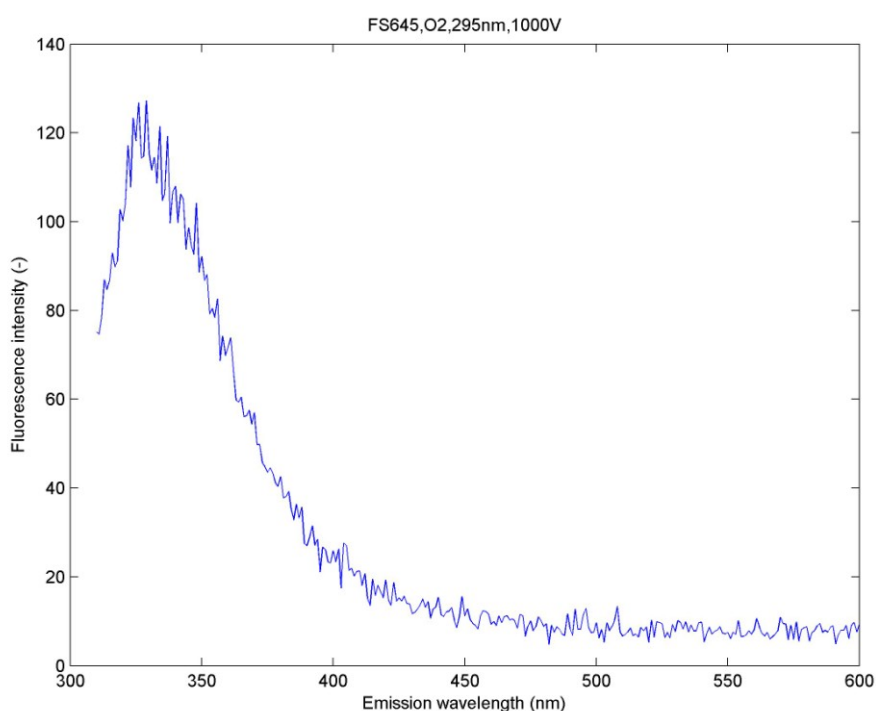
Licenční podmínky

Využití výsledku jiným subjektem je možné bez nabytí licence

Kontaktní osoba

Ing. František Lízal, +420541143264, lizal@fme.vutbr.cz

Dokumentace grafického uživatelského rozhraní



Stažení a používání software

Software je možné stáhnout na <http://ottp.fme.vutbr.cz/vysledkyvyzkumu/fluo.zip>

Prohlašuji, že popsaný výsledek naplňuje definici uvedenou v Příloze č. 1 Metodiky hodnocení výsledků výzkumu a vývoje v roce 2008 a že jsem si vědom důsledků plynoucích z porušení § 14 zákona č. 130/2002 Sb. (ve znění platném od 1. července 2009). Prohlašuji rovněž, že na požádání předložím technickou dokumentaci výsledku.

František Lízal