

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ**

**ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

Факультет радіофізики, електроніки та комп'ютерних систем

Кафедра комп'ютерної інженерії

**ІНФОРМАЦІЙНА СИСТЕМА СПЕКТРОМЕТРИЧНОЇ ЛАБОРАТОРІЇ**

Дипломна робота бакалавра

студента 4 року навчання

Спеціальність: 123 «Комп'ютерна інженерія»

Олександра КУШНІРА

Науковий керівник

канд. фіз.-мат. наук доцент Сергій РАДЧЕНКО,

зав. кафедри кафедра медичної радіофізики

Рецензент

док. фіз.-мат. наук проф. Анатолій ВЕКЛИЧ,

зав. кафедри кафедра фізичної електроніки

До захисту допускаю:

Завідувач кафедрою Юрій БОЙКО

Ухвалено на засіданні кафедри “\_\_\_\_\_” \_\_\_\_\_ 2022 р., протокол № \_\_\_\_\_

Київ 2022

## **РЕФЕРАТ**

Дипломна робота бакалавра: – 40 с., 31 рис., 8 джерел.

### **АНАЛІЗ, ВЕБ-ДОДАТОК, ІМПОРТ, РЕДАГУВАННЯ, СПЕКТРОМЕТРІЯ**

Об'єкт дослідження – програмні засоби роботи зі спектрометром

Мета роботи: проаналізувати існуючі програмні засоби для отримання, обробки та аналізу спектрометричних даних, розробити та реалізувати проект програми роботи зі спектрометром та даними його замірів.

Результатом виконання роботи є створення веб-додатку імпорту, обробки, редагування та автоматичного аналізу даних спектру.

## **ЗМІСТ**

|                                                                                      |           |
|--------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>РЕФЕРАТ .....</b>                                                                 | <b>1</b>  |
| <b>ЗМІСТ .....</b>                                                                   | <b>2</b>  |
| <b>ПЕРЕЛІК СКОРОЧЕНЬ.....</b>                                                        | <b>3</b>  |
| <b>ВСТУП.....</b>                                                                    | <b>4</b>  |
| <b>1 МОЖЛИВОСТІ ТА ХАРАКТЕРИСТИКИ СИСТЕМ АНАЛІЗУ<br/>СПЕКТРОСКОПІЧНИХ ДАНИХ.....</b> | <b>5</b>  |
| <b>1.1 Програма для аналізу спектроскопічних даних CarpetView.....</b>               | <b>5</b>  |
| <b>1.2 Програмне забезпечення САТО .....</b>                                         | <b>9</b>  |
| <b>1.3 Розробки ТОВ «МОРС» у галузі емісійної аналітики.....</b>                     | <b>16</b> |
| <b>2. ВИЗНАЧЕННЯ ВИМОГ СИСТЕМИ.....</b>                                              | <b>21</b> |
| <b>3. ПРОЕКТУВАННЯ СИСТЕМИ .....</b>                                                 | <b>23</b> |
| <b>4 РЕАЛІЗАЦІЯ ПРОЕКТУ ДОДАТКУ .....</b>                                            | <b>26</b> |
| <b>4.1 Загальна структура .....</b>                                                  | <b>26</b> |
| <b>4.2 Авторизація користувача .....</b>                                             | <b>28</b> |
| <b>4.3 Ведення користувачів.....</b>                                                 | <b>29</b> |
| <b>4.4 Перегляд даних замірів спектрів .....</b>                                     | <b>30</b> |
| <b>4.5 Імпорт спектру .....</b>                                                      | <b>33</b> |
| <b>4.6 Аналіз даних заміру .....</b>                                                 | <b>35</b> |
| <b>4.7 Редагування даних заміру.....</b>                                             | <b>38</b> |
| <b>ВИСНОВКИ .....</b>                                                                | <b>39</b> |
| <b>ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ.....</b>                                                         | <b>40</b> |

## **ПЕРЕЛІК СКОРОЧЕНЬ**

ПЗ — програмне забезпечення

ФЕП — фотоелектронний помножувач

ЛДР — лінійне диференціальне рівняння

ФЕК — фотоелектронна касета

ПЗЗ — прилад з зарядовим зв'язком

БД — база даних

УО — умовні одиниці

## ВСТУП

Старі системи реєстрації спектра неможливо підключити до сучасних комп'ютерів та програмного забезпечення – це не дозволяє забезпечити автоматизацію вимірювань на сучасному рівні. Часто для спектрометрів не наявні програмні засоби керування спектрометром та аналізу отриманих протягом виконання замірів спектрометричних даних.

Модернізація джерела збудження спектра дозволить все керування спектрометром вести від одного персонального комп'ютера, як у всіх сучасних аналітичних приладах такого типу.

Зважаючи на вищесказане, було вирішено проаналізувати існуючі програмні засоби для отримання, обробки та аналізу спектрометричних даних і розробити та реалізувати проект програми роботи зі спектрометрами.

Така програма дасть змогу імпортувати та зберігати дані від спектрометрів різних видів; представляти ці дані користувачеві у зручному форматі, за потреби експортувати ці дані; редагувати дані заміру; отримати результати автоматичного аналізу спектру.

# 1 МОЖЛИВОСТІ ТА ХАРАКТЕРИСТИКИ СИСТЕМ АНАЛІЗУ СПЕКТРОСКОПІЧНИХ ДАНИХ

## 1.1 Програма для аналізу спектроскопічних даних CarpetView

- Спеціальний пакет програм для аналізу даних надшвидкої спектроскопії
- Функція візуалізації: спектральні зрізи, контурні графіки, порівняння кількох графіків
- Широкий набір простих функцій керування даними
- Загальний та цільовий аналіз даних надшвидкої спектроскопії
- Опціональна 3D візуалізація

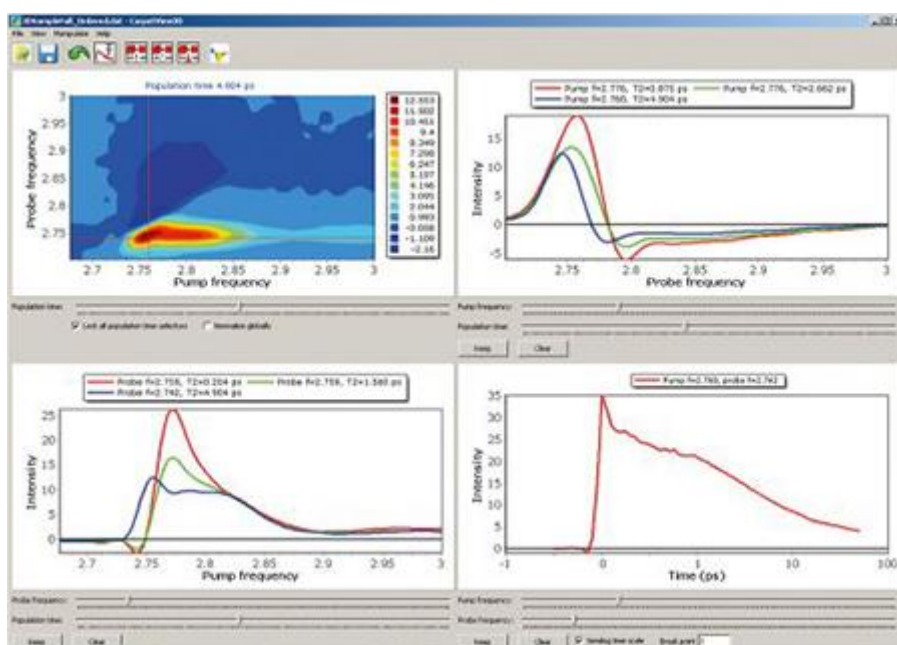


Рисунок 1.1 — Головне вікно CarpetView[1]

CarpetView є спеціальним пакетом програм, що призначений для спостереження, візуалізації та аналізу даних надшвидкої спектроскопії. Дане ПЗ сумісне з різними надшвидкими спектроскопічними системами. Воно поставляється у двох варіантах:

- класичний вид для роботи з даними, отриманими методами накачування-зондування та флуоресценції з тимчасовим дозволом
- 3D вид для роботи з даними, отриманими за допомогою двовимірної електронної спектроскопії (2DES) та візуалізації часу життя флуоресценції (FLIM).

#### Функції візуалізації:

- Огляд даних спектрально-часового перехідного поглинання та флуоресценції у вигляді контурного графіка
- Вибір тимчасових та спектральних зрізів
- Порівняння кількох тимчасових спектрів або кінетичних трас на одному графіку
- Експорт отриманих графіків у растровий формат або метафайл
- Експорт даних вибраного графіка в формат ASCII
- Лінійна та напівлогарифмічна часові осі в кінетичних трасах з метою візуалізації спектральних змін, що розповсюджуються на кілька порядків у часі

#### Прості функції керування даними:

- Корекція чирпа (ступеня стиснення) у зондувальному промені
- Об'єднання двох наборів даних, виміряних у різних спектральних вікнах
- Обмеження або видалення зашумленої спектральної складової або тимчасової області
- Віднімання нульового сигналу
- Калібрування спектру за допомогою еталонного спектра поглинання, виміряного на установці
- Зміщення або перемасштабування часів зондування
- Зміна одиниць вимірювання осі довжин хвиль між хвильовими числами, еВ та нм
- Згладжування спектрів та кінетичних трас для зниження шуму

#### Загальний та цільовий аналіз даних:

Дане ПЗ має функціонал підгонки отриманих даних. Дані аналізуються з використанням роздільних моделей, в яких різні підгрупи (відсіки)

взаємопов'язані з використанням наборів лінійних диференціальних рівнянь (ЛДР). Процедура підгонки також дозволяє включити інформацію про чирпування зондувального променя у дані, виконуючи зворотну згортку за допомогою гаусової передавальної функції.

- Графічна побудова моделі
- Оцінка початкових параметрів дисперсійної кривої одним кліком
- Розширені функції оцінки «ваги» точок для фізично обґрунтованої підгонки
- Всебічний огляд результатів підгонки, включаючи популяцію відсіків моделі, спектри відсіків моделі та підгоночні криві, які накладено на дані та залишкові значення

- Створення звітів
- Експорт даних підгонки в формат ASCII
- Експорт графіків підгонки в растровий формат або метафайл

Опціональна 3D візуалізація:

- Включає весь функціонал класичного варіанта
- Дозволяє візуалізувати, перевіряти та обробляти масиви даних, отримані за допомогою 2DES та FLIM
- Виконання загального та цільового аналізу як для всього масиву даних, так і для двовимірних наборів
- Виконання простого управління даними: групування (біннінг), зміна масштабу по осі, вилучення двовимірної набору даних із масиву даних

Приклади роботи у програмі CarpetView:  
Вигляд головного вікна CarpetView (класичний варіант), що відображає набір даних при аналізі «накачка-зондування» (рис. 1.2).



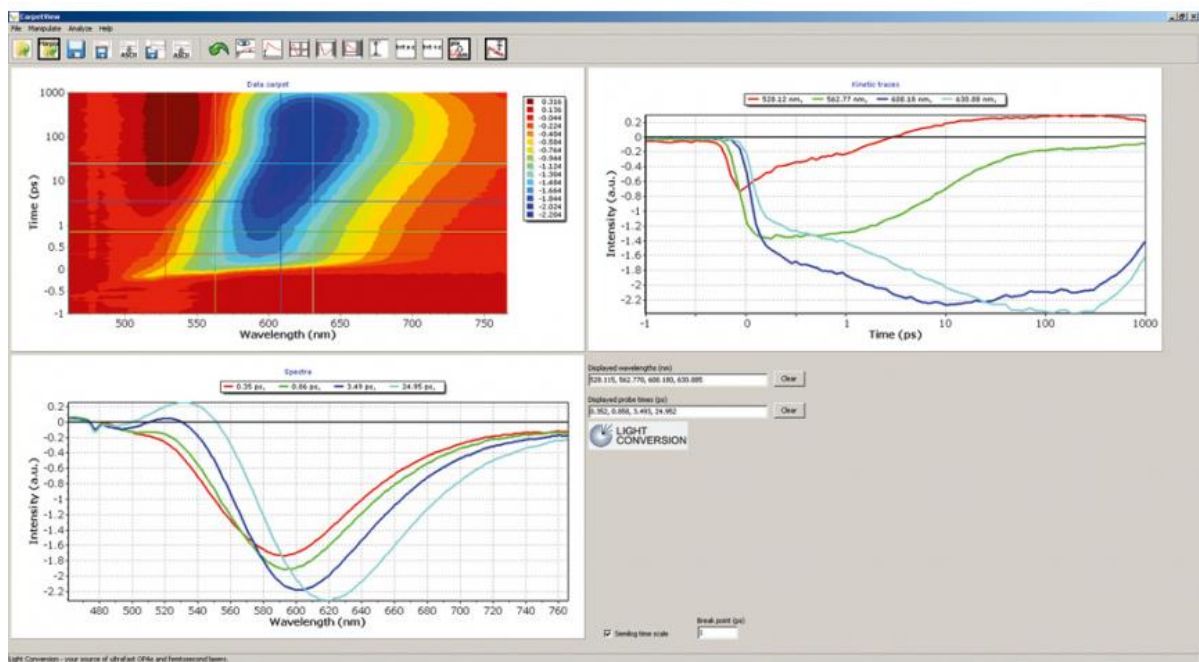


Рисунок 1.2 — Аналіз «Накачка-зондування» у CarpetView[1]

Вікно перегляду отриманих спектрів CarpetView (рис. 1.3).

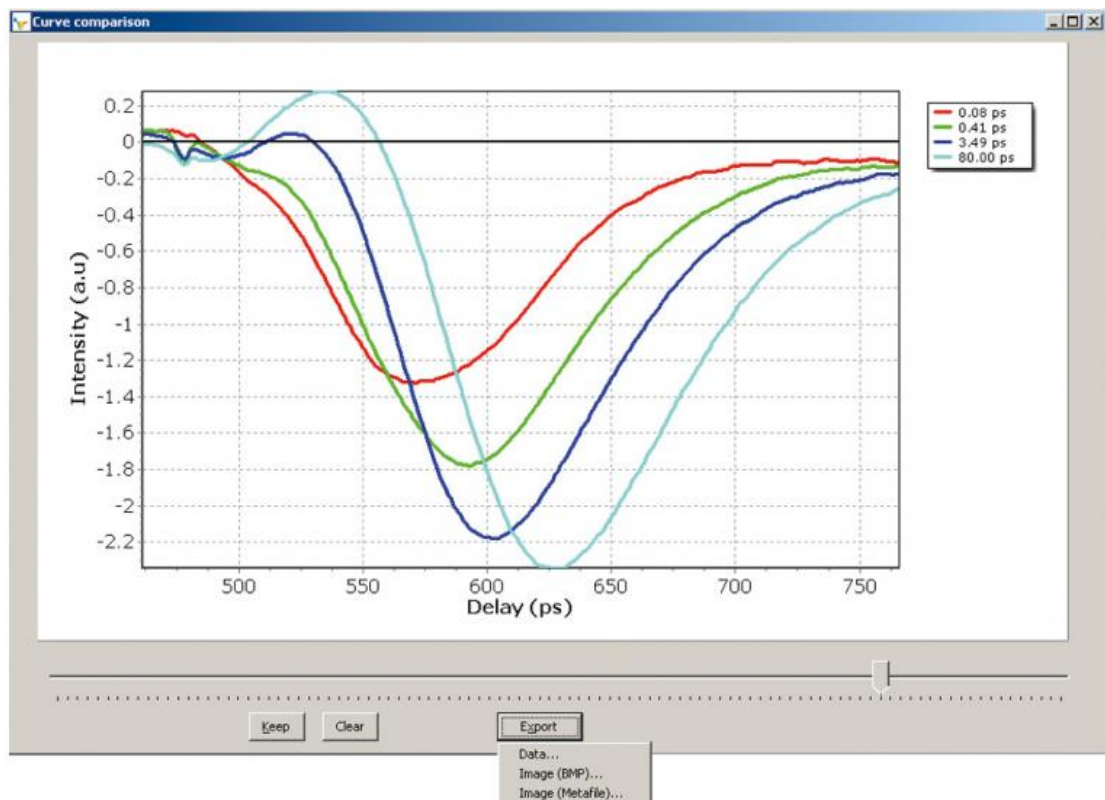


Рисунок 1.3 — Вікно перегляду отриманих спектрів CarpetView[1]

Вигляд головного вікна програми CarpetView (3D візуалізація), відображає двовимірний набір спектроскопічних даних (рис. 1.1).

## 1.2 Програмне забезпечення САТО

У процесі спектрального аналізу одні елементи впливають на результат аналізу інших хімічних елементів. Це називається матричним ефектом (в іншій термінології: вплив матриці, вплив основи, вплив складу, міжелементний вплив, вплив третіх елементів). Помилки, зумовлені матричним ефектом, сильно перевищують помилку виміру спектрів, і в більшості випадків саме вони визначають точність та достовірність спектрального аналізу. Наприклад, якщо корекція матричного ефекту не ведеться або ведеться неправильно, помилки аналізу найдорожчих імпорتنих і недорогих вітчизняних спектрометрів будуть приблизно однакові. При цьому відносні помилки можуть досягати 20% і більше, що відповідає точності стилоскопу. І навпаки, якщо рівняння корекції вітчизняного стаціонарного спектрометра визначено правильно, точність його буде набагато вищою за точність будь-якого імпортного спектрометра, для якого матрична корекція визначена неправильно або не ведеться зовсім.[2]

Зазвичай імпортні спектрометри надходять відкаліброваними з корекцією матричного ефекту на певні сплави. Для калібрування фірми використовують імпортні стандартні зразки. На жаль, стандарти на вітчизняні та імпортні сплави не співпадають і точки відповідних стандартних зразків не лягають на одній лінії. Тому якщо вимоги до точності аналізу високі, користувачам спектрометрів доводиться самостійно перекалібровувати їх під свої сплави. Програмним забезпеченням спектрометрів передбачена можливість корекції матричного ефекту. Для цього аналітик методом спроб і помилок вводить у програму коефіцієнти впливу одних елементів на інші таким чином, щоб результат аналізу еталонних зразків був якомога ближчим до паспортних значень.

Складність завдання полягає в тому, що перший елемент, впливаючи на другий, викликає вплив його на третій елемент, який, своєю чергою, може впливати на перший, викликаючи цим замкнутий цикл. У деяких програмах заявлена можливість визначення коефіцієнтів корекції за умови, що впливають елементи заздалегідь відомі. Але де ж взяти ці елементи? Літературні дані не підходять в даному випадку, оскільки залежать від використовуваної апаратури і

використовуваних стандартних зразків. Простий перебір сотень або тисяч поєднань впливів елементів на кожен елемент важко здійснити. Але навіть якщо здійснимо, отримані значення виявляються невірними з наступних причин.

У паспортах стандартних зразків наведені концентрації не всіх хімічних елементів. Наприклад, у паспорті до стандартних зразків з ЛГ-27 по ЛГ-31 зазначено лише вміст Бору, але насправді там міститься багато інших елементів. Комп'ютерні програми у процесі пошуку коефіцієнтів корекції вважають не вказані концентрації рівними нулю. Насправді, там зовсім інші значення. Якщо не враховувати концентрації цих елементів при врахуванні впливу складу та врахуванні розведення основи, рівняння корекції визначаються неправильно. Для вирішення цього завдання можна використовувати математичний метод «врахування невказаних концентрацій», який використовує для обчислень не нульові, а справжні значення невказаних концентрацій, що визначаються рекурентним методом.

Програма САТО, в якій реалізований цей метод, автоматично знаходить елементи, що впливають, і коефіцієнти корекції матричного ефекту. На представлених графіках (рис. 1.4, рис. 1.5, рис. 1.6) показані результати аналізів, зроблених на спектрометрі ARL-3460. Там видно, наскільки велика помилка аналізу без корекції матричного ефекту (рис. 1.4) і з корекцією, але без врахування невказаних концентрацій (рис. 1.5). Корекція матричного ефекту з врахуванням невказаних концентрацій представлена рисунку 1.6. Враховуючи статистичний характер розрахунків матричної корекції, важливим фактором є достовірність результатів аналізу. Під терміном «достовірність» тут мається на увазі ймовірність того, що відносна помилка аналізу лежатиме в межах 7% (прийнято критерієм кількісного аналізу). Якщо калібрування спектрометра на певний сплав проводиться тільки за відповідним комплектом стандартних зразків, можна знайти рівняння корекції, і результати аналізу цих зразків будуть близькими до паспортних значень. Але зовсім необов'язково, що проби, що надходять для аналізу, будуть завжди близькі за складом саме цим декільком стандартним зразкам.

Очевидно, невеликої кількості стандартних зразків недостатньо, щоб забезпечити високу довірчу можливість знайдених рівнянь корекції. Для підвищення достовірності аналізу кількість стандартних зразків при калібруванні спектрометра має бути максимально великою. Необхідно спробувати використовувати стандартні зразки даної основи, що є в наявності. Якщо рівняння корекції вибрано правильно, майже всі точки цих зразків на графіку повинні лягти близько до калібрувальної лінії. Точки, що випадають із графіка, необхідно виключити з аналізу з причин, розглянутих далі.

Рядом вітчизняних аналітиків помічено, що для полегшення завдання компенсації матричного ефекту до деяких стандартних зразків додаються рідкісні елементи, які ніколи не використовуються у відповідних сплавах. Спектрометри не налаштовуються на такі елементи і неможливо корегувати такі елементи, тому й точки, що відповідають таким зразкам, не можуть лежати на лінії графіка.

Іншою причиною може бути недостатня для обліку елементів, що впливають, кількість каналів спектрометра.

Достовірність результатів аналізів підприємства можна оцінити. Для цього потрібно зробити аналіз великої кількості стандартних зразків та порівняти результати з паспортними значеннями. Результати аналізів підприємства не можна назвати достовірними, якщо більше 10% їх перевищує відносну помилку 7%.

Програма САТО призначена для забезпечення роботи спектрометрів із вимірювальною системою САТО або спектрометрів фірми ARL, сумісних з моделлю 3460. Проте програму можна адаптувати і до спектрометрів інших фірм та моделей.

Ця програма може збільшити точність та достовірність спектрального аналізу у кілька разів. Для цих задач у програмі використовується низка оригінальних рішень:

1. Ручне та автоматичне визначення впливу складу.

У процесі спектрального аналізу одні елементи впливають на результат аналізу інших елементів. Для зменшення цього впливу аналітик методом проб і помилок обирає елементи, що впливають, рівняння корекції та коефіцієнти впливу таким чином, щоб результат аналізу зразків був якомога ближче до їх правильних значень. Такий спосіб не дає хорошого результату навіть при одному елементі, що впливає. Програма САТО автоматично знаходить ці значення. При цьому точки стандартних зразків із комплектів різних сплавів лягають на одну криву. Розрахунки багатомірної регресії ведуться в ортогональних поліномах Чебишева, які на кінцевому етапі перетворюються на алгебраїчний поліном.

## 2. Метод врахування невказаних концентрацій.

У паспортах стандартних зразків наведені концентрації не всіх хімічних елементів. Наприклад, у паспорті до стандартних зразків ЛГ-27 – ЛГ-31 зазначено лише вміст Бору, тоді як насправді там міститься багато інших хімічних елементів. Комп'ютерні програми вважають невказані концентрації рівними нулю. Насправді, там зовсім інші значення. Якщо не враховувати концентрації цих елементів при врахуванні впливу складу та врахуванню розбавлення основи, відповідні коефіцієнти визначаються неправильно. Врахування невказаних концентрацій – математичний метод. Він відрізняється від методу виміру невказаних концентрацій на спектрометрі, оскільки в цьому випадку вимір проводиться за програмою, яка не враховує ці еталони, тобто з іншим взаємним впливом хімічних елементів. Для розв'язання цього завдання основні математичні функції зроблені рекурентними, тобто такими, що викликають самі себе.

3. Вікна графіків "тягнуться", що дозволяє, змінюючи прозорість, накладати їх один на одного для порівняння за різних умов та методів аналізу.

Програма працює з абсолютними та відносними відліками, у лінійному та логарифмічному масштабах, методами контрольного та двох еталонів, з єдиною та шматковою апроксимацією. Програма вибирає аналітичні лінії елемента відповідно до концентрації. Програма контролює стан спектрометра.

Графічні та табличні дані виключаються та включаються в аналіз клацанням миші. Масштаб графіка і вага точок стандартів змінюються колесом миші. Програма має інтегровану довідкову систему та працює з базою даних SQL локальної мережі: створює та видаляє таблиці, читає, записує, стирає та виправляє записи.

Програма написана в безпечних кодах мовою C# і призначена для роботи в операційній системі Windows 7 або Windows Vista, але може працювати в Windows XP з платформою Framework.NET не нижче 2.0. Програма не вимагає інсталяції.

Безкоштовна версія програми САТО має всі можливості, вказані вище. Ця програма може керувати спектрометром, забезпеченим програмним забезпеченням Win OE. Спектрометри, забезпечені програмою OXSAS, мають інший протокол обміну і керуватися цією програмою не можуть.

Нижче показані графіки для вуглецю в сталях, побудовані в лінійному масштабі зваженим МНК.

Перший графік - з обліком розведення основи:

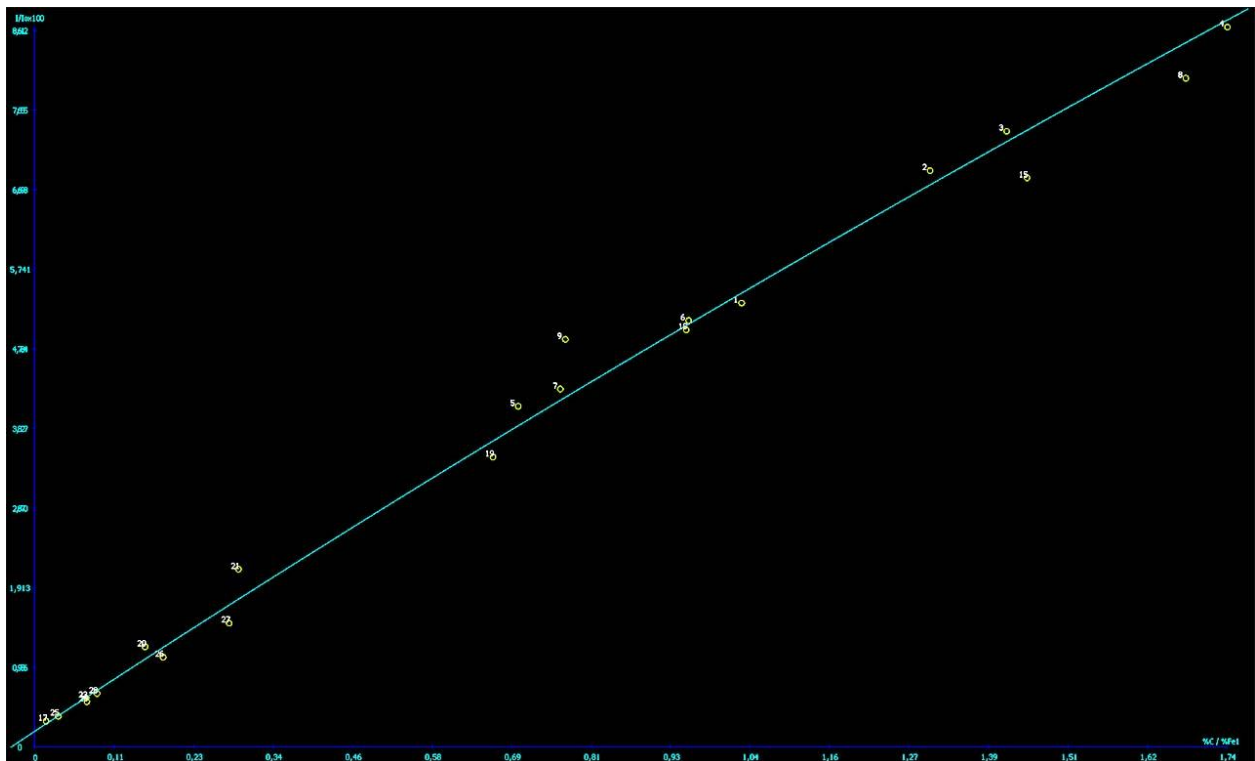


Рисунок 1.4 — Облік розведення основи[3]

Другий отриманий з першого після корекції знайденого комп'ютером впливу третіх елементів:

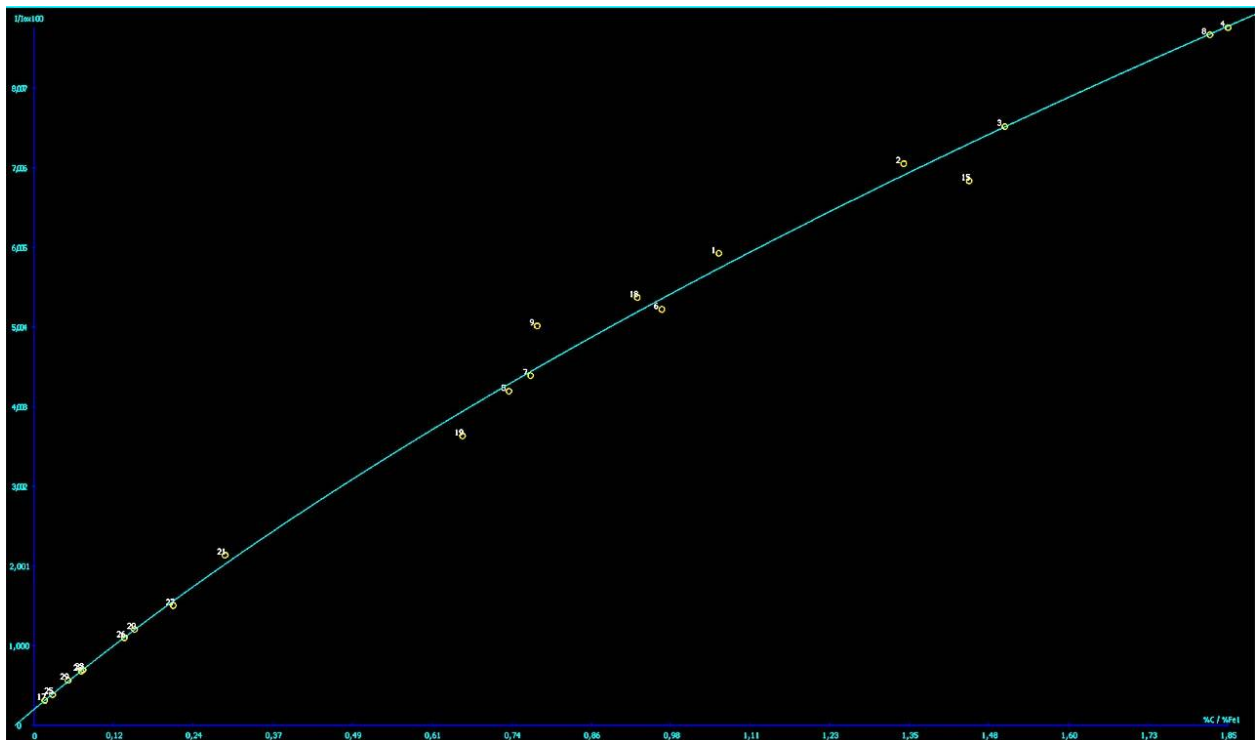


Рисунок 1.5 — Корекція впливу третіх елементів[3]

Третій отриманий з першого аналогічно до другого, але з обліком неоголошених концентрацій:

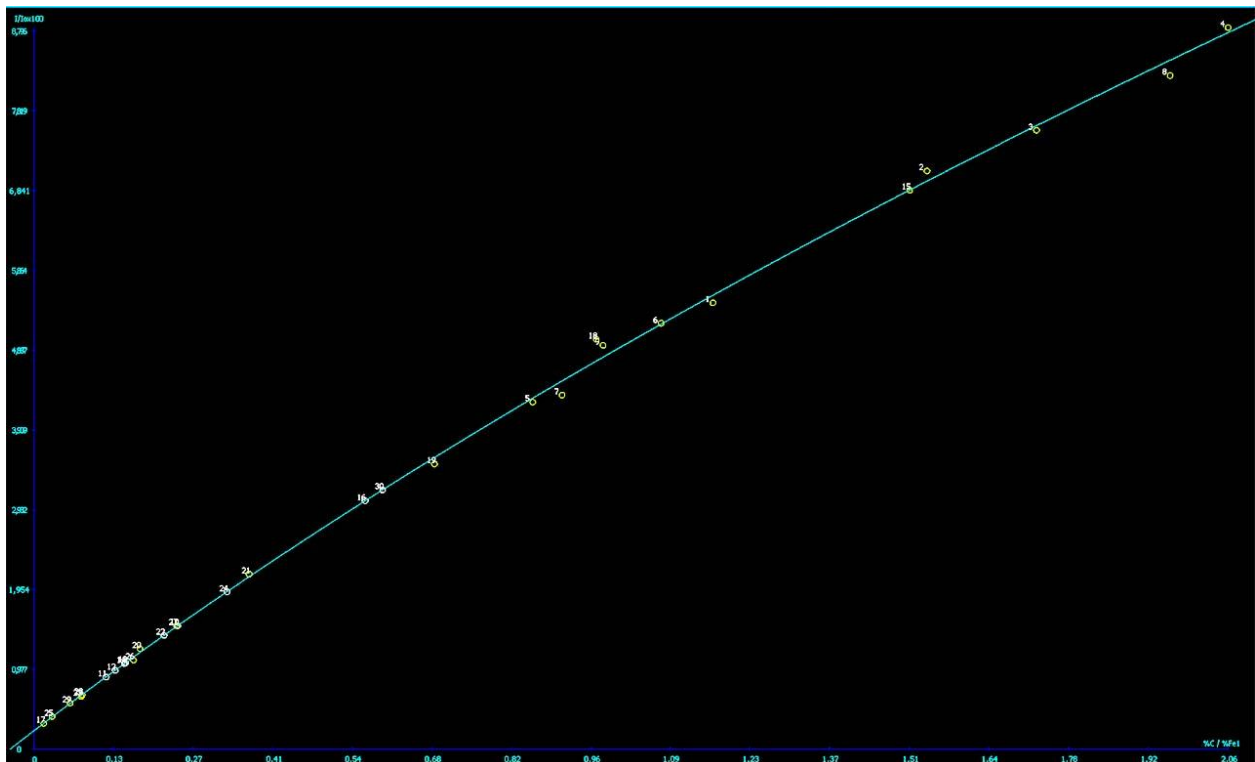


Рисунок 1.6 — Облік неоголошених концентрацій[3]

Відхилення точок від лінії графіка характеризують помилки, які будуть отримані у процесі спектрального аналізу невідомих зразків.

Програма SATO у Windows Vista:

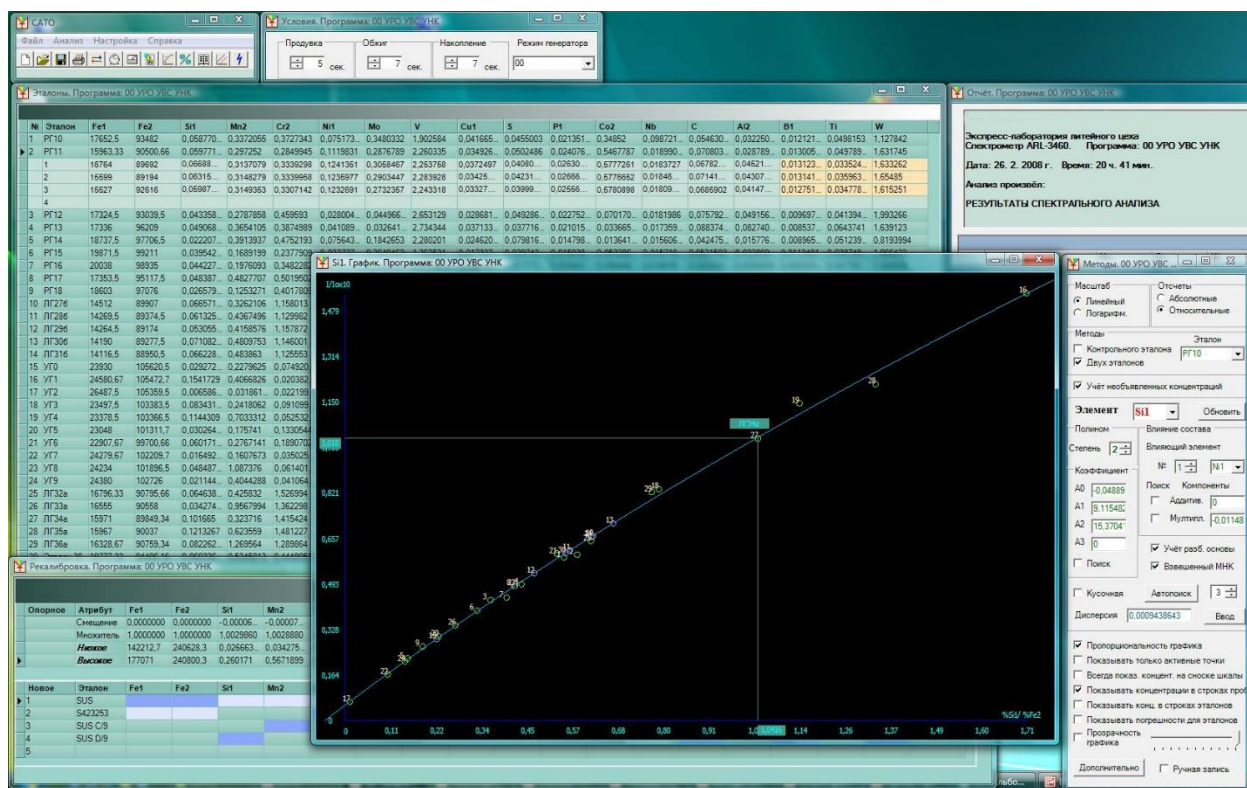


Рисунок 1.7 — Програма SATO[3]



### 1.3 Розробки ТОВ «МОРС» у галузі емісійної аналітики

Фотоелектронні касети (ФЕК) для модернізації емісійних спектрометрів.

Склад ФЕК для модернізації емісійних спектрометрів

- блок фотоголовки (різної конструкції для різних типів спектрографів)
- керування по шині USB, блок живлення фотоголовки; комп'ютерний комплекс
- програма під середовище WIN XP.

Кількість лінійних ПЗЗ у фотоголовці визначається спільно замовником та виконавцем виходячи з аналітичних завдань замовника та мінімізуються у зв'язку з цим витрати на модернізацію.

З 1996 р. випускалися ФЕК на шину ISA, з 2000 р. – на шину PCI (з адаптером 1751 фірми «Advantek»). З 2008 р. проводиться заміна старих ФЕК на ФЕК нового типу електроніки під шину USB та програмне забезпечення під WIN XP. Заміна пов'язана зі старінням комп'ютерів, що працюють з операційною системою WIN 98.

#### Основные параметры систем регистрации ФЭК.

|                                                       |                          |
|-------------------------------------------------------|--------------------------|
| Размер одного чувствительного элемента ПЗС            | 8x200 мкм                |
| Число элементов в одной ПЗС                           | 3648                     |
| Размер чувствительной зоны 1 ПЗС для ФЭК-N/3648/БМЗ   | 28 мм                    |
| Размер чувствительной зоны 1 ПЗС для ФЭК-N/3648/МЗ    | 29.2 мм                  |
| Размер мертвой зоны при расположении ПЗС встык        | 11.6 мм                  |
| Размер мертвой зоны для приборов серии ФЭК-N/3648/БМЗ | 0.1 мм                   |
| Минимальная экспозиция 1 кадра                        | 200 мс                   |
| Максимальная экспозиция                               | 30000 мс                 |
| Динамический диапазон 1 кадра                         | 1300                     |
| Разрядность АЦП                                       | 12 бит                   |
| Диапазон спектральной чувствительности                | 190-950 нм               |
| Типовое количество ПЗС для приборов                   | ПГС-2 ДФС-8 МФС-8 ИСП-30 |
| встык с мертвыми зонами                               | 6 4 10 5                 |
| без мертвых зон                                       | 9 6 12 6-8               |

Рисунок 1.8 — Основні параметри систем реєстрації ФЕК[4]

ФЕК має 6 ПЗЗ, реєстрація без мертвих зон, на ділянці в 175 мм (загальна робоча ділянка ДФС-8 – 180 мм) спектр реєструється за допомогою 21800 дискретних елементів ПЗЗ, при розмірі елемента 8x200 мкм. При середній ширині лінії 5 елементів та захисному інтервалі в 2 елементи одночасно може бути

zareєстровано понад 3000 спектральних ліній. Можливе довільне встановлення будь-якої мертвої зони між сусідніми ПЗЗ для виключення спектральних ділянок, на яких відсутні аналітичні лінії.

Спектрографи ДФС-8 можуть мати різне значення дисперсії (3, 4 і 6 А/мм), одночасно ділянка спектра, що реєструється, залежить від застосовуваної споживачом типу ґратки в спектральному приладі.

Найменування аналітичних програм - SM2008 (під WIN XP); SR303-USB-n та SPDA-USB-n ( під WIN XP ); та SR303-PCI-n та SPDA-PCI-n ( під WIN 98)

Спектроскопіст-аналітик може розробити будь-яке число методик, оператор — працювати з будь-якою методикою на свій вибір.

Можливий вибір будь-яких аналітичних ліній або аналітичних пар із спектрального діапазону приладу з урахуванням рекомендацій ГОСТ та власного досвіду. Облік фону під лінією проводиться за результатами вимірювання фону з обох боків від неї шляхом апроксимації. Метод апроксимації вибирає аналітик.

Для встановлення нової методики аналітику надаються:

- Великі бази даних спектральних ліній.
- Альбоми спектрів різних елементів або сплавів (саме для спектрографа користувача).
- Різні методи калібрування спектру та компенсації його термодрейфу.
- Можливість проведення якісного аналізу невідомого металу.
- Можливість роботи в кількох вікнах з паралельними вимірами та опорним спектром.
- Можливість детального розгляду кожної аналітичної лінії у потрібному масштабі.
- Можливість оцінки спектра загалом (повний спектр із розбивкою на відрізки, що фіксуються кожним ПЗЗ).

- Можливість архівування спектрів усіх еталонів, наборів градувальних кривих та наборів аналітичних ліній.

- Можливість після одноразового запису спектрів еталонів проводити будь-які методичні дослідження без реальних вимірів шляхом імпорту цих спектрів.

- Можливість простежити за довгостроковою динамікою графіків шляхом виведення їх на екран монітора.

Програма автоматично будує графіки градування при запам'ятовуванні більше однієї аналітичної точки набору.

Вибором відповідного полінома можна побудувати градувальну криву для набору аналітичних точок, що не лягають на пряму ні в звичайному, ні в логарифмічному масштабі.

Робота оператора:

- Можливість оперативної перевірки комплексу за 1-2 еталонами з автоматичним корегуванням (якщо необхідно) градувальних кривих.

- Можливість контролювати процес вимірювання за 3 спектральними вікнами.

- Можливість зняття серії паралельних вимірювань без спілкування з комп'ютером – програма чекає на зміну зразка оператором і починає наступний вимір у момент появи оптичного сигналу від чергового зразка (синхронізації «по спалаху»).

- Можливість автоматичного архівування всіх спектрів, що знімаються.

- Можливість автоматичного створення всіх звітів.

- Можливість корекції заголовка звіту.

- Можливість друку спектрів із програми або з WORD 98.

Процес обробки спектрів, що знімаються:

Програма автоматично корегує спектральну шкалу при термодрейфі приладу. У разі відсутності підтяжки, оператор інформується.

Обробка даних та обчислення концентрацій повністю автоматизовані.

Одразу після завершення зйомки зразків звіт готовий до друку.

Вигляд основних вікон програми наведено на рисунках:

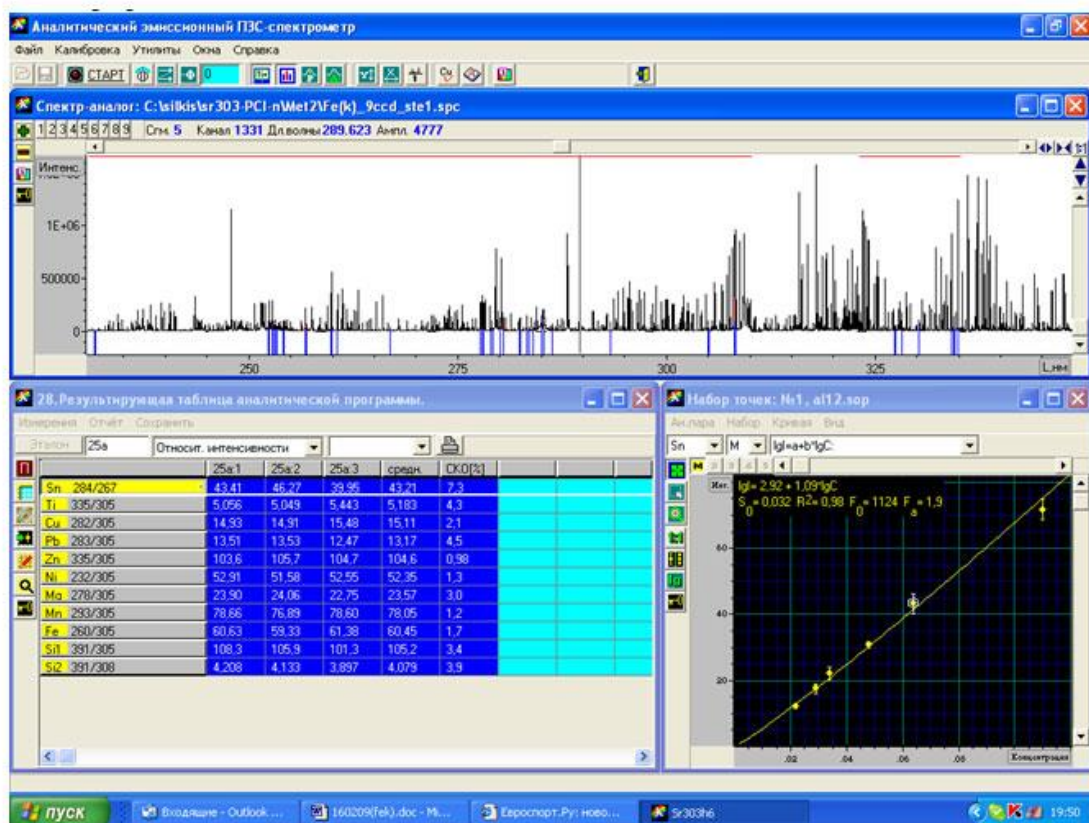


Рисунок 1.9 — Основне вікно програми[4]

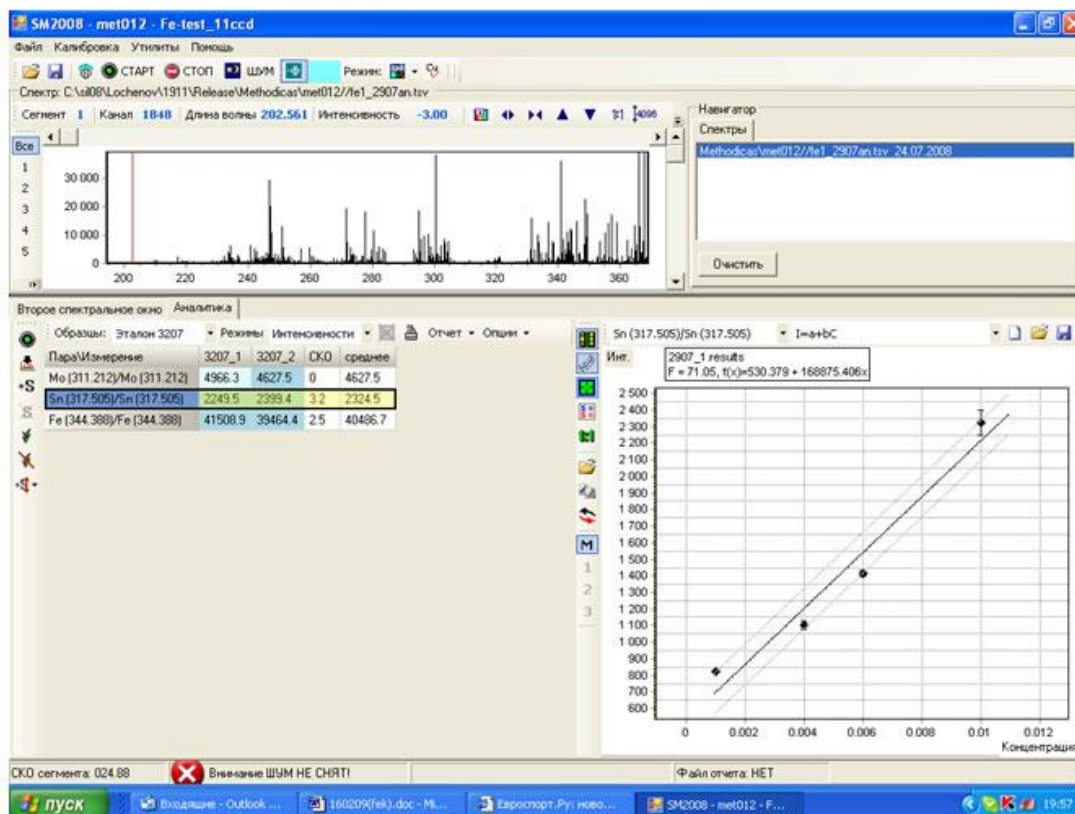


Рисунок 1.10 — Друге спектральне вікно[4]

З рисунків бачимо, що реалізовано візуальне відображення спектру у вигляді діаграми, в якій ось абсцис являє собою значення довжини хвилі, а ось ординат інтенсивність. Також бачимо реалізоване відображення концентрації електронів і можливість відобразити дані по еталонам, що наявні в базі даних програми. Візуальне відображення спектру та наявність даних по еталонам є суттєвою характеристикою для програм роботи зі спектрометричними даними, тому ці можливості будуть враховані при розробці проекту інформаційної системи спектрометричної лабораторії.

Щодо ФЕК випущених до 2007 р. (включно) «МОРС» здійснює заміну електроніки (управління по шині USB замість ISA і PCI), і встановлює нове програмне забезпечення під WINDOWS XP.

## 2. ВИЗНАЧЕННЯ ВИМОГ СИСТЕМИ

Вимоги до ПО, що буде спроектовано:

- Отримання даних замірів на спектрометрі шляхом імпорту відповідного текстового файлу.
- Зберігання даних замірів на спектрометрі на спеціально виділеному ПК в базі даних. Створення бази даних буде відбуватись на сервері Microsoft SQL Server, що буде встановлено на виділеному ПК. Задачі по створенню бази даних, таблиць та процедур будуть виконуватись за допомогою написання та виконання на сервері відповідних запитів мовою T-SQL у системі керування базами даних Microsoft SQL Management Studio.
- Веб-додаток на основі веб-фреймворку Django із логікою зберігання, редагування та аналізу даних замірів в рамках одного додатку Django. Також в рамках окремого другого додатку необхідно реалізувати систему аутентифікації користувача.

Фреймворк Django обраний, адже він є безкоштовним, вільно розповсюджуваним, а також підтримує взаємодію із Microsoft SQL Server за допомогою модулю Mssql-Django. Важливою особливістю є офіційно зазначена підтримка взаємодії Django із найбільш використовуваними базами даних, такими як PostgreSQL, MariaDB, MySQL, Oracle, SQLite. За необхідності, можна змінити використовувану у веб-додатку базу даних або додати нову. При цьому не треба буде робити ніяких змін зі сторони коду проекту Django, адже за допомогою притаманному фреймворку Django механізму міграцій код проекту буде автоматично підготований для підключених баз даних у підтримуваному ними вигляді.

- Веб-інтерфейс взаємодії із даними замірів. Логічна розмітка блоків інформації повинна бути написана мовою розмітки гіпертексту (HTML), форматування стилю веб-інтерфейсу необхідно реалізувати за допомогою написання та підключення відповідних файлів каскадних таблиць стилів (CSS). Для більшої гнучкості веб-інтерфейсу та оптимізації розміру файлів

шаблонів використовувати мову Django-шаблонів у HTML-сторінках шаблонів.

- Різні рівні доступу до функцій веб-інтерфейсу. Реалізувати на основі перевірки поля належності до категорії “superuser” користувача, що аутентифіковано. Відповідно, доступ до редагування даних замірів надавати лише користувачам, що належать до даної категорії.
- Візуалізація спектральних зрізів, експорт отриманих графіків у растрових та інших форматах (PNG, JPG, PDF, SVG, CSV, XLSX). Використовувати Django-модуль бібліотеки FusionCharts[5].

Даний модуль підтримує роботу із різними типами вхідних даних (Графік можна отримати із даних у форматі JSON, XML або масиву даних), зручне додавання можливостей взаємодії із графіками (сотні підтримуваних подій та методів), повний контроль конфігурації графіку за допомогою повного доступу до об’єкту графіку FusionCharts, відсутність необхідності у написанні коду JavaScript, експортування графіку у різноманітних форматах та пряме підключення до бази даних.

- Автоматичний аналіз наявних у базі спектрів на предмет наявності піків та визначення яким спектральним лініям відповідають знайдені піки. Підтримку реалізувати для спектральних ліній атому Цинку, спектральних ліній іона Цинку, спектральної лінії водню серії Бальмера H $\alpha$ , спектральної лінії Кисню.

### 3. ПРОЕКТУВАННЯ СИСТЕМИ

Алгоритм імпорту даних до БД та редагування інформації щодо імпортованого виміру:

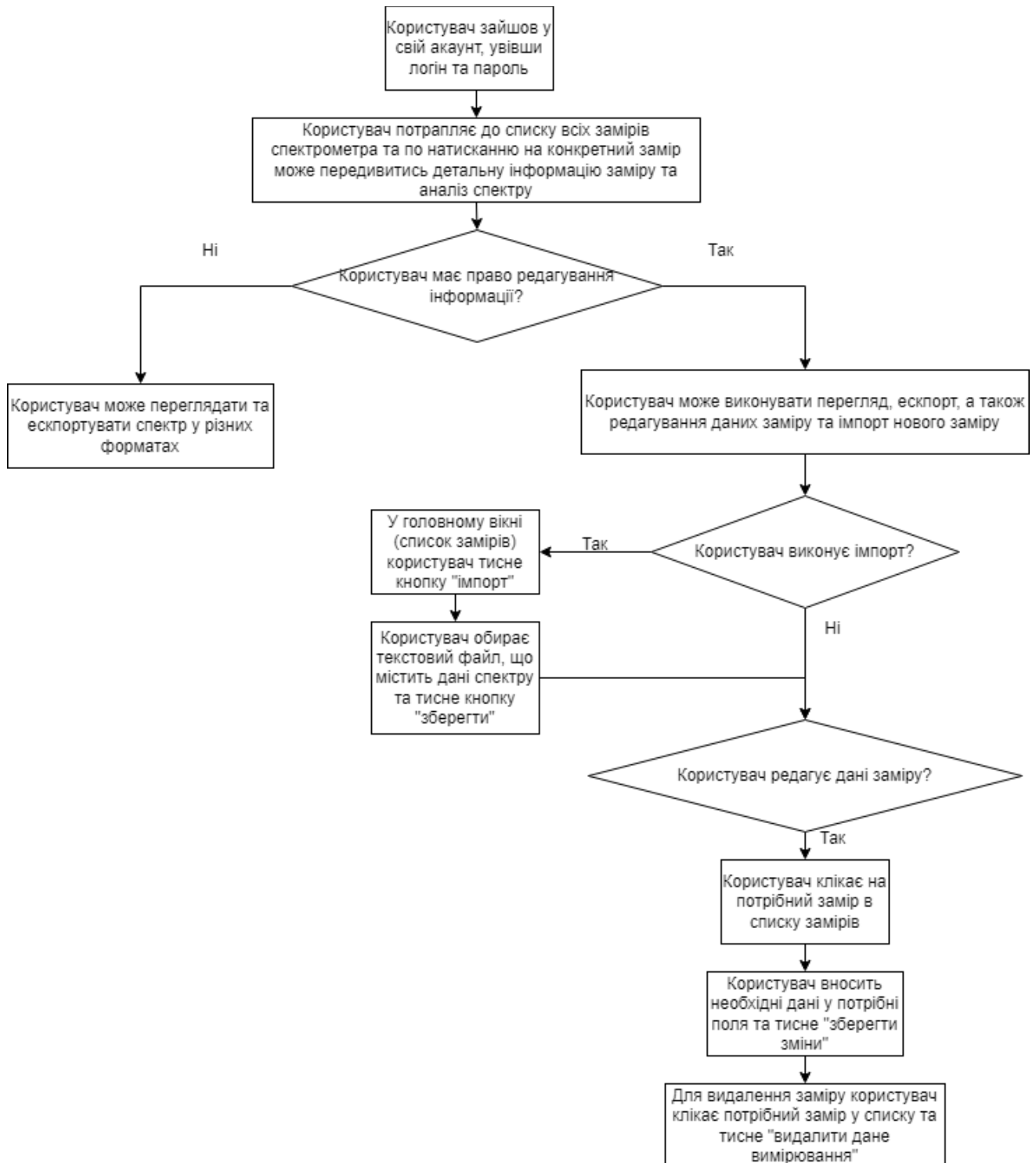


Рисунок 3.1 — Алгоритм основної логіки системи

Формат рядка текстового файлу, що містить дані спектру:  
<ціла частина>(опціонально: точка, <дробова частина>)<пробіл або



табуляція><ціла частина>(опціонально: точка, <дробова частина>)<перенос строки>

Відповідно, спочатку у рядку вказується довжина хвилі і далі через пробіл або табуляцію вказується інтенсивність в умовних одиницях. Кількість таких рядків повинна бути більше або дорівнювати одиниці.

Приклад файлу з даними у правильному форматі (відкрито у програмі Notepad++):

```
444.92→50.24061148CRLF
445.05→45.08328162CRLF
445.18→44.31552734CRLF
445.31→45.40451145CRLF
445.44→42.38224367CRLF
445.56→44.58070664CRLF
445.69→46.52439428CRLF
445.82→46.66763132CRLF
```

Рисунок 3.2 — Приклад файлу для імпорту

Обрано саме такий формат текстового файлу для імпорту через зручність та простоту його використання, а також через те, що саме у такому форматі відбувається копіювання даних із комірок у найбільш популярних пакетах роботи із табличними даними (зокрема Excel).

Проект таблиць із даними про виміри:

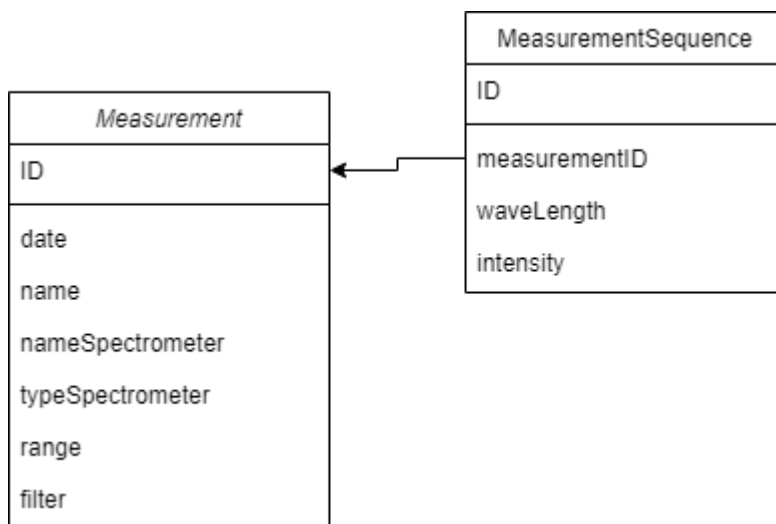


Рисунок 3.3 — Схема таблиць із даними вимірів

Таблиця **Measurement** містить параметри запиту до спектрометра: дату та час, загальну назву, назву спектрометра, тип спектрометра, діапазон, крок, використаний фільтр.

Таблиця MeasurementSequence містить результати запиту:

- Ідентифікатор запиту
- Довжину хвилі
- Інтенсивність в умовних одиницях

## 4 РЕАЛІЗАЦІЯ ПРОЕКТУ ДОДАТКУ

### 4.1 Загальна структура

Вставлено та запущено Microsoft SQL Server, для використання у додатку створено базу Spectro. В даній базі створено таблиці із інформацією про заміри на спектрометрі:

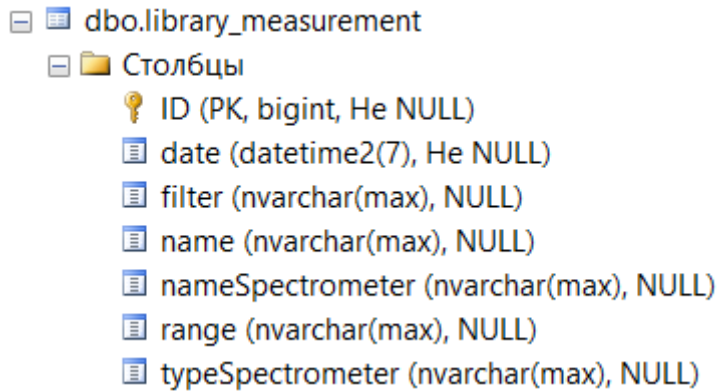


Рисунок 4.1 — Таблиця даних про вимір

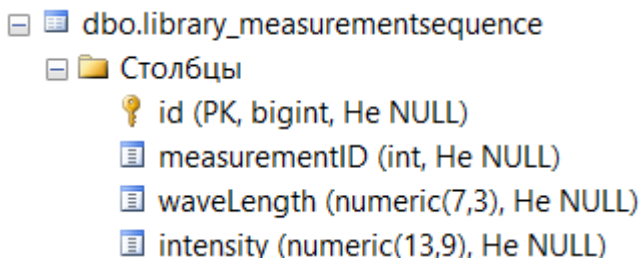


Рисунок 4.2 — Таблиця графіків спектрів

Також для ведення акаунтів користувачів створено таблицю user:

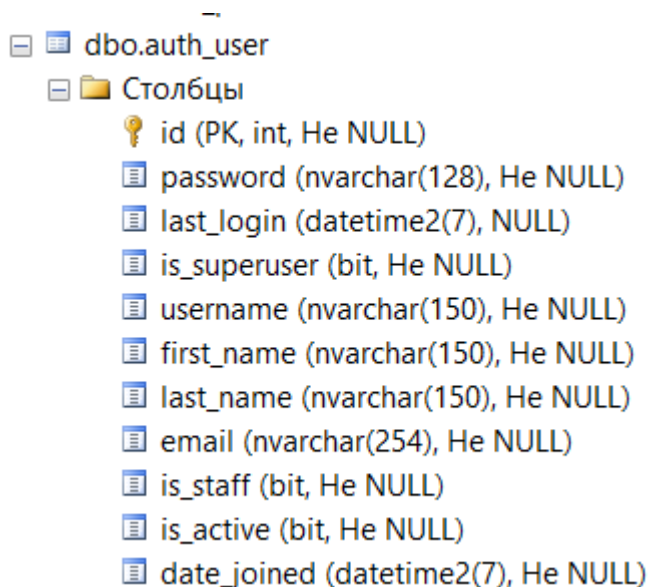


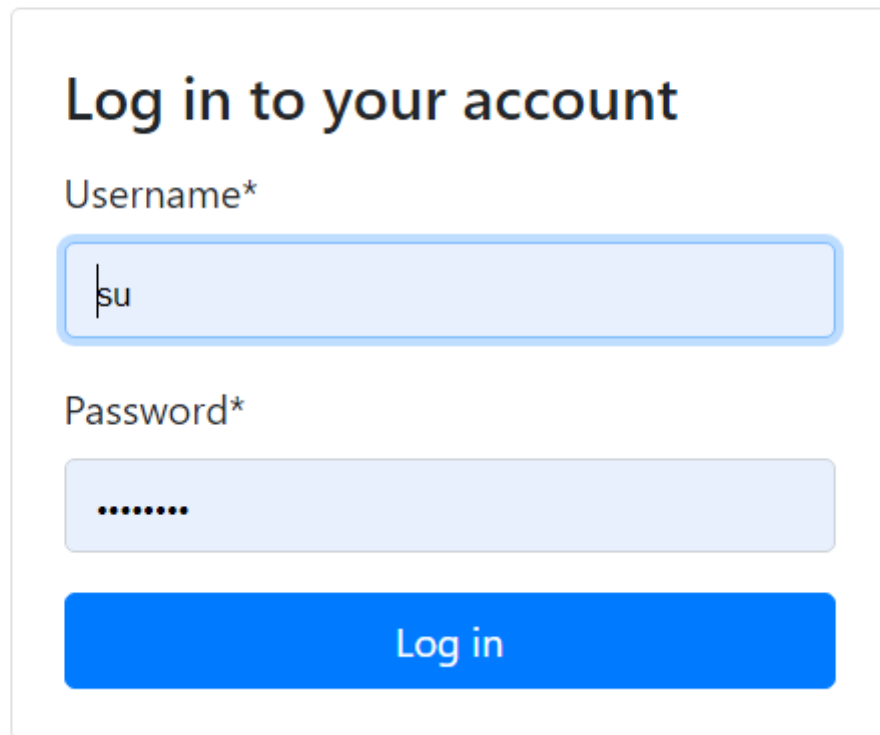
Рисунок 4.3 — Таблиця користувачів

У Django-проекті створено окремо два додатки: додаток `library` являє собою логіку роботи з даними замірів, додаток `accounts` являє собою логіку авторизації користувача у веб-додатку.

## 4.2 Авторизація користувача

При запуску веб-додатку у браузері, користувач бачить форму авторизації:

# Django Authentication



The image shows a login form titled "Log in to your account". It contains two input fields: "Username\*" with the text "su" entered, and "Password\*" with masked characters ".....". Below the fields is a blue button labeled "Log in".

Рисунок 4.4 — Сторінка входу

Щоб отримати можливість переглядати інші сторінки, окрім форми авторизації, користувачу обов'язково необхідно зайти під існуючим акаунтом. Відповідно, для зміни акаунту користувач має змогу вийти з акаунту та знову ввести дані у формі входу. Вихід з акаунту можна зробити за допомогою навігаційної панелі зверху основних сторінок, що відображаються для аутентифікованого користувача.

Реалізовано типовий варіант форми входу із використанням Django-модулю Crispy-Forms. За допомогою параметру `CRISPY_TEMPLATE_PACK` модуль налаштовано на використання стилів Bootstrap 4 для сторінок веб-додатку.

## 4.3 Ведення користувачів

У панелі адміністрування Django-додатку можна за допомогою візуального інтерфейсу додавати користувачів та редагувати їх властивості, зокрема статус `superuser`, що визначає доступність редагування даних спектрів та можливість імпорту:

The screenshot shows the 'Change user' interface in the Django Admin. On the left is a sidebar with navigation links: 'AUTHENTICATION AND AUTHORIZATION' (containing 'Groups' and 'Users', both with '+ Add' links) and 'LIBRARY' (containing 'Measurement sequences' with a '+ Add' link). The main content area is titled 'Change user' and shows details for user 'su'. It includes a 'HISTORY' button in the top right. The 'Username' field is 'su' with a note: 'Required. 150 characters or fewer. Letters, digits and @/./+/-/\_ only.' The 'Password' field shows a hash: 'algorithm: pbkdf2\_sha256 iterations: 260000 salt: lKr4mY\*\*\*\*\* hash: dWmdy5\*\*\*\*\*' with a note: 'Raw passwords are not stored, so there is no way to see this user's password, but you can change the password using this form.' Below are sections for 'Personal info' (First name, Last name, Email address: xelambert@gmail.com) and 'Permissions' (Active, Staff status, Superuser status, each with a checkbox and explanatory text).

Рисунок 4.5 — Сторінка редагування даних користувача

The screenshot shows the 'Add user' interface in the Django Admin. It starts with the title 'Add user' and a message: 'First, enter a username and password. Then, you'll be able to edit more user options.' There are three input fields: 'Username' (with a note: 'Required. 150 characters or fewer. Letters, digits and @/./+/-/\_ only.'), 'Password' (with notes: 'Your password can't be too similar to your other personal information.', 'Your password must contain at least 8 characters.', 'Your password can't be a commonly used password.', 'Your password can't be entirely numeric.'), and 'Password confirmation' (with a note: 'Enter the same password as before, for verification.'). At the bottom right are three buttons: 'Save and add another', 'Save and continue editing', and 'SAVE'.

Рисунок 4.6 — Сторінка додавання нового користувача

## 4.4 Перегляд даних замірів спектрів

Після успішної авторизації, користувачеві відкривається сторінка, що являє собою бібліотеку наявних у базі замірів.

Тут і надалі для візуалізації графіків спектру використовується Django-модуль бібліотеки FusionCharts[5]. Для відображення обрано саме цей інструмент через наявність у безкоштовному варіанті великого різноманіття налаштувань із відображення графіку, а також можливостей його експортування у різні формати файлів.

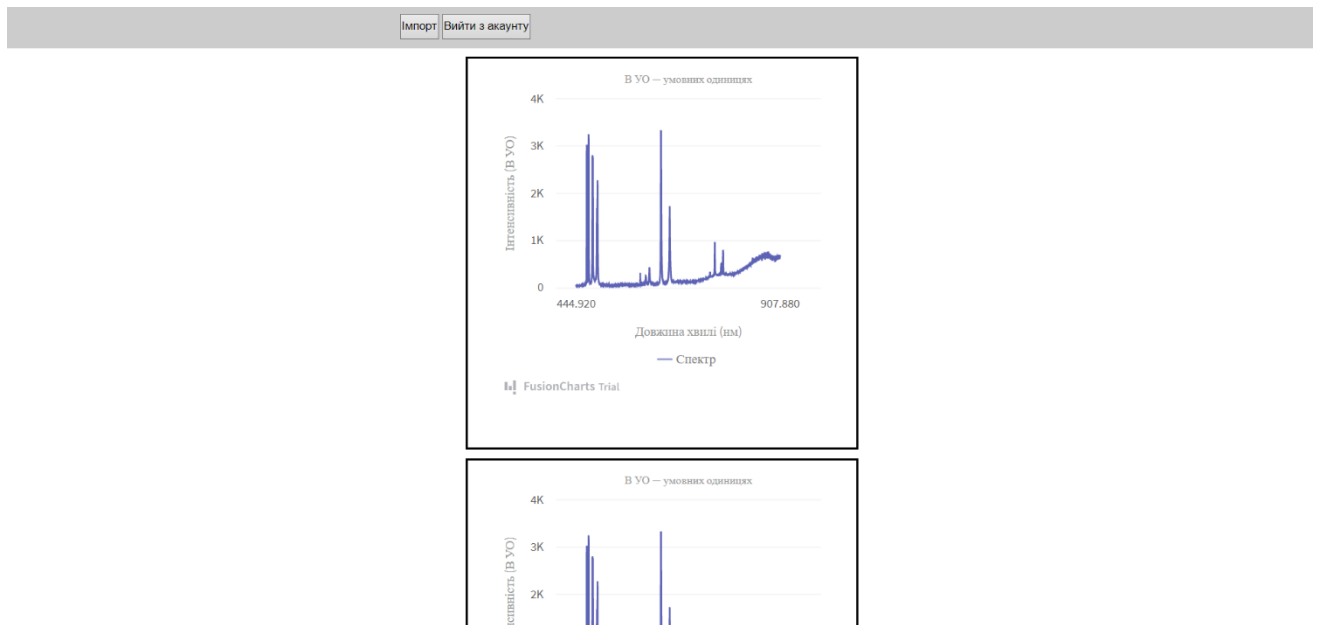
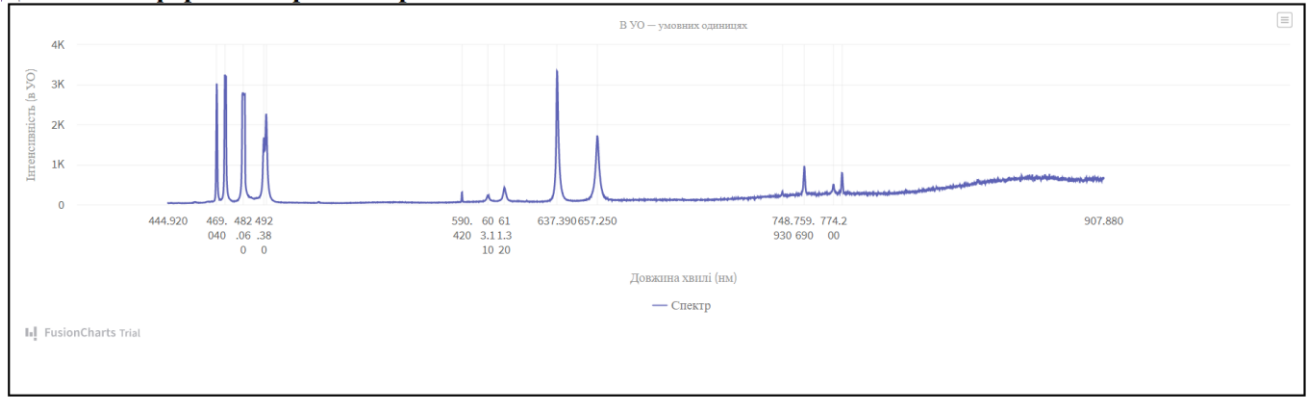


Рисунок 4.7 — Бібліотека замірів

Для переглядання інформації та результатів автоматичного аналізу по певному заміру, треба клікнути лівою кнопкою миші по цьому заміру у списку.

## Детальна інформація про спектр



Пік 469.040 нм: Спектральна лінія атому Цинку  
 Пік 473.040 нм: Спектральна лінія атому Цинку  
 Пік 482.060 нм: Спектральна лінія атому Цинку  
 Пік 492.380 нм: Спектральна лінія іона Цинку  
 Пік 493.540 нм: Спектральна лінія іона Цинку  
 Пік 590.420 нм: Спектральна лінія іона Цинку  
 Пік 603.110 нм: Спектральна лінія іона Цинку  
 Пік 611.320 нм: Спектральна лінія іона Цинку  
 Пік 637.390 нм: Спектральна лінія атому Цинку

Рисунок 4.8 — Детальна інформація (Блок аналізу)

Пік 657.250 нм: Спектральна лінія водню серії Бальмера H $\alpha$   
 Пік 748.930 нм: Спектральна лінія іона Цинку  
 Пік 759.690 нм: Спектральна лінія іона Цинку  
 Пік 774.200 нм: Спектральна лінія іона Цинку  
 Пік 778.350 нм: Спектральна лінія Кісню

|                                |                                           |
|--------------------------------|-------------------------------------------|
| Дата:                          | 2022-05-28 19:04:11.94300                 |
| Назва виміру:                  |                                           |
| Назва спектрометру:            |                                           |
| Тип спектрометру:              |                                           |
| Діапазон:                      |                                           |
| Фільтр розділення порядків:    |                                           |
| <a href="#">Зберегти зміни</a> | <a href="#">Видалити дане вимірювання</a> |

Рисунок 4.9 — Детальна інформація (Блок даних)

У верхній частині бачимо графік спектру, на якому додано автоматичним чином визначені піки графіку.

У правому верхньому кутку графіка спектру бачимо кнопку експорту, за допомогою якої можемо експортувати графік у різних форматах, які зазначені у проекті веб-додатку.

Для визначення піків було використано функцію Python-бібліотеки SciPy — `signal.find_peaks()` із параметрами `width = 3` та `prominence = 120`.

Параметр `width` визначає порог ширини піку.

Параметр `prominence` являє собою мінімальну висоту, необхідну для спуску, щоб потрапити з вершини на будь-яку вищу місцевість. Його використання дозволяє виокремити найбільш значущі піки графіку.

Також для згладжування шуму на графіку було використано функцію `lfiter()` із цієї ж бібліотеки.



Нижче бачимо знайдені піки та автоматичне визначення, які спектральні лінії вони собою являють. У поточній версії автоматичного аналізу наявне визначення наступних спектральних ліній:

- Спектральні лінії атому Цинку (468.01, 472.2, 481.05, 636.23 нм)
- Спектральні лінії іона Цинку (492.4, 589.44, 602.12, 610.25, 747.88, 758.85, 773.25 нм)
- Спектральна лінія водню серії Бальмера H $\alpha$  (656.3 нм)
- Спектральна лінія Кисню (777.42 нм)

Нижче бачимо додаткові дані щодо заміру.

В залежності від прав у акаунта, під яким користувач зайшов до веб-додатку, поля цих даних будуть доступні для модифікування, а також будуть відображені кнопки збереження змін та видалення заміру.

На скріншоті зверху бачимо відображення для користувача із правами на редагування. Тепер вийдемо з цього акаунту за допомогою кнопки зверху екрану «вийти з акаунту» та зайдемо через акаунт без прав на редагування, далі відкриємо знову цей замір для переглядання даних:

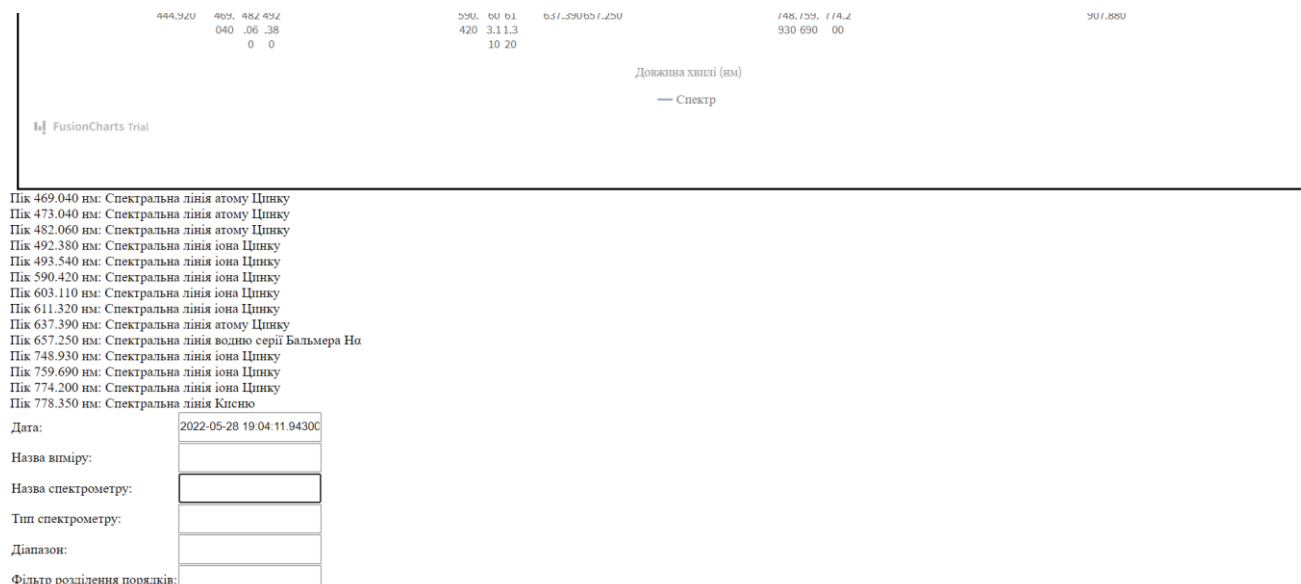


Рисунок 4.10 — Перевірка доступності редагування даних

Прокручуємо сторінку вниз і впевнюємося, що поля недоступні для редагування та відсутні кнопки збереження та видалення даних.

## 4.5 Імпорт спектру

|    |        |   |             |      |
|----|--------|---|-------------|------|
| 1  | 444.92 | → | 50.24061148 | CRLE |
| 2  | 445.05 | → | 45.08328162 | CRLE |
| 3  | 445.18 | → | 44.31552734 | CRLE |
| 4  | 445.31 | → | 45.40451145 | CRLE |
| 5  | 445.44 | → | 42.38224367 | CRLE |
| 6  | 445.56 | → | 44.58070664 | CRLE |
| 7  | 445.69 | → | 46.52439428 | CRLE |
| 8  | 445.82 | → | 46.66763132 | CRLE |
| 9  | 445.95 | → | 45.68746653 | CRLE |
| 10 | 446.08 | → | 46.8716497  | CRLE |
| 11 | 446.21 | → | 46.75782971 | CRLE |
| 12 | 446.34 | → | 46.04754708 | CRLE |
| 13 | 446.47 | → | 52.00452643 | CRLE |
| 14 | 446.6  | → | 47.82011013 | CRLE |
| 15 | 446.73 | → | 49.80547066 | CRLE |
| 16 | 446.85 | → | 48.13355528 | CRLE |
| 17 | 446.98 | → | 50.64664169 | CRLE |
| 18 | 447.11 | → | 47.67229026 | CRLE |
| 19 | 447.24 | → | 45.31168879 | CRLE |
| 20 | 447.37 | → | 41.40261905 | CRLE |
| 21 | 447.5  | → | 44.56287521 | CRLE |
| 22 | 447.63 | → | 44.10478891 | CRLE |
| 23 | 447.76 | → | 41.49117376 | CRLE |
| 24 | 447.89 | → | 44.83454549 | CRLE |
| 25 | 448.02 | → | 43.07261234 | CRLE |
| 26 | 448.14 | → | 46.08669043 | CRLE |
| 27 | 448.27 | → | 45.25545603 | CRLE |
| 28 | 448.4  | → | 44.09437727 | CRLE |
| 29 | 448.53 | → | 45.52302174 | CRLE |
| 30 | 448.66 | → | 46.73070413 | CRLE |
| 31 | 448.79 | → | 45.89259218 | CRLE |
| 32 | 448.92 | → | 47.46239187 | CRLE |
| 33 | 449.05 | → | 44.77076744 | CRLE |
| 34 | 449.18 | → | 45.59352418 | CRLE |
| 35 | 449.3  | → | 45.91647014 | CRLE |
| 36 | 449.43 | → | 45.2330453  | CRLE |
| 37 | 449.56 | → | 44.6954406  | CRLE |
| 38 | 449.69 | → | 47.95305392 | CRLE |
| 39 | 449.82 | → | 47.83335289 | CRLE |
| 40 | 449.95 | → | 49.27182916 | CRLE |
| 41 | 450.08 | → | 51.74188869 | CRLE |
| 42 | 450.21 | → | 52.95736961 | CRLE |
| 43 | 450.34 | → | 50.77465194 | CRLE |
| 44 | 450.47 | → | 49.39542376 | CRLE |

Рисунок 4.11 — Файл для імпорту

Маємо файл із даними спектру у форматі, зазначеному вище у розділі проектування веб-додатку:

Заходимо з акаунту, в якого є право редагування даних, тиснемо кнопку «імпорт»:

На сторінці, що відкрилась, тиснемо кнопку завантаження файлу та вибираємо наш файл спектру:

## Додати спектр

File:  sampleSpectro.txt

Рисунок 4.12 — Сторінка імпорту

Тиснемо кнопку збереження.

Відбудеться валідація вмісту файлу згідно із форматом строк у файлі, описаному в проекті веб-додатку, а саме за наступним регулярним виразом:

$$r'^{(\backslash d+([.]\d+){0,1}\backslash s\d+([.]\d+){0,1}\backslash r\backslash n)}+\$$$

При наявності помилки буде відображено відповідну сторінку із текстом помилки. При успішному завантаженні спектру відобразиться оновлена сторінка списку замірів:

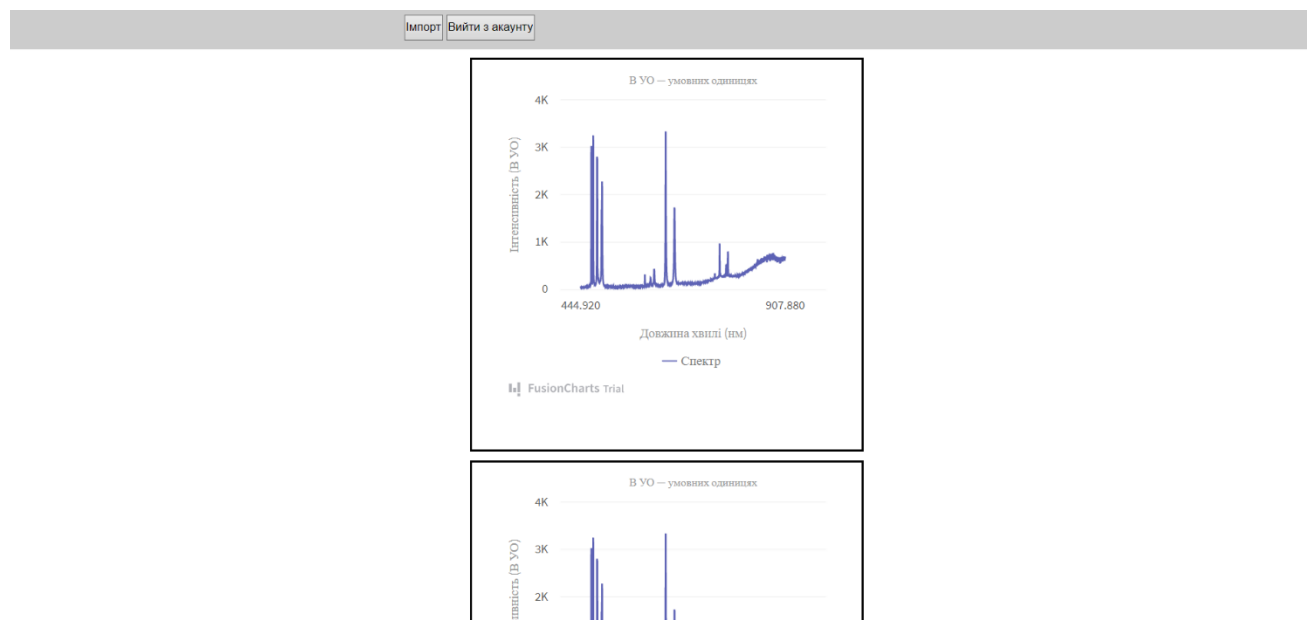


Рисунок 4.13 — Оновлена бібліотека спектрів

Бачимо, що наш спектр успішно імпортовано.

## 4.6 Аналіз даних заміру

Відкриємо завантажений у попередньому розділі замір та перевіримо якість автоматичного аналізу спектру.

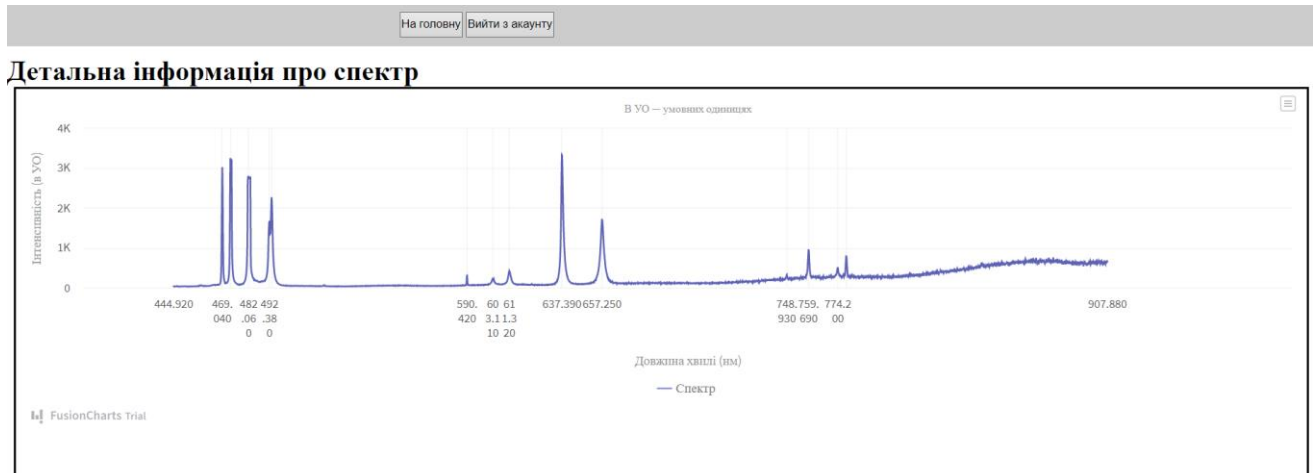


Рисунок 4.14 — Автоматичний пошук піків спектра

Пік 469.040 нм: Спектральна лінія атому Цинку  
Пік 473.040 нм: Спектральна лінія атому Цинку  
Пік 482.060 нм: Спектральна лінія атому Цинку  
Пік 492.380 нм: Спектральна лінія іона Цинку  
Пік 493.540 нм: Спектральна лінія іона Цинку  
Пік 590.420 нм: Спектральна лінія іона Цинку  
Пік 603.110 нм: Спектральна лінія іона Цинку  
Пік 611.320 нм: Спектральна лінія іона Цинку  
Пік 637.390 нм: Спектральна лінія атому Цинку  
Пік 657.250 нм: Спектральна лінія водню серії Бальмера H $\alpha$   
Пік 748.930 нм: Спектральна лінія іона Цинку  
Пік 759.690 нм: Спектральна лінія іона Цинку  
Пік 774.200 нм: Спектральна лінія іона Цинку  
Пік 778.350 нм: Спектральна лінія Кисню

Рисунок 4.15 — Автоматичний аналіз знайдених піків

Як було зазначено раніше, для пошуку піків було використано Python-бібліотеку SciPy, зокрема наявну в ній функцію `signal.find_peaks()`. Також для згладжування шуму була використана функція `lfiter()` з цієї ж бібліотеки. Очікуємо, що буде знайдено наступні піки:

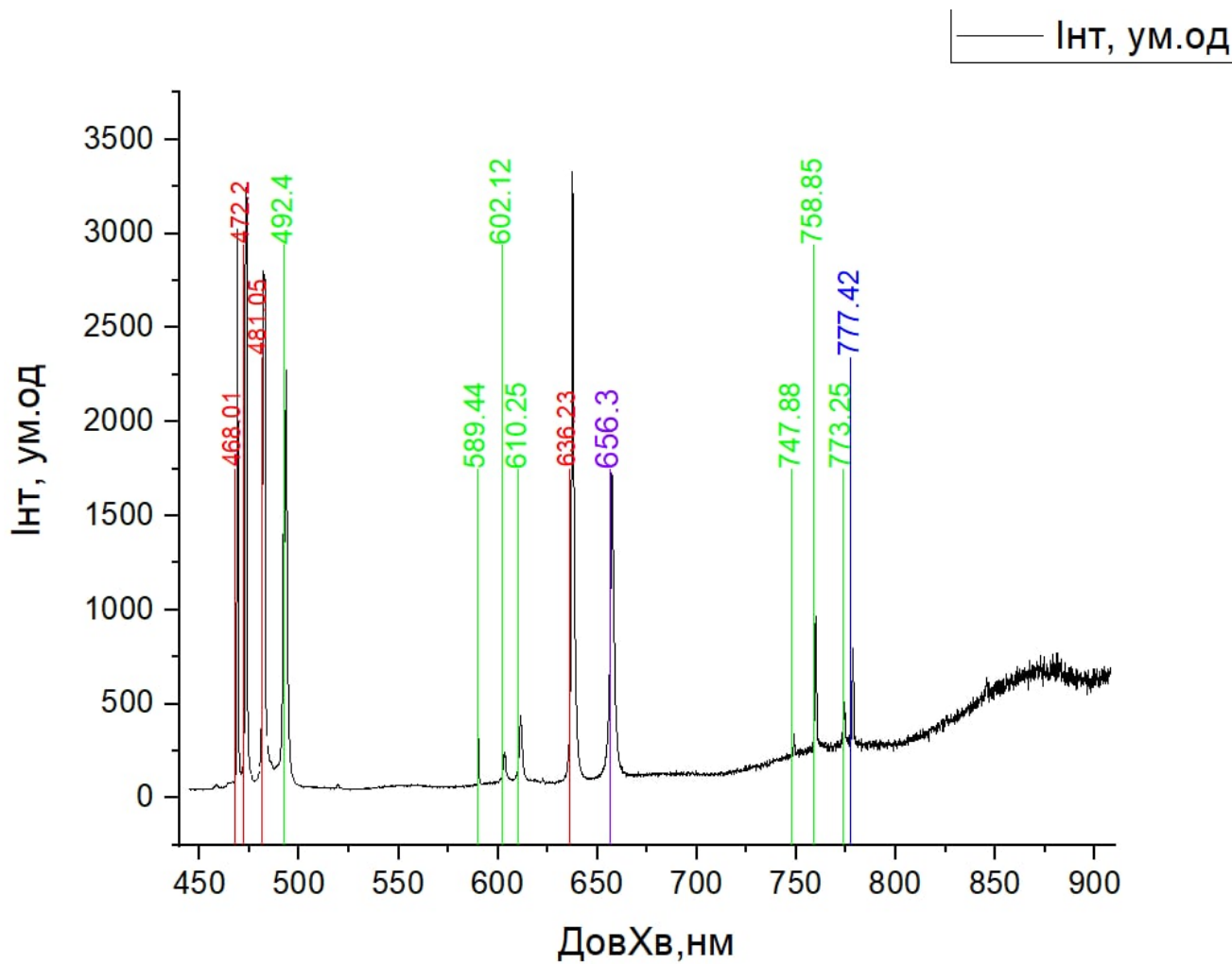


Рисунок 4.16 — Спектр випромінювання плазми підводного розряду між гранул цинку [6,7]

Для перевірки відповідності знайденого піку певній спектральній лінії алгоритм аналізу спектру передбачає знаходження різниці значення довжини хвилі автоматично визначеного піку графіку та занесених у табличні дані програми довжин хвиль спектральних ліній. Якщо модуль цієї різниці не перевищує 1.2 нанометри, програма встановлює відповідність даного автоматично визначеного піку спектральній лінії.

Як можна бачити на спектрі (рисунок 4.16), визначені і помічені спектральні лінії атома йона цинку (відповідно лінії червоного і зеленого кольорів, спектральна лінія водню серії Бальмера  $H\alpha$  (фіолетова лінія) і спектральна лінія кисню (синя лінія). Спектрометричні дані взяті з NIST[8]. Дані по цим спектральним лініям занесені до масиву табличних даних, що використовуються

алгоритмом перевірки відповідності знайдених автоматично піків до спектральних ліній.

Як бачимо із результатів автоматичного аналізу, успішно знайдено піки графіку спектру та вірно визначено їх відповідність спектральним лініям, що наявні у довіднику спектральних ліній, який використовується алгоритмом автоматичного аналізу.

## 4.7 Редагування даних заміру

Проведемо редагування даних для заміру, що було імпортовано у розділі демонстрації імпорту. На даний момент поля виглядають наступним чином:

|                             |                           |
|-----------------------------|---------------------------|
| Дата:                       | 2022-05-28 20:09:43.89700 |
| Назва виміру:               |                           |
| Назва спектрометру:         |                           |
| Тип спектрометру:           |                           |
| Діапазон:                   |                           |
| Фільтр розділення порядків: |                           |

Рисунок 4.17 — Форма даних заміру

Внесемо дані:

|                             |                           |
|-----------------------------|---------------------------|
| Дата:                       | 2022-05-28 20:09:43.89700 |
| Назва виміру:               | Тестовий спектр           |
| Назва спектрометру:         | SOLAR SDH-IV              |
| Тип спектрометру:           | SDH                       |
| Діапазон:                   | 450-905 нм                |
| Фільтр розділення порядків: | ЖС-10                     |
| Зберегти зміни              | Видалити дане вимірювання |

Рисунок 4.18 — Заповнення даних заміру

Тиснемо «зберегти зміни». При наступному відкритті даних щодо цього заміру вже побачимо внесені нами дані.

## ВИСНОВКИ

В ході виконання дипломної роботи бакалавра, були проаналізовані існуючі на даний момент програмні засоби для отримання, обробки та аналізу спектрометричних даних.

З проведеного аналізу сучасних програм роботи зі спектрометричними даними визначено можливості, які надає кожний із розглянутих програмних засобів і виділено основні та найважливіші можливості при роботі зі спектрометрами. На основі сформованого списку основних характеристик даного класу програм розроблено проект програми роботи зі спектрометром та даними його замірів, а саме: основний алгоритм роботи програми, формат файлу імпорту спектру, а також таблиці із відповідними полями. Також було визначено веб-фреймворк і сервер бази даних, що будуть використовуватись реалізованою системою. За даним проектом було створено інформаційну систему спектрометричної лабораторії.

Тестування розробленої програми роботи зі спектрометром показали, що успішно реалізовано зберігання та імпорт даних замірів у базу даних, що використовується додатком; візуалізація графіків спектрів, які наявні в бібліотеці додатку; коректно працює автоматичне визначення піків графіку спектру та їх співставлення із занесеними до довіднику спектральних ліній табличними даними; правильно налаштована система редагування даних заміру; наявна система аутентифікації користувача із різними рівнями прав для різних акаунтів, що заведені у додатку.



## ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

1. Программа для анализа полученных спектроскопических данных CarpetView // ООО «Промэнерголаб» [Электронный ресурс] URL: <https://www.czl.ru/catalog/spektr/spectrometers-and-autocorrelators/spectroscopy-data-analysis-software-carpetview.html>
2. О точности и достоверности спектрального анализа / Мусин Ш. Р. // НПК "СПЕКТРОН" [Электронный ресурс] URL: <http://www.sp-an.com/precision.htm>
3. Программное обеспечение САТО // НПК "СПЕКТРОН" [Электронный ресурс] URL: <http://www.sp-an.com/software.htm>
4. Разработки ООО «МОПС» в области эмиссионной аналитики // ООО «МОПС» [Электронный ресурс] URL: <http://www.ruscastings.ru/work/168/172/192/6163>
5. Django-модуль для бібліотеки FusionCharts // FusionCharts - An Idera, Inc. Company [Электронный ресурс] URL: <https://www.fusioncharts.com/django-charts?framework=django>
6. VEKLICH, A., TMENOVA, T., ZAZIMKO, O., TRACH, V., LOPATKO, K., TITOVA, L., BORETSKIY, V., AFTANDILIANTS, Y., LOPATKO, S., and ROGOVSKIY, I. Regulation of Biological Processes with Complexions of Metals Produced by Underwater Spark Discharge. Springer Proceedings in Physics, 2020, Vol. 247, p. 283-306.
7. Murmantsev A. Peculiarities of plasma spectroscopy of underwater electric spark discharge between molybdenum granules / A. Murmantsev, A. Veklich, V. Boretskij // 17th International Conference of Young Scientists on Energy and Natural Sciences Issues. – 2021 – P. 1-4.
8. Atomic Spectra Database (version 5.2) / A. Kramida, Yu. Ralchenko, J. Reader, and NIST ASD Team (2014) // Gaithersburg, MD: National Institute of Standards and Technology. Atomic Spectra Database | NIST