



Ελληνική Δημοκρατία
Εθνικό και Καποδιστριακό
Πανεπιστήμιο Αθηνών

Πτυχιακή Εργασία

Ανάπτυξη λογισμικού ανάλυσης φασμάτων
μ-XRF σε περιβάλλον Linux

Ελένη Α. Μήτση
ΑΜ: 200600121

Επιβλέπων:
Θεόδωρος Ι. Μερτζιμέκης
Επίκουρος Καθηγητής

Αθήνα 2015

Περίληψη

Από την πειραματική γραμμή SUL-X του εργαστηρίου του ANKA αντλείται ένας μεγάλος αριθμός δεδομένων που αφορά στη μελέτη περιβαλλοντικών δειγμάτων μέσω της τεχνικής μ-XRF. Τα δεδομένα αυτά απαιτούν άμεση ανάλυση για την απεικόνιση της έντασης της καταγεγραμμένης ακτινοβολίας ανά χημικό στοιχείο που εντοπίζεται συναρτήσει των συντεταγμένων της σαρωθείσας επιφάνειας. Σκοπός αυτής είναι ο εντοπισμός περιοχών ενδιαφέροντος για εκτενέστερη μελέτη, αλλά και στοιχείων για επεξεργασία και με άλλες τεχνικές φασματοσκοπίας. Η παρούσα εργασία πραγματοποιήθηκε με σκοπό την ανάπτυξη λογισμικού απεικόνισης, ανοιχτού κώδικα, αυτοματοποιημένης επεξεργασίας και ανάλυσης φασμάτων.

Ο κώδικας “Ricochet” αναπτύχθηκε ως λογική εκτέλεσης πάνω στην ικανότητα της bash να παρεμβαίνει και να εξάγει κείμενο και εφαρμόστηκε δοκιμαστικά σε μια σειρά μετρήσεων περιβαλλοντικών δειγμάτων. Προέκυψε ότι η διαδικασία είναι ακριβής και απόλυτα αυτοματοποιημένη στη συντριπτική πλειοψηφία των δειγμάτων, και σε εκείνα που δεν είναι απόλυτα αυτοματοποιημένη, η παρέμβαση είναι ελάχιστη, σύντομη, περιορίζεται στις αρχικές υπορουτίνες χωρίς να επηρεάζονται οι υπόλοιπες και να απαιτείται παρέμβαση και σε αυτές. Επιπλέον, η εκτέλεσή του αποδείχτηκε σύντομη και οι εξαγόμενοι χάρτες ακριβείς και σαφείς ως προς τη δυνατότητα εξαγωγής συμπερασμάτων.

Abstract

A large number of data derives from the SUL-X beamline of ANKA laboratory, when studying environmental samples using the μ -XRF technique. Immediate data analysis of these samples is required to map the recorded X-ray intensity per element in terms of the scanned surface coordinates. This allows the determination of both regions of interest, for further analysis, and individual elements that need to be processed using different spectroscopic techniques. The present study was conducted for the development of such open source, automated spectrum processing and analyzing software.

“Ricochet” was developed as a means of execution upon the ability of bash to interfere and extract text, and was applied in a trial series of environmental samples. It was concluded that the process was precise and completely automated in the vast majority of the samples, while in the cases that it was not, intervention was minimum, short, concerning only the initial subroutines without neither affecting the rest of them, nor needing interference in them. Furthermore, the execution of the code proved to be short and the derived maps precise and lucid, on the ability of conclusion extraction.