

# МЕТОД РОЗПІЗНАВАННЯ СПЕКТРУ РЕЧОВИН

магістерська кваліфікаційна робота  
студента групи АКІТ-17м з/в  
Коренцвіт О. Б.

керівник роботи  
Довгалець Сергій Михайлович,  
к.т.н., проф. каф. АІТ

# Актуальність

Спектральний аналіз є високочутливим методом якісного і кількісного визначення елементів таблиці Менделєєва в твердих, рідких і газоподібних речовинах. Крім того, широко застосовується при пошуках корисних копалин для визначення хімічного складу зразків руди. У промисловості спектральний аналіз дозволяє контролювати склади сплавів і домішок, що вводяться в метали для отримання матеріалів з заданими властивостями.

# Мета і завдання роботи

Мета роботи полягає в підвищенні швидкодії методу ідентифікації речовин.

Задачі дослідження:

- провести аналіз існуючих методів розпізнавання спектрів;
- підвищення швидкодії обраного методу;
- розробити програмне забезпечення для методу розпізнавання спектрів;
- провести експериментальне дослідження методу розпізнавання спектрів.

# Об'єкт та предмет дослідження

Об'єктом дослідження є процес розпізнавання речовини за її спектром.

Предметом дослідження є алгоритми розпізнавання спектру речовин.

# Існуючі методи ідентифікації речовин за їх спектрами

- Метод ідентифікації спектрів речовин по їх коефіцієнтам кореляції;
- Метод найменших квадратів;
- Метод головних компонент;
- Фотметричний метод аналізу;
- Емісійний метод аналізу.

# Метод визначення складу речовин

$$\begin{cases} x_1 = a_1 * p_a + b_1 * p_b + \dots + z_1 * p_z \\ x_2 = a_2 * p_a + b_2 * p_b + \dots + z_2 * p_z \\ \dots \\ x_n = a_n * p_a + b_n * p_b + \dots + z_n * p_z \end{cases}$$

де  $x_1 \dots x_n$  - вхідний спектр,  $a_1 \dots a_n, b_1 \dots b_n, \dots, z_1 \dots z_n$  - спектри хімічних елементів з бази даних,  $p_a, p_b, \dots, p_z$  - частки відповідних хімічних елементів у вхідній речовині.

# Схема алгоритму динамічного розподілу пам'яті



# Загальна схема алгоритму роботи програми





# Интерфейс программного продукта

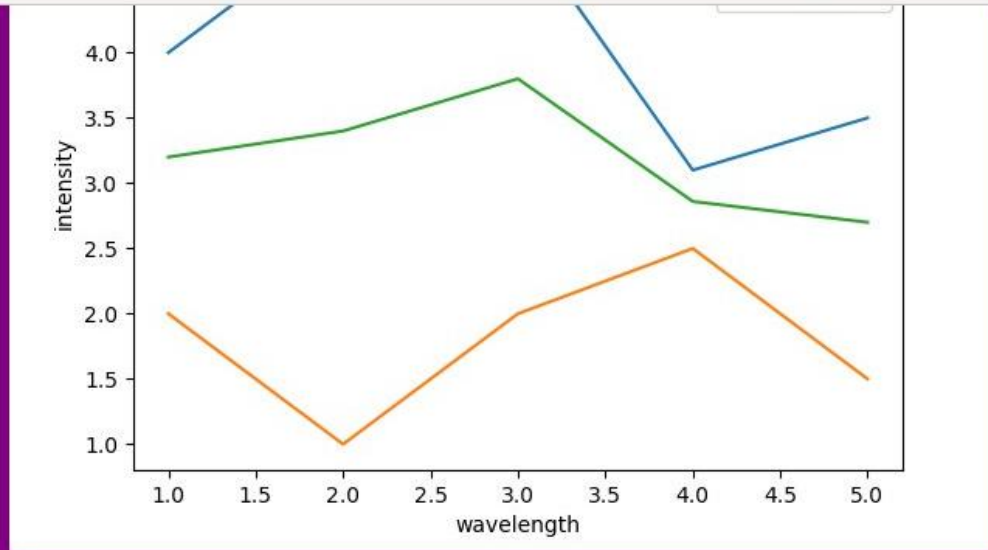
Information   Determination   **Database**   Graphics

	No	Name
<input type="radio"/>	1	Oxygen
<input type="radio"/>	2	Hidrogen
<input type="radio"/>	3	Nitrogen
<input type="radio"/>	4	Carbon
<input type="radio"/>	5	Sodium
<input type="radio"/>	6	Nitrous acid
<input type="radio"/>	7	H2O
<input type="radio"/>	8	Carbon Dioxide

Delete the spectrum

Add the spectrum

# Інтерфейс програмного продукту



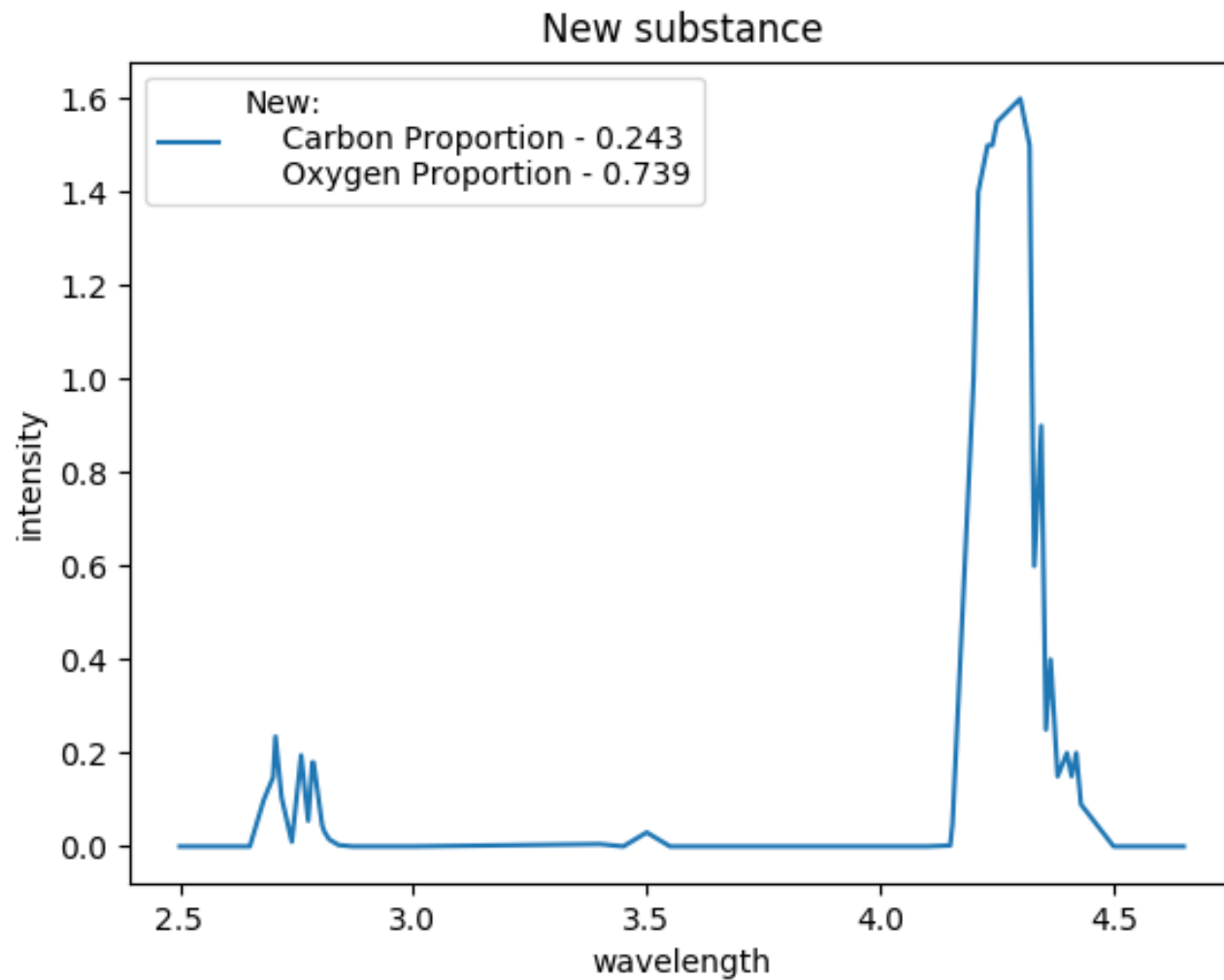
Give name to the substance:

Water

Confirm the name

Back to the Determination of the composition

# Доказ адекватності роботи програмного продукту



# Висновки

У результаті дослідження було проведено аналіз існуючих алгоритмів розпізнавання спектрів, розроблено програмне забезпечення для алгоритму розпізнавання спектрів, проведено експериментальне дослідження цього алгоритму. Була підвищена швидкодія роботи алгоритму в порівнянні з іншими алгоритмами шляхом одночасного знаходження як кількісного так і якісного складу речовини. Також був розроблений алгоритм динамічного розподілу пам'яті, завдяки якому було досягнуто оптимізації затрат обчислювальних ресурсів, таких як час та пам'ять на 15%. Крім того було проведено тестування програмного продукту завдяки якому були виявлені та усунені помилки, були написані тест-кейси, що мінімізують появу нових помилок.