3.4 Analýza píku (Peak Analysis)

Obsah:

1. Úspěšné rutiny v analýze dat (Gadgets)
2. Prokládání křivkou (Curve Fitting)
3. Zpracování signálu (Signal Processing)
4. Analýza píků (Peak Analysis)
5. Manipulace s daty (Data Manipulation)
6. Šablony v analýze (Analysis Templates)
7. Zpracování výběru (Batch Processing)
8. Thema v analýze (Analysis Themes)

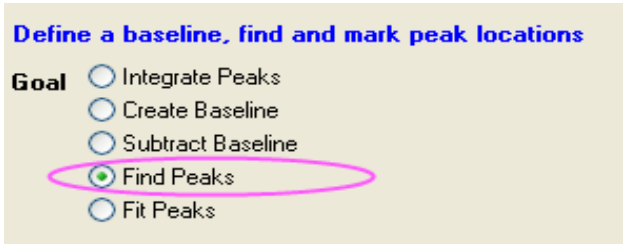
3.4.1 Nalezení píku

A. Sbírání a značení píků

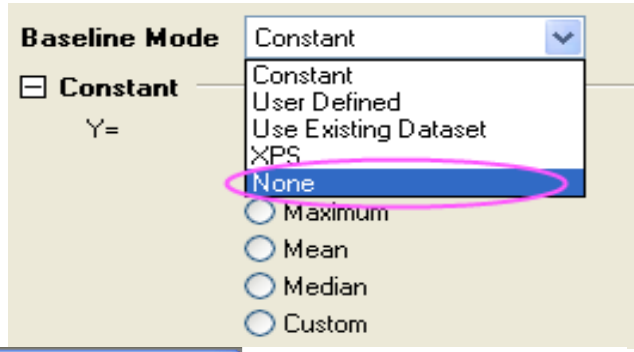
Analýza píku (Peak Analyzer) poskytuje několik metod k automatickému výběru píků. Uživatel může přidávat či mazat nebo upravovat píky ručně. Popisky lze přidat do středu píku poté, co jsou píky nalezeny nebo přidány, aby byla pozice píku zřetelně vyznačena.

Kroky:

1. Spusťte nový sešit a naimportujte **File, Import, Import Wizard,** klik na **…,** a v knihovně **\Samples\Spectroscopy\ HiddenPeak.dat, Add File(s), OK** a uzavřete **Finish**.

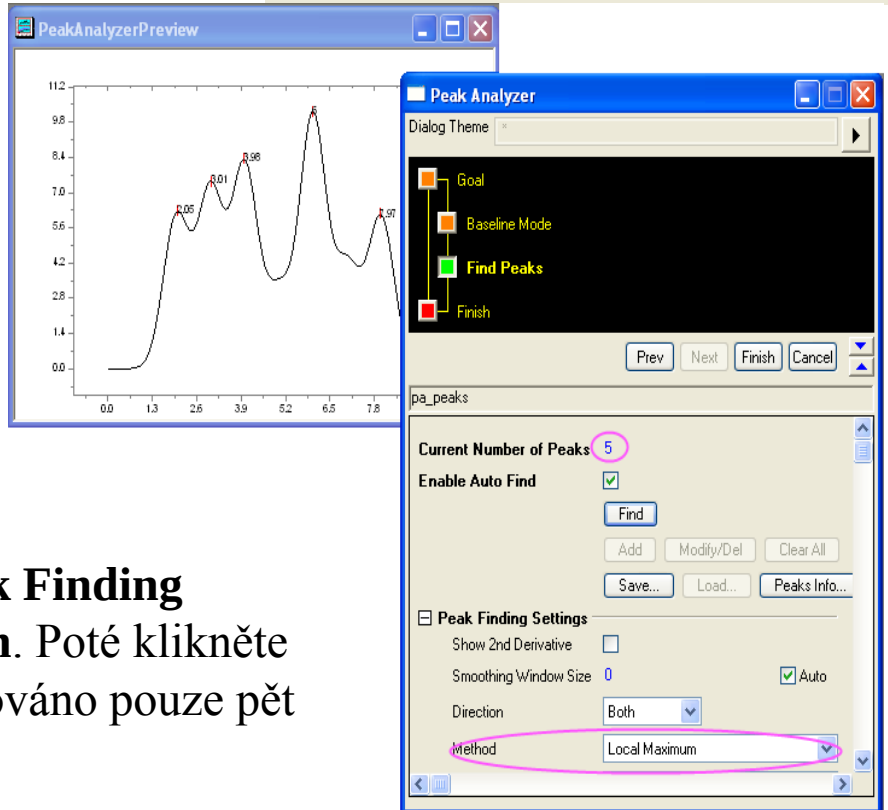


2. Zvýrazněte druhý sloupec **B(Y)**a vytvořte graf **Plot, Line, Line.**



3. S aktivním grafem zvolte **Analysis, Peaks and Baseline, Peak Analyzer, Open dialog** a otevře se dialog **Peak Analyzer**.

4. Jste v prvním zeleném čtverečku **Goal** a zaškrtněte v řádku **Goal** řádek **Finds Peaks**. Poté klikněte na **Next** a přesunete se do zeleného čtverečku **Baseline Mode.**

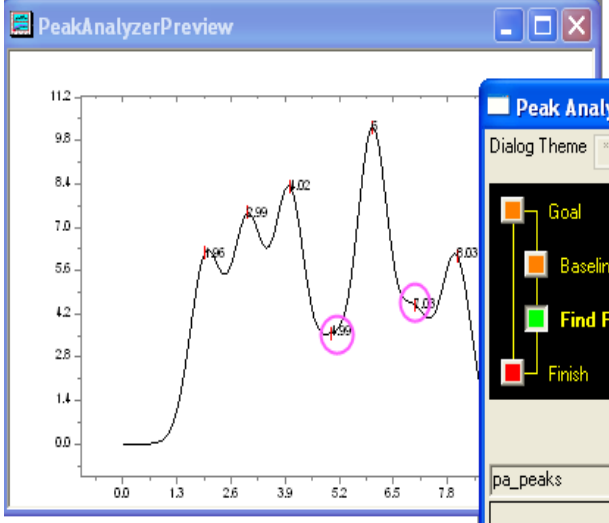


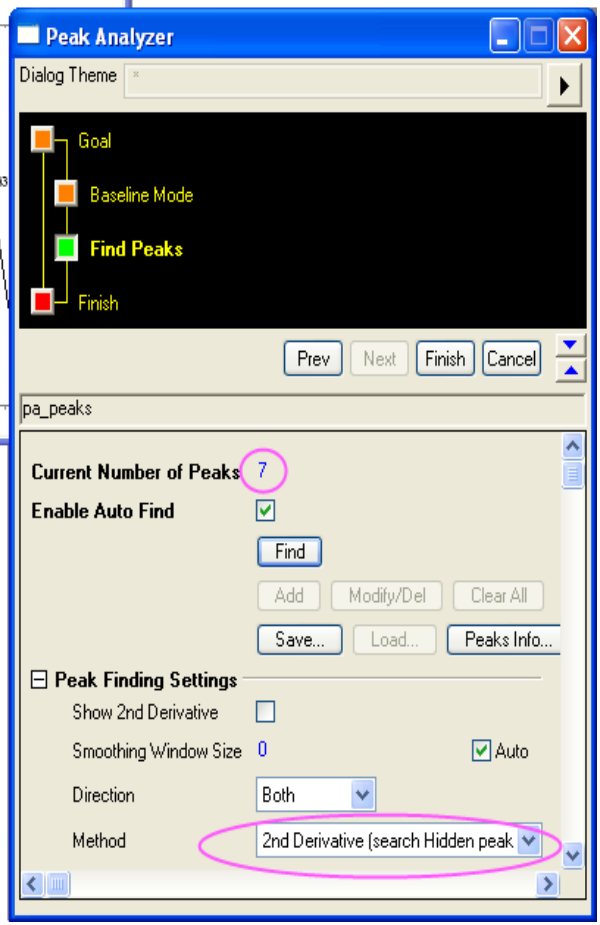
5. Ve čtverečku **Baseline Mode** zadejte **None** do řádku **Baseline Mode**. Kliknutím na **Next** přejděte na zelený čtvereček **Finds Peaks.**

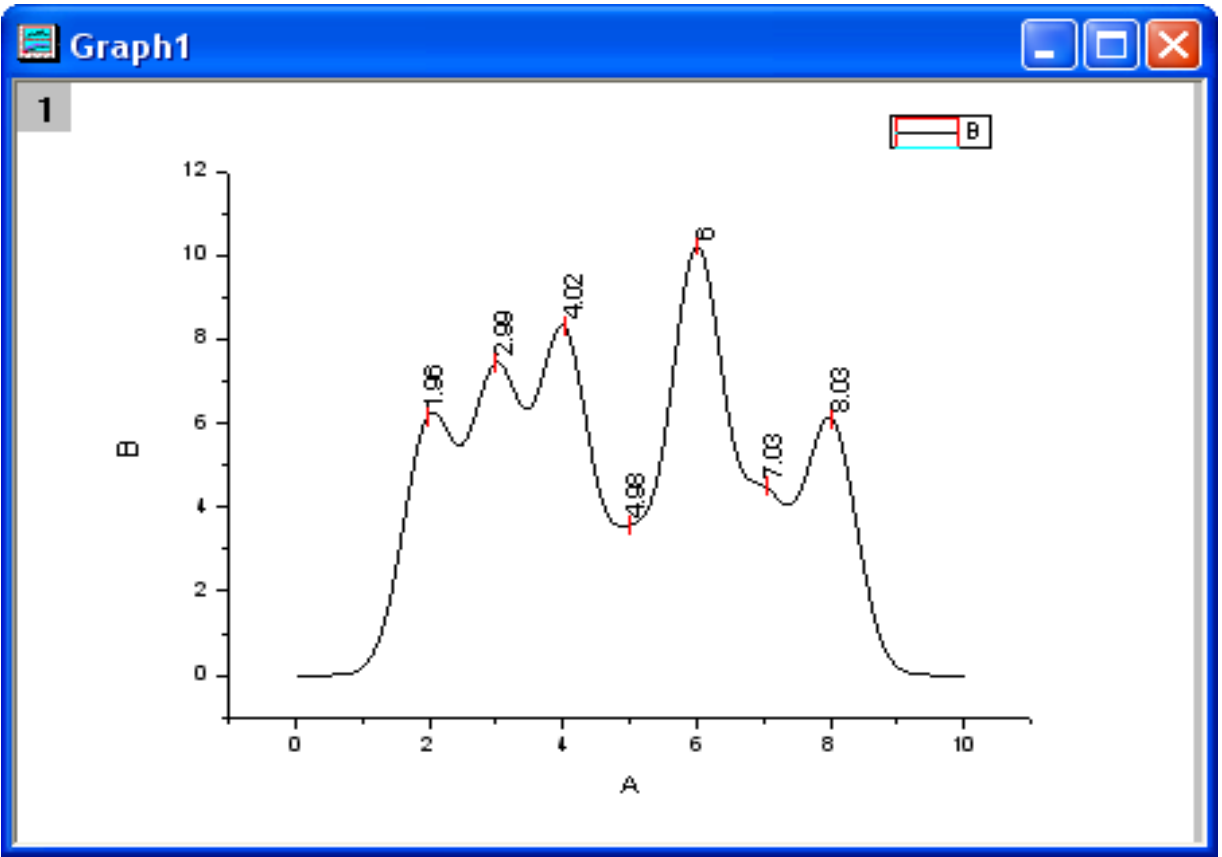
6. Na čtverečku **Finds Peaks**: a) Rozbalte uzel **Peak Finding Settings**. V řádku **Method** zadejte **Local Maximum**. Poté klikněte nahoře v uzlu **Enable Auto Find** na **Find**. Je detekováno pouze pět píků (vrcholů).

b) Změňte **Method** na **2nd Derivative (search Hidden Peaks)**. Znovu klikněte nahoře na **Find.** Tentokrát je detekováno 7 vrcholů.

c) Klikněte na **Finish** pro dokončení analýzy. Obdržíte tento konečný graf:







3.4.2 Integrace píku

Analýza píku (Peak Analyzer) integruje plochu pod píkem.

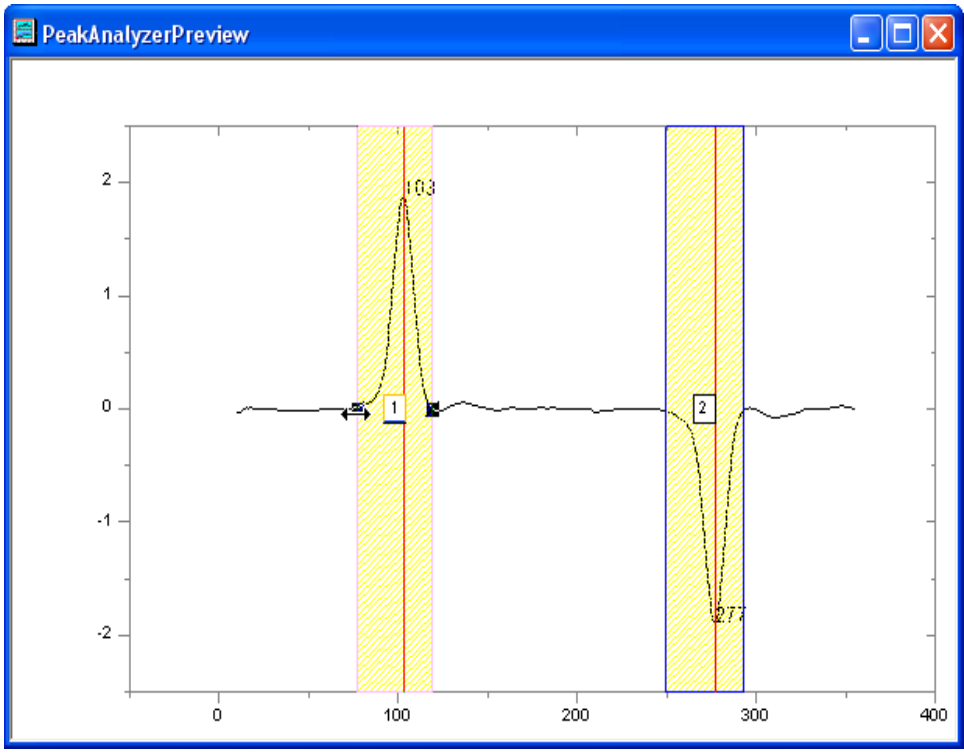
Kroky:

1. Spusťte nový sešit a naimportujte **File, Import, Import Wizard,** klik na **…,** a v knihovně soubor **\Samples\Spectroscopy\Peaks with Base.dat, Add File(s), OK, Finish**.
2. Zvýrazněte druhý sloupec **B(Y)**, **Plot, Line, Line**.
3. V menu klikněte na **Analysis** přejděte na **Peaks and Baselines** a potom klikněte na **Peak Analyzer, Open dialog.**
4. Zatím je kurzor v prvním zeleném čtverečku **Goal.** V řádku **Goal** zaškrtněte řádek **Integrate Peaks.** Kliknutím na **Next** přejděte na žlutý a pak zelený čtvereček **Baseline Mode**.
5. V zeleném čtverečku **Baseline Mode** dejte v **Baseline Mode** volbu **Use Existing Dataset** . Klikněte na trojúhelníkové tlačítko vpravo v řádku **Dataset** a po kliknutí na **Select Column** vyberte v nabídce menu položku **[PeakswithBase]"Peaks with Base„3C„Base“**. Kliknutím na **Add** a pak **OK** ukončete. Kliknutím na **Next** přejděte na žlutý čtvereček **Baseline Treatment.**
6. Zaškrtněte políčko **Auto Subtract Baseline**. Klikněte na žlutý čtvereček **Integrate Peaks** v horním panelu (nebo klikněte na tlačítko **Next** dvakrát, aby se přešlo na čtvereček **Integrate Peaks**). V náhledu grafu nyní vidíte dva číslované žluté obdélníky, představující dva píky nalezené ve výchozím nastavení grafu.
7. V řádku **Integration Window Width** zaškrtněte **Adjust on Preview Graph.** V náhledu grafu klikněte na obdélníček označený **1**. Na obou stranách okna žluté integrace se objeví zelený pár "klik (úchytů)". Přetažením těchto úchytů nastavte rozsah, pro který bude provedena integrace. Klikněte na obdélník označený **2** a stejně upravte integrační rozsah i pro druhý pík.

8. V okně **Integrate Peaks** zvolte všechny požadované veličiny k výpočtu v uzlu **Quantities**. Například, když chcete vypočítat těžiště píku pro každý pík, zvolte políčko **Peak Centroid**. Pokud třeba nechcete, aby výstup byl procentem oblasti, zrušte zaškrtnutí políčka **Percent Area**.

Až budete hotovi, klikněte na **Finish** a provede se analýza.

Výsledkem analýzy je pak nový list s názvem **Integration_Result1** dle vzorového obrázku níže**.**



PeakswithBase - Peaks with Base.DAT

	Index(X)	P0(Y)	P1(Y)	P2(Y)	P3(Y)	P4(Y)	P5(Y)	P6(Y)
Comments	Integral R	Integral Re	Integral	Integral	Integral R	Integral	Integral R	Integral Res
Long Name	Index	Area	Beginnin	Ending	FWHM	Center	Height	Centroid
1	1	26.62295	77	119	13.16915	103	1.87906	102.12429
2	2	-27.62137	249	293	13.28994	277	-1.9043	275.88972
3								
4								

Peaks with Base | Integration_Result1 | Integrated_Curve_D

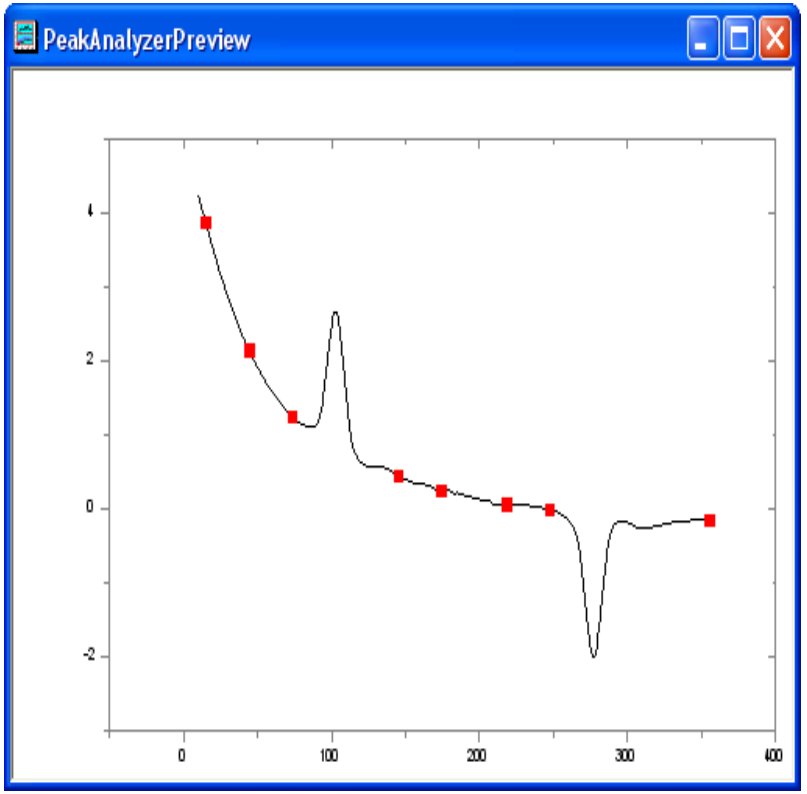
Pokud bylo zaškrtnuto políčko **Area** ve skupině **Quantities**, plocha píku dat se zobrazí ve sloupci **Area**.

3.4.3 Prokládání píku

Peak Analyzer je schopen prokládat i více píků křivkou včetně několika způsoby odečtení základní linie. Existují totiž různé způsoby, jak vytvořit základní linii pro naměřená spektra. Lze si vybrat několik kotevních bodů a pak umístit prokládací funkci. Proložení základní linií lze provést společně s proložením píků.

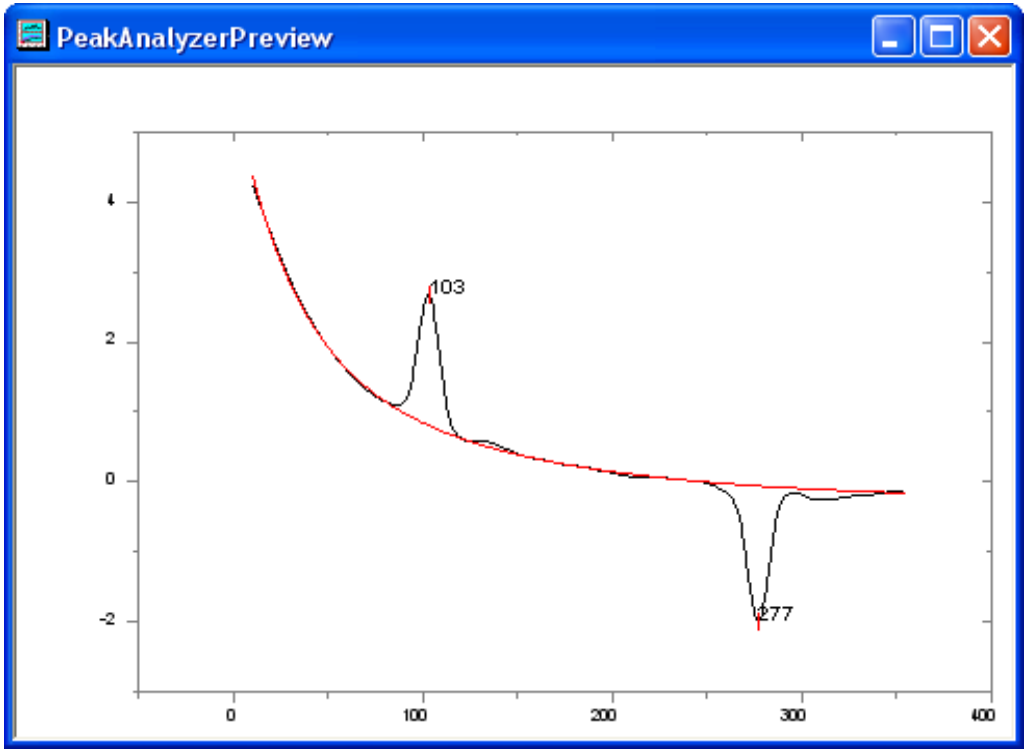
A. Prokládání píků se základní linií

1. Spusťte nový sešit a naimportujte **File, Import, Import Wizard,** klik na **…,** a v knihovně soubor **\Samples\Spectroscopy\Peaks on Exponential Baseline.dat**, **Add File(s), OK, Finish.**
2. Zvýrazněte druhý sloupec v listu, **Plot, Line, Line**.
3. Vyberte **Analysis, Peaks and Baselines, Peak Analyzer, Open dialog** hlavního menu a otevřou se dvě poloviny dialogového okna **Peak Analyzer.**
4. V zeleném čtverečku **Goal** na první stránce zaškrtněte **Fit Peaks(Pro)**. Kliknutím na **Next** přejděte na **Baseline Mode.**
5. V žlutém čtverečku **Baseline Mode** zvolte v řádku **Baseline Mode** volbu **User Defined**. V uzlu **Baseline Anchor Points** kliknutím na **Find** by mělo být nalezeno osm kotevních bodů.



Kliknutím na tlačítko **Next** přejděte na žlutý čtvereček **Create Baseline**.

6. V **Create Baseline** vyberte v řádku **Connect by** volbu **Fitting(Pro)**. V uzlu **Fitting** vyberte v řádku **Function** v roletce **ExpDec2**. Kliknutím na **Next** přejděte na žlutý čtvereček **Baseline Treatment.**



7. V zeleném čtverečku **Baseline Treatment** zaškrtněte okénko **Fit Baseline With Peaks**. Potom kliknutím na **Next** přejděte na žlutý čtvereček **Finds Peaks**.

8. V zeleném čtverečku **Find Peaks** klikněte v řádku **Enable Auto Find** na okénko **Find** k vyhledávání píků. 2 píky by měly být nalezeny. Kliknutím na **Next** přejděte na žlutý čtvereček **Fit Peaks.**

9. V zeleném čtverečku **Fit Peaks** klikněte dole na posledním řádku na **Fit Control** a otevře se dialog **Peak Fit Parameters.** V dialogu **Peak Fit Parameters** se ujistěte, že oba typy píků jsou **Gaussian**. Klikněte na poslední ikonku před OK o názvu **Fit Until Converge**. Tím je proložení provedeno a klikněte na **OK** a zavřete dialogové okno.

11. Tím jste zpět na zeleném čtverečku **Fit Peaks** a klikněte na **Finish** k dokončení analýzy. Podívejte se na výsledky ve zdrojovém sešitu a v grafu.

B. Proložení píků s přednastavenými parametry

V některých případech lze provést proložení píků s přednastavenými parametry píku. Například, můžete mít mnoho datových souborů s pevnými počty píků a středy těchto píků se přitom nemění od souboru k souboru. Zajímáte se hlavně o další parametry píků, například o jejich výšky. Použitím šablony funkce **Peak Analyzer** lze provést proložení píku s pevnými parametry píku.

Uložení šablony s pozicí píku a parametry píku

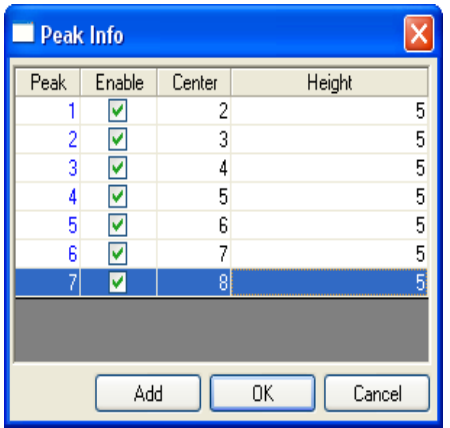
1. Spusťte nový sešit a naimportujte **File, Import, Import Wizard,** klik na **…,** a v knihovně soubor **Samples\Spectroscopy\ HiddenPeaks.dat**, **Add File(s), OK, Finish.**
2. Zvýrazněte druhý sloupec **B(Y)**, **Plot, Line, Line** a vyberte **Analysis, Peaks and Baseline, Peak Analyzer, Open dialog.**
3. Na prvním zeleném čtverečku **Goal** zaškrtněte v řádku **Goal** okénko **Fit Peaks(Pro)**. Kliknutím na **Next** přejděte na žlutý čtvereček **Baseline Mode**.

4. V zeleném čtverečku **Baseline Mode** vyberte v řádku **Baseline Mode** volbu **None,** dále na **Next** přejděte na žlutý čtvereček **Find Peaks**.
5. Na stránce **Find Peaks**:

a) Zrušte zaškrtnutí políčka **Enable Auto Find**, protože je třeba najít píky ručně. Klikněte na **Find** a na návěští **Peaks Info**.

b) V dialogu **Peak Info** klikněte na **Add** sedmkrát, abyste přidali 7 píků. Zadejte středy píků center a jejich výšky dle obrázku vpravo. Klepnutím na tlačítko **OK** se vrátíte do **Peak Analyzer**.

c) Kliknutím na **Next** přejděte na žlutý čtvereček **Fit Peaks**.



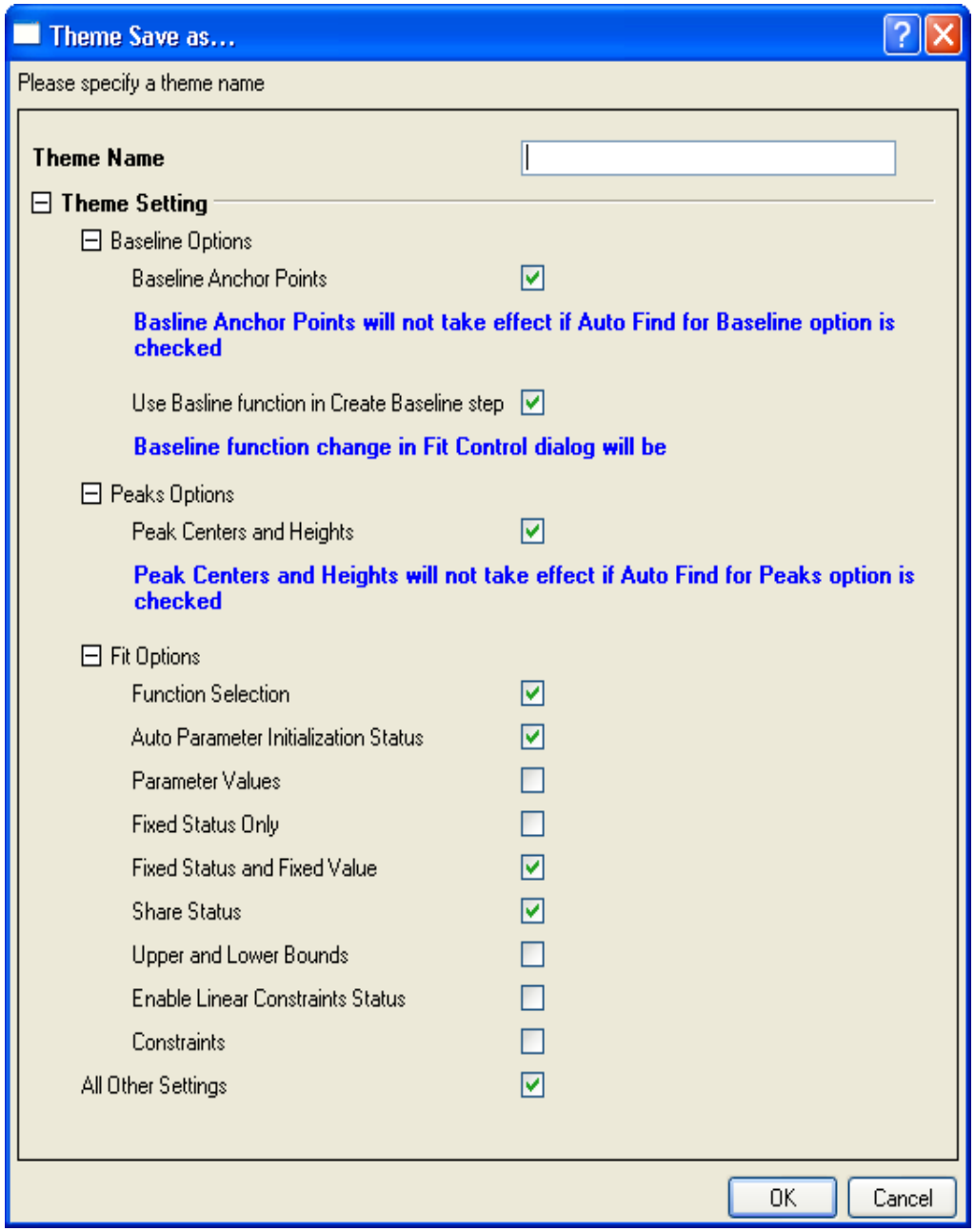
6. V zeleném čtverečku **Fit Peaks:**

a) Klikněte dole na **Fit Control** a otevře se dialog **Peak Fit Parameters.**

b) V okně **Peak Fit Parameters** klikněte na 5. ikonku zleva **Fix or Release All Peak Centers.** Poté klikněte na poslední ikonku zleva **Fit Until Converge**. Tím je proložení křivkou provedeno, klikněte na **OK** se vraťte do dialogového okna **Peak Analyzer.**

c) Klikněte nahoře na prvním řádku na tlačítko pravostranného trojúhelníka napravo od **Dialog Theme** na horním panelu. Klikněte na **Save As**. Otevře se dialog **Theme Save As.**

d) V dialogu **Theme Save As** zadejte **MyFitting** do okénka **Theme Name**. Vyčistěte a zaškrtněte políčka dle obrázku vpravo. Kliknutím na **OK** uložte Theme. To by mělo přivést zpět do dialogu **Peak Analyzer.**



e) Klikněte na **Finish** v **Peak Analyzer** k dokončení analýzy.

C. Opakované použití motivu

1. Spusťte nový sešit a naimportujte **File, Import, Import Wizard,** klik na **…,** a v knihovně soubor **Samples\Spectroscopy\HiddenPeaks.dat**, **Add File(s), OK, Finish.**

2. Zvýrazněte druhý sloupec **B(Y)**, **Plot, Line, Line** a vyberte **Analysis, Peaks and Baseline, Peak Analyzer, Open dialog.**

3. V zeleném čtverečku **Goal** okna **Peak Analyzer** klikněte na tlačítko pravostranného trojúhelníka na pravé straně dialogu. V nabídce zkráceně zvolte **MyFitting**.

4. Klikněte na **Next** a zkontrolujte, zda je nastavení v každém kroku správné. Všimněte si, že ve žlutém čtverečku **Find Peaks**, můžete vidět středy píků a jejich výšky, které jsou stejné jako minule.

5. Když se dostanete na poslední žlutý čtvereček, klikněte na **Fit Control** a otevře se dialog **Peak Fit Parameters**. Ujistěte se, že všechny středy píků jsou pevné a hodnoty jsou stejné jako minule. Klepnutím na **OK** se vrátíte do **Peak Analyzer**.

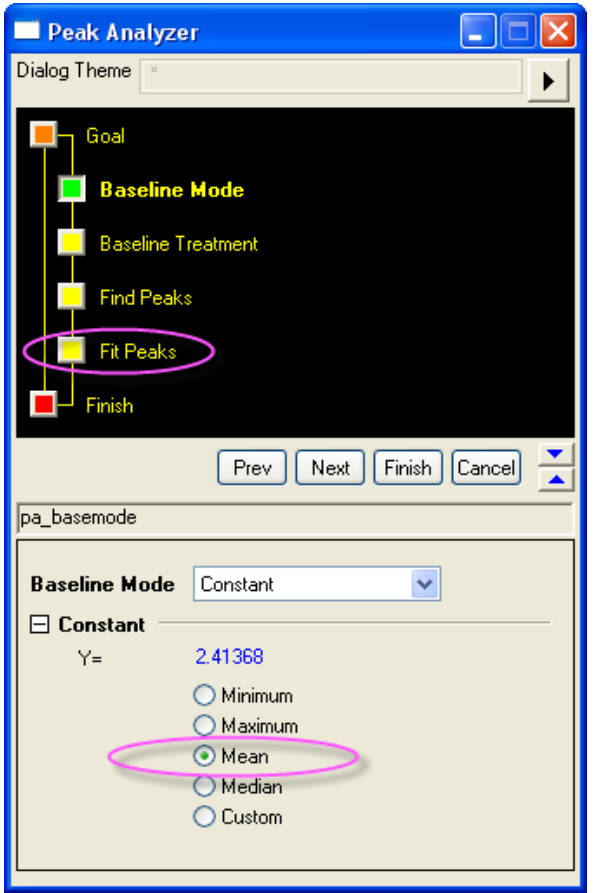
6. Klikněte na **Finish** pro dokončení analýzy. Podívejte se na výsledky, zda jsou stejné jako minulé výsledky.

D. Nastavení pevného, sdíleného stavu nebo mezí pro více parametrů píku současně

V analýze píků je třeba často stanovit odhady parametrů nebo parametry sdílet mezi více píky anebo určit jejich meze. Pokud data vykazují několik píků, lze jednoduše provést tato nastavení pro každý vrchol. Pokud je ale dat mnoho, bylo by časově náročné nastavit vše jednotlivě. Aby byl tento proces účinnější, **Peak Analyzer** nabízí postup, jak nastavit opravu, stav sdílení nebo meze pro více parametrů píku současně. Více informací o těchto nastaveních lze nalézt v nápovědě.

Kroky:

1. Spusťte nový sešit a naimportujte **File, Import, Import Wizard,** klik na **…,** a v knihovně soubor **Samples\ Spectroscopy\Positive & Negative Peaks.dat, Add File(s), OK, Finish.**
2. Zvýrazněte druhý sloupec **B(Y)**, **Plot, Line, Line** a vyberte **Analysis, Peaks and Baseline, Peak Analyzer, Open Dialog** otevře dialog **Peak Analyzer**. V prvním zeleném čtverečku **Goal** zaškrtněte v řádku **Goal** položku **Fit Peaks(Pro).** Stisknutím **Next** přejděte na další žlutý čtvereček **Baseline Mode**.
3. V zeleném čtverečku **Baseline Mode** v řádku **Baseline Mode** vyberte **Constant** a v uzlu **Constant** zvolte **Mean**. Poté klikněte na žlutý čtvereček **Fit Peaks** na horní mapě průvodce a přejděte na čtvereček **Fit Peaks**.

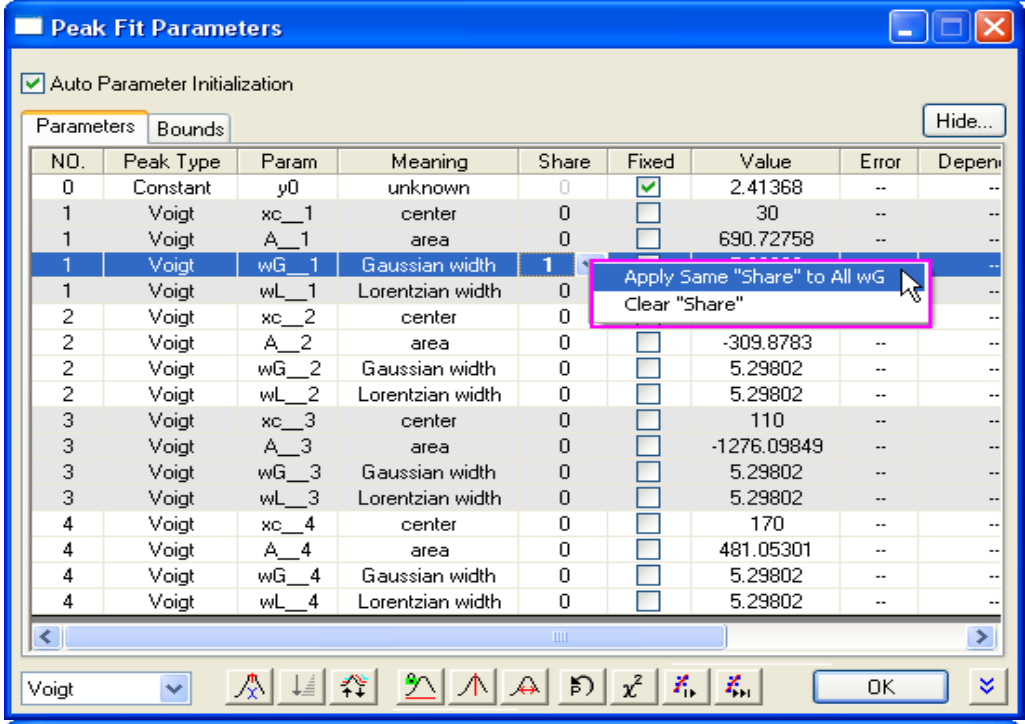


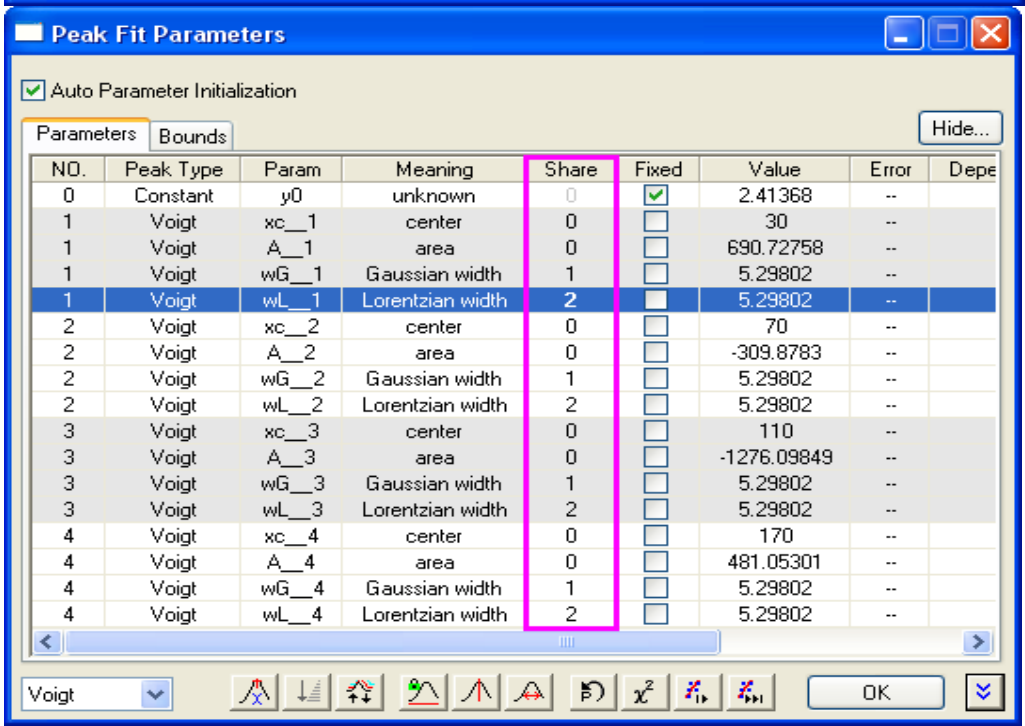
4. V zeleném čtverečku **Fit Peaks**:

a) Klikněte dole na posledním řádku na **Fit Control** otevře se dialog **Peak Fit Parameters**. V levém dolním rohu dialogového okna nastavte funkci proložení na **Voigt**.

b) Aktivujte záložku **Parameters** a poté vyberte **1** ve sloupci **Share** a řádku **wG_1**. Poté na něj klikněte pravou myší a vyberte příkaz **Apply Same „Share“ to All wG.** Pak zjistíte, že všechny parametry s předponou **wG** jsou sdíleny ve stejné skupině.

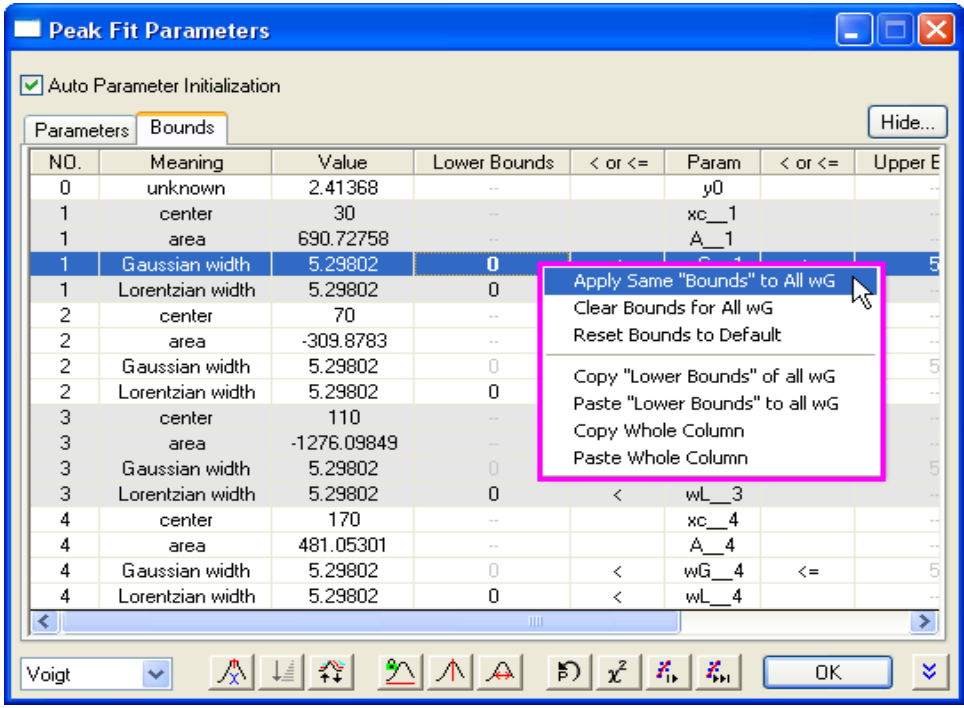
c) Poté vyberte **2** ve sloupci **Share** a řádku **wL_1**. Poté na něj klikněte pravou myší a vyberte příkaz **Apply Same „Share“ to All wL.** Pak zjistíte, že všechny parametry s předponou **wL** jsou sdíleny ve stejné skupině. Poté, záložka **Parameters** by měla vypadat dle obrázku vpravo:

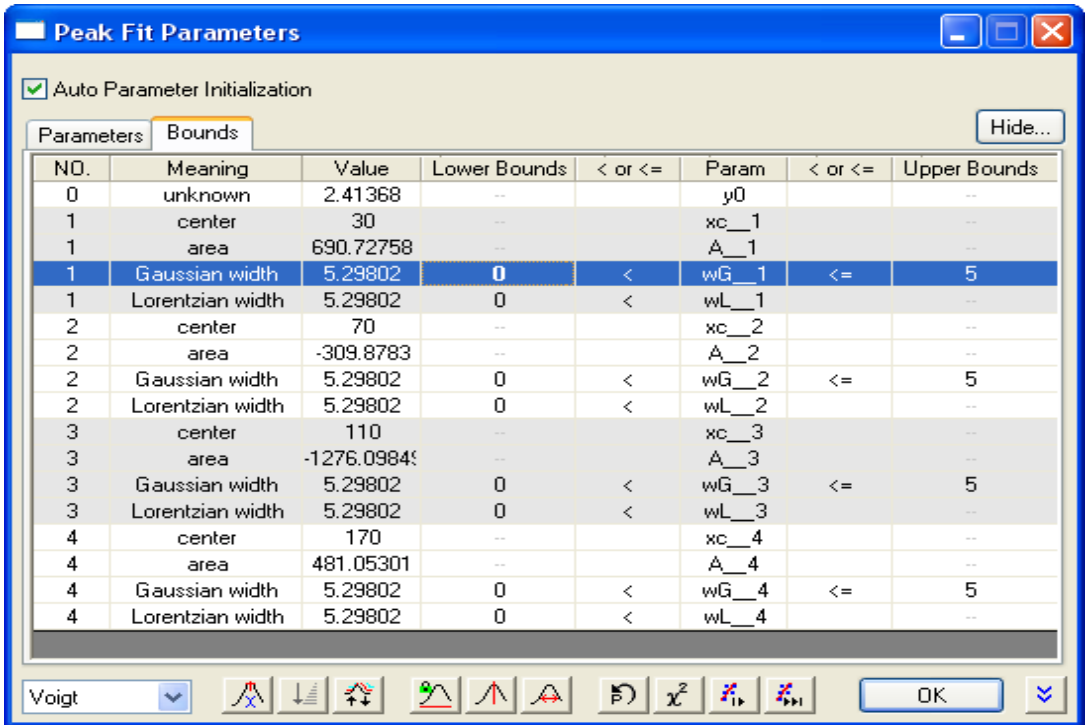




d) Aktivujte záložku **Bounds**. Dvoj-klikem na buňku v prvním řádku s **Gaussian Width** a druhá **< or <=** sloupec. A zjistíte, že **<=** je uveden v této buňce (< se zobrazí, když dvoj-kliknete na buňku pro jednu více krát). Poté zadejte **Type 5** do sloupce horní hranice **Upper Bounds** ve stejném řádku.

e) Poté na něj klikněte pravou myší a vyberte příkaz **Apply Same „Bounds“ to All wG.** Poté by měla záložka **Bounds** vypadat dle obrázku vpravo dole:



5. Klikněte na **Fit Untill Converged**. Je-li proložení křivkou provedeno, klikněte na **OK** a zavřete dialogové okno.

6. Zpět na stránku **Fit Peaks** a klikněte na **Finish** pro dokončení analýzy. Podívejte se na výsledky ve zdrojovém sešitu a zprávu grafu.