





# Łatwo dostępny spektroskop o dużej rozdzielczości z dedykowaną aplikacją mobilną pozwalającą na analizę otrzymanego spektrum

Łukasz Ruba<sup>1,2</sup> , Ryszard Błażej<sup>3</sup> , Jakub Hulek<sup>3</sup> ,  
Roman Kokoszka<sup>1</sup> , Joanna Janik-Kokoszka<sup>1</sup> 

<sup>1</sup> AGH Akademia Górniczo-Hutnicza, Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej, Kraków

<sup>2</sup> AGH Akademia Górniczo-Hutnicza, Wydział Inżynierii Materiałowej i Ceramiki, Kraków

<sup>3</sup> AGH Akademia Górniczo-Hutnicza, Wydział Elektrotechniki, Automatyki, Informatyki i Inżynierii Biomedycznej, Kraków

---

**Streszczenie:** Artykuł przedstawia projekt i wykonanie papierowego spektroskopu o dużej rozdzielczości przeznaczonego do celów edukacyjnych wraz z aplikacją mobilną przeprowadzającą analizę spektralną zdjęcia i klasyfikującą spektrum do pierwiastków z wbudowanej bazy spektrów emisyjnych. Algorytm analizujący obraz został stworzony tak, aby nie wymagał wcześniejszej kalibracji, wynik bazuje tylko na otrzymanym obrazie oraz na wartości stałej siatki dyfrakcyjnej użytej przy budowie spektroskopu.

Przeprowadzono eksperymenty badające działanie spektroskopu przy użyciu żarówek i rurek Plücker'a. Dokładność analizy obrazu i algorytmu klasyfikacji badano na podstawie wygenerowanych obrazów spektrów emisyjnych pierwiastków.

**Słowa kluczowe:** spektroskopia, papierowy spektroskop, analiza spektralna, klasyfikacja widm emisyjnych

## HIGH RESOLUTION SPECTROSCOPE WITH DEDICATED MOBILE APPLICATION FOR ANALYSIS OF OBTAINED SPECTRUM

**Abstract:** The article presents the design and implementation of a high-resolution paper spectroscopy intended for educational purposes, along with a mobile application that conducts spectral analysis of the image and classifies the spectrum into elements from a built-in database of emission spectra. The image analysis algorithm was created to not require prior calibration; the result is based solely on the received image and the value of the diffraction grating used in the construction of the spectroscopy.

Experiments were conducted to examine the performance of the spectroscopy using light bulbs and Plücker tubes. The accuracy of the image analysis and classification algorithm was tested based on generated images of the emission spectra of elements.

**Keywords:** spectroscopy, paper spectroscopy, spectral analysis, emission spectrum classification

---

[https://doi.org/10.7494/978-83-68219-19-7\\_7](https://doi.org/10.7494/978-83-68219-19-7_7)

## 1. Wprowadzenie

Spektroskopia optyczna stanowi jedną z podstawowych dziedzin fizyki. Młodzież szkolna poznaje na lekcjach fizyki wygląd pięknych widm poszczególnych pierwiastków. Przy dzisiejszym zaawansowaniu technicznym wykonanie doświadczenia z rozszczepieniem światła nie powinno stanowić wyzwania, a jednak wciąż brakuje nam łatwo dostępnych, a zarazem dobrych rozwiązań w tym zakresie.

W celu propagowania nauk przyrodniczych wśród uczniów i studentów zbudowaliśmy niedrogi i łatwy w wykonaniu spektroskop papierowy. Widma uzyskiwane za jego pomocą powinny dawać obrazy podobne do tych umieszczonych w podręcznikach fizyki. W tym artykule przedstawiliśmy proste i skuteczne rozwiązania wyzwań inżynierskich, jakie stawia przed konstruktorem stworzenie spektroskopu.

Projekt idzie o krok dalej, oferując użytkownikowi aplikację mobilną, umożliwiającą analizę otrzymanego spektrum. Postawiliśmy sobie za cel prostotę użytkowania. Dlatego też algorytm analizy spektralnej działa bez konieczności kalibracji, która w innych oprogramowaniach tego typu jest niezbędna. Opierając się na przestrzeniach barw RGB i HSV, wyprowadziliśmy równania transformujące obraz cyfrowy do względnej intensywności fal z zakresu światła widzialnego. Mimo trudności z jednoznacznym określeniem niektórych długości fali aplikacja jest w stanie dopasować te wartości na podstawie położenia geometrycznego prążków na zdjęciu, wykorzystując informacje o użytej w spektroskopie siatce dyfrakcyjnej.

Ponieważ produkt miałby być przeznaczony dla uczniów i studentów, dużą wagę przyłożyliśmy do projektu interfejsu użytkownika. Korzystając z systemu projektowania Material Design [1] opracowanego przez firmę Google, stworzyliśmy w pełni funkcjonalne i przyjazne użytkownikowi środowisko. Ponadto aplikację wyposażyliśmy w bazę danych widm emisyjnych. Na jej podstawie przewidywane są pierwiastki, z których pochodzi badane widmo promieniowania.

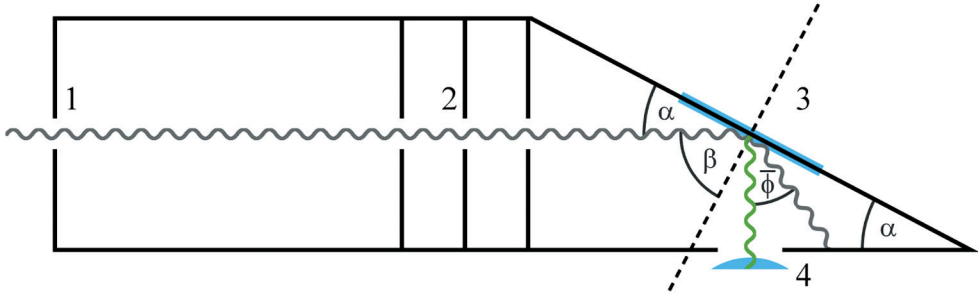
## 2. Metodyka

### 2.1. Konstrukcja

Postanowiono, że spektroskop powinien być skonstruowany z tanich oraz łatwo dostępnych materiałów. Idąc za przykładem wielu innych rozwiązań, jako główny budulec wybrano gruby papier, na który nadrukowywany jest wzór wykonany za pomocą programu AutoCAD.

Spektrometr składa się z czterech głównych elementów (rys. 1): szczeliny (1), przez którą wpada światło polichromatyczne do wnętrza spektroskopu, przegród (2),

których zadaniem jest wyeliminowanie rozproszonych promieni światła w celu zminimalizowania wartości tła, siatki dyfrakcyjnej (3) ustawionej pod odpowiednim kątem, na której dochodzi do rozszczepienia światła na poszczególne linie widmowe, oraz otworu (4), na który pada światło odbite.



**Rys. 1.** Schematyczny rysunek spektroskopu  
1 – szczelina, przez którą wpada światło polichromatyczne, 2 – przegrody,  
3 – siatka dyfrakcyjna, 4 – detektor

Otwór wyjściowy stanowi miejsce dla detektora rejestrującego powstałe widmo. W najprostszym przypadku detektorem może być ludzkie oko, jednak docelowym rozwiązaniem jest użycie aparatu fotograficznego telefonu do rejestracji spektrum i wykorzystanie aplikacji na smartfona do identyfikacji otrzymanego widma.

Pierwszym i bardzo ważnym parametrem jest rozmiar szczeliny, ponieważ od niej zależy, jak szerokie będą prążki światła monochromatycznego rejestrowanego przez matrycę aparatu.

Szerokość prążków światła monochromatycznego  $S'$  padających na matrycę aparatu można obliczyć, korzystając z równania:

$$S' = S \cdot \frac{f}{D - f} \quad (2.1)$$

gdzie:

- $S$  – szerokość szczeliny,
- $D$  – odległość szczeliny od detektora,
- $f$  – ogniskowa aparatu telefonicznego.

Aby wyrazić tę szerokość w pikselach (oznaczoną jako  $O_{px}$ ), należy uwzględnić czynnik multiplikatywny  $Px$ , który określa, ile pikseli znajduje się na szerokości jednego metra:

$$S'_{px} = S \cdot \frac{f}{D - f} \cdot Px \quad (2.2)$$

Najlepszym rozwiązaniem jest, jeśli prążki są możliwie jak najcieńsze, tak aby nie nachodziły na siebie po rozszczepieniu. Pozwala to uzyskiwać zdjęcia łatwe do analizy spektralnej oraz satysfakcjonujące estetycznie dla odbiorcy. Jako że wartości parametrów związanych z aparatem telefonicznym są niezależne od konstrukcji spektroskopu, to jedynym sposobem na zmniejszenie wartości  $S'_{px}$  jest wydłużenie jego długości  $D$  oraz zmniejszenie szerokości szczeliny  $S$ .

Szczelina spektroskopu musi dodatkowo mieć bardzo dobrze zdefiniowany kształt, ponieważ prążki są jej obrazem. Do wykonania tego zadania użyto żyłki, którą należy przeciąć na dwie części, a następnie ułożyć ostrza równoległe do siebie, zachowując niewielką odległość. Można w tym celu posłużyć się kartką papieru, umieszczając ją między ostrzami. Takie rozwiązanie pozwala uzyskać szerokość szczeliny rzędu kilkuset mikrometrów. Krawędź ostrza żyłki tworzy niemal idealnie prostą powierzchnię, co umożliwi uzyskanie prążków w postaci cienkich, prostych linii. Szczelina nie może jednak być zbyt wąska, aby ilość światła była wystarczająca do uzyskania wyraźnego obrazu. Kiedy światło dostanie się do wnętrza spektroskopu, dociera do siatki dyfrakcyjnej, na której następuje rozszczepienie. Znajomość stałej siatki  $d$  pozwala obliczyć, pod jakim kątem będą odbijały się promienie światła rozszczepionego. Konieczne jest, żeby cały obraz światła z zakresu widzialnego (od 400 nm do 700 nm) mieścił się w granicach matrycy aparatu telefonicznego. Dla stałej siatki  $d = 1000$  nm obliczono, że długość fali 560 nm znajduje się geometrycznie w równej odległości od początku i końca widma światła widzialnego, dlatego powinna padać prostopadle na aparat. Na potrzeby konstrukcji rozszerzono to założenie również na siatki dyfrakcyjne o stałej 2000 nm i pochodzących z płyt CD oraz DVD (odpowiednio około 1600 nm i 740 nm [2]), nie popełniając przy tym dużego błędu. Można więc obliczyć wartość kąta  $\bar{\phi}$  między tą długością fali a rzędem zerowym [3]:

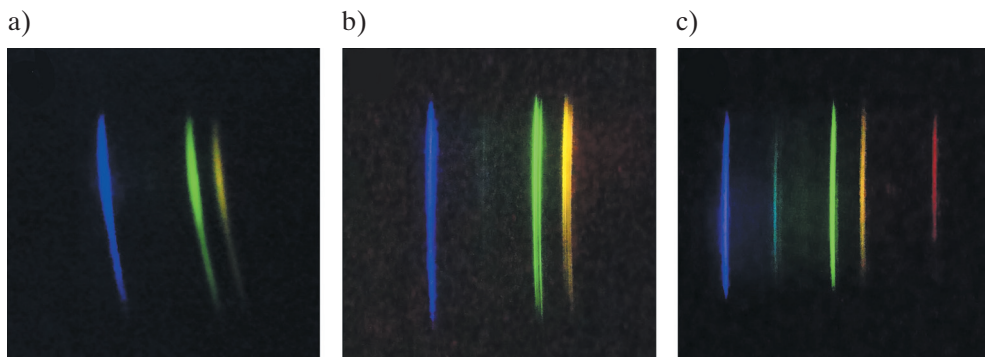
$$\bar{\phi} = \arcsin \left( \frac{560 \text{ nm}}{d [\text{nm}]} \right) \quad (2.3)$$

Korzystając z prostych zależności geometrycznych, można wykazać, że kąt, pod jakim musi być ustawiona siatka dyfrakcyjna  $\alpha$  względem płaszczyzny równoległej do matrycy aparatu, wynosi:

$$\alpha = \frac{90^\circ - \bar{\phi}}{2} \quad (2.4)$$

Obliczenia te stanowiły podstawę wzorów konstrukcji dotyczących różnych siatek dyfrakcyjnych. Chociaż zaprezentowane wzory są proste i oczywiste, to ich implementacja w praktyce pozwoliła znacząco poprawić jakość prezentowanego spektroskopu względem innych, popularnych modeli.

W trakcie testowania spektrometru okazało się, że niezbędne jest usunięcie światła rozproszonego, które generowało szkodliwe tło dla obrazu widma. Dążąc do poprawy jakości otrzymywanych obrazów, rozwijano kolejne wersje spektrometru. W tym celu dodano do konstrukcji trzy dodatkowe przesłony przed siatką dyfrakcyjną [4]. Pozwoliły one zmniejszyć wartość tła na zdjęciach zrobionych aparatem telefonu poprzez pułapkowanie promieni najbardziej odstających od głównego toru wiązki oraz ich eliminację wskutek wielokrotnych odbić w przestrzeniach między przesłonami. Największy jednak wzrost jakości uzyskano po zastosowaniu welurowej folii samoprzylepnej. Materiał ten jest tani i łatwo dostępny, a dzięki mikrowłóknom, z których jest wykonany, świetnie pochłania padające na niego światło. Obniżenie wartości tła pozwoliło na obserwowanie słabych linii widmowych, które przed wspomnianymi modyfikacjami miały wartości natężenia porównywalne z zanieczyszczeniem świetlnym i w efekcie pozostawały niewidoczne, co pokazano na rysunku 2.

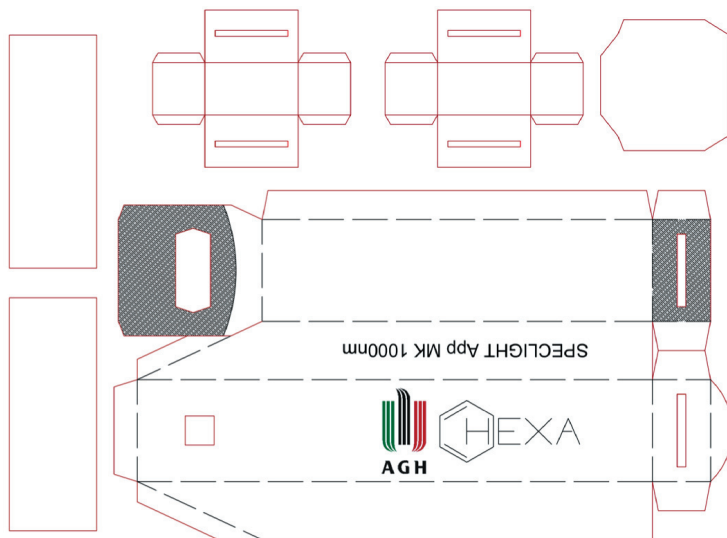


**Rys. 2.** Zdjęcia widm rtęci pochodzących z rurki Plückera wykonane modelem spektroskopu: a) bez przegród; b) z przegradami; c) z przegradami i folią welurową

## 2.2. Wykonanie spektroskopu

Podstawowym materiałem do budowy spektroskopu jest kartka sztywnego papieru formatu A4, na którym drukuje się odpowiedni wzór. Wszystkie siatki brył zostały wykonane za pomocą oprogramowania AutoCAD, które zapewniło wysoką precyzję projektowania. Na rysunku 3 zaprezentowano model spektroskopu dla siatki o stałej 1000 nm.

Odległość między szczeliną a detektorem wynosi 16 cm. Ogniskowa wielu aparatów fotograficznych w smartfonach wynosi około 3 mm [4], więc obraz szczeliny o szerokości 200  $\mu\text{m}$  ma szerokość około 3,82  $\mu\text{m}$  na detektorze. Wielkość ta odpowiada w zaokrągleniu 4 pikselom matrycy aparatu.



Rys. 3. Model bryły spektroskopu o siatce dyfrakcyjnej 1000 nm

Po wycięciu wzoru zamalowano ciemnym markerem elementy znajdujące się wewnątrz spektroskopu oraz naklejono folię welurową w części za przegradami (rys. 4a). Szczelina, wykonana z jednej żyłki przeciętej na pół, znajduje się za dodatkową ścianką z papieru (rys. 4b), co zmniejsza ryzyko skałeczenia w trakcie użytkowania oraz zapobiega jej przemieszczeniu na skutek przypadkowego kontaktu.

a)



b)



c)



Rys. 4. Elementy spektroskopu: a) model gotowy do sklejenia, wycięty kwadrat stanowi otwór dla detektora, sześciokątny jest miejscem na siatkę dyfrakcyjną przyklejoną od zewnętrznej strony, za którą znajduje się ścianka; b) widok szczeliny o grubości około 150  $\mu\text{m}$  (obliczone na podstawie zdjęcia przy użyciu programu ImageJ Fiji [5]); c) aparat telefoniczny przyłożony do otworu na detektor

Koszt materiałów potrzebnych do wykonania zaprezentowanego spektroskopu wynosi około 80 zł. Wielkość tej sumy wynika z faktu, że elementów takich jak folia welurowa nie można kupić w małej ilości. Z takiej ilości materiałów można wykonać kilka konstrukcji, więc cena za jedno urządzenie to kilkanaście złotych.

### 2.3. Aplikacja SpecLight-App

Aplikacja pozwala na zrobienie zdjęcia, jego obrót, przycięcie i skalowanie oraz wybór stałej siatki dyfrakcyjnej użytej do fotografowania. Uzyskane dane są następnie przekazywane do algorytmu przeprowadzającego analizę. Poszczególne fragmenty algorytmu działają asynchronicznie, co zapewnia większą płynność korzystania z aplikacji, a przez to lepsze doświadczenie użytkownika.

Algorytm na wejściu przyjmuje obraz z aparatu w formacie RGB i konwertuje go na format HSV. Ze względu na brak możliwości określenia długości fali światła każdego piksela na podstawie samej jego barwy obliczana jest długość fali tylko dla pikseli z przedziałów na to pozwalających. Te wartości są użyte do ekstrapolacji długości fali na pozostałe piksele. Szczegóły tego procesu zostały opisane w rozdziałach D.1–D.3 dodatku.

Po przeprowadzeniu analizy program tworzy wykres widma dla fali światła z przedziału 400–700 nm na podstawie wartości *Intensity* ( $\lambda$ ) (wzór D.3.1) znormalizowanych do 100.

Na podstawie uzyskanych danych odpowiadających wykresowi kalkulowane są pozycje pików spektralnych, które są zaznaczane po obliczeniu. W ostatnim kroku następuje klasyfikacja uzyskanego zestawu pików i przyporządkowanie listy prawdopodobnych pierwiastków.

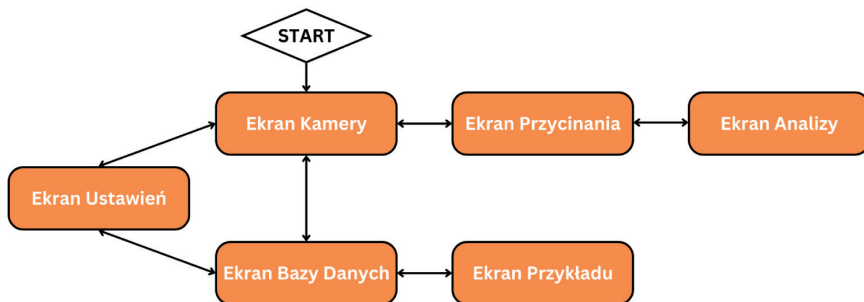
Program został zaimplementowany w formie aplikacji mobilnej z użyciem frameworka Flutter dla języka Dart.

### 2.4. Interfejs użytkownika

Pierwszym etapem prac było zaprojektowanie w programie Adobe XD prototypu high-fidelity, który ułatwia planowanie i pracę nad interfejsem użytkownika. Po dostosowaniu go do wszystkich założeń wynikających z planowanych funkcjonalności oraz uwzględnieniu wniosków z heurystyk Nielsena<sup>1</sup> prototyp przeniesiono do rzeczywistej aplikacji, wykorzystując UI Toolkit Flutter. Schemat ekranów zaimplementowanych w aplikacji przedstawiono na rysunku 5.

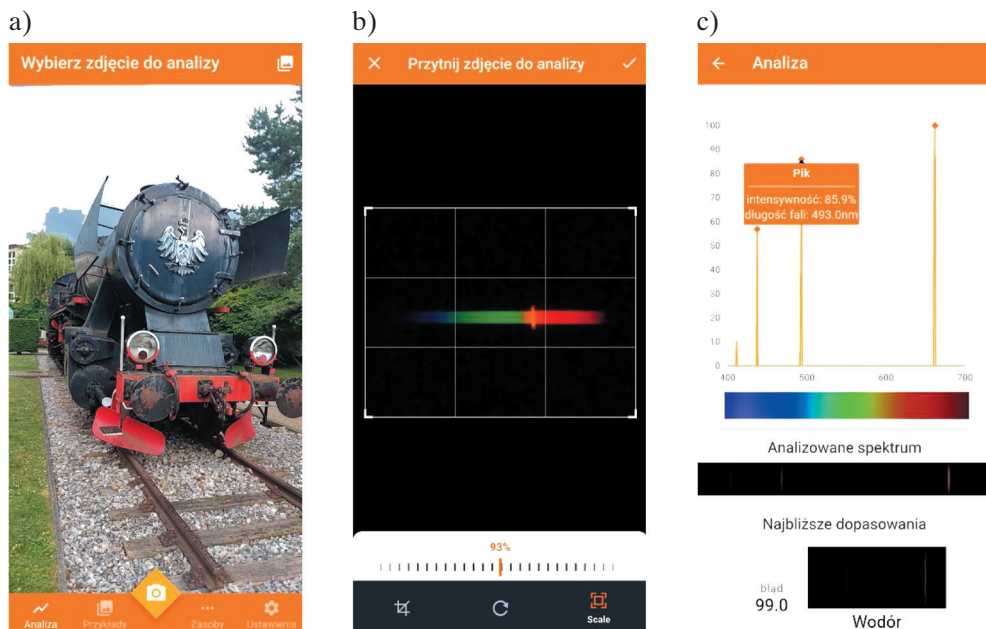
---

<sup>1</sup> Heurystyki Nielsena to dziesięć podstawowych zasad pozwalających na prawidłowe zaprojektowanie interfejsu pod względem interakcji z użytkownikiem [6].



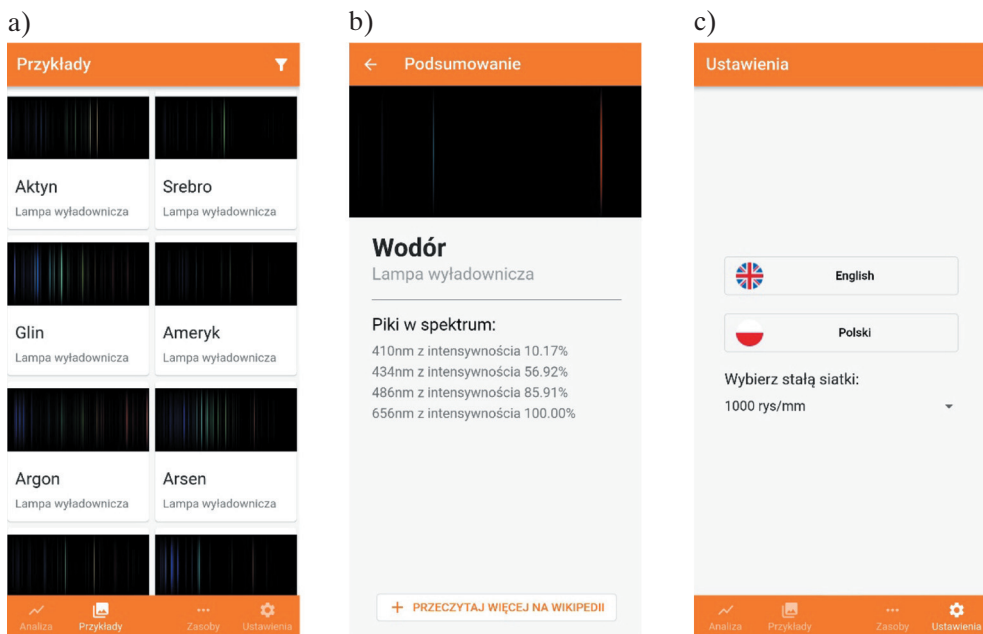
Rys. 5. Schemat nawigacji pomiędzy ekranami w aplikacji

W podstawowej ścieżce interakcji użytkownik wykorzystuje „ekran kamery” (rys. 6a), aby wykonać zdjęcie z kamery telefonu lub wybrać wcześniej wykonane zdjęcie z galerii, co zapewnia elastyczne podejście dostosowane do potrzeb użytkownika. Następnie ładowany jest „ekran przycinania” (rys. 6b), gdzie możliwe jest wykadrowanie lub obrócenie zdjęcia. Ostatecznie otrzymywany jest „ekran analizy” (rys. 6c) z wynikami działań algorytmów w postaci spektrogramu z naniesionymi wykrytymi pikami oraz z podglądem analizowanego spektrum. Na każdy z wykrytych pików można kliknąć, po czym pokazuje się informacja o wykrytej długości fali i jej intensywności. Gdy działanie algorytmu klasyfikacji dobiegnie końca, wyświetlają się również najbliższe dopasowania spektrum.



Rys. 6. Podstawowa droga w aplikacji: a) „ekran kamery” z przykładowym obrazem z aparatu telefonu; b) „ekran przycinania” z przykładowym spektrem; c) „ekran analizy” dla spektrum wodoru

Oprócz podstawowej ścieżki dostępne są również dodatkowe ekrany z przydatnymi funkcjonalnościami. „Ekran bazy danych” (rys. 7a) prezentuje wszystkie zgromadzone w bazie spektra w postaci katalogu kart z przyporządkowaną nazwą oraz zdjęciem widma. Po kliknięciu na wybraną z nich aplikacja przenosi nas do „ekranu przykładu” (rys. 7b) z większą ilością informacji o danym spektrum, jak również odnośnikiem do artykułu w Wikipedii w odpowiednim języku. Aplikacja zawiera również „ekran ustawień” (rys. 7c), na którym można zmienić język aplikacji z polskiego na angielski, jak również dostosować parametr siatki dyfrakcyjnej wykorzystywanej w spektroskopie na potrzeby algorytmów.

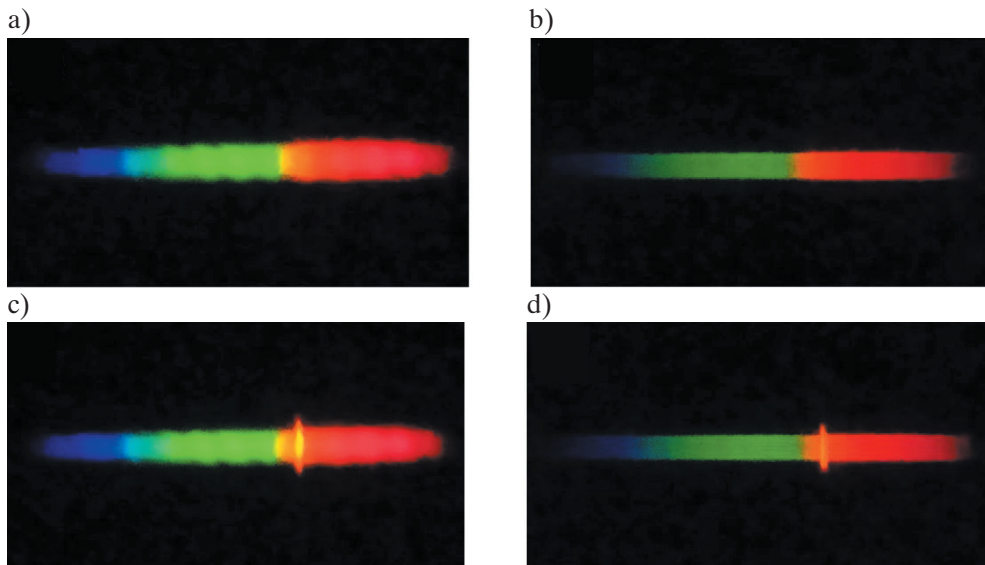


Rys. 7. Dodatkowe ekrany aplikacji:  
a) „ekran bazy danych”; b) „ekran przykładu”; c) „ekran ustawień”

### 3. Wyniki

#### 3.1. Zdjęcia widm uzyskanych papierowym spektroskopem

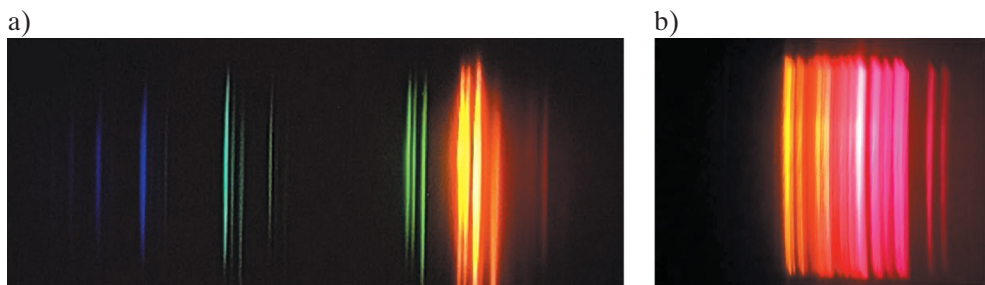
Wszystkie zdjęcia wykonano spektroskopem z siatką dyfrakcyjną 1000 nm oraz szczeliną o szerokości około 150  $\mu\text{m}$ . Na rysunku 8 pokazano eksperyment, w którym posypano płomień świeczki solą kuchenną. W efekcie spalania soli (NaCl) sód emituje światło o charakterystycznej długości fali około 589 nm, które można zobaczyć przy użyciu zaprezentowanej konstrukcji (rys. 8c i d).



**Rys. 8.** Zdjęcia spektrum światła świeczki wykonane za pomocą opisywanego spektroskopu: a) bez folii welurowej za przegrodami; b) z folią welurową za przegrodami. Zdjęcia spektrum światła świeczki posypywanej solą kuchenną wykonane za pomocą opisywanego spektroskopu: c) bez folii welurowej za przegrodami; d) z folią welurową za przegrodami

Na rysunku 9a pokazano zdjęcie widma sodu domieszkowanego rtęcią pochodzące z lampy spektralnej. Charakterystyczny dublet sodowy (589 nm i 589,6 nm) na zdjęciu zlewa się w centralnej części w jedną, grubą linię, jednak obserwując jej krańce można zobaczyć, że rozdziela się ona na dwie. Występowanie dubletu w rejestrowanym spektrum było obserwowane wielokrotnie w trakcie eksperymentu z lampą sodową, jednak wymagało to cierpliwości i starannego dobrania parametrów aparatu fotograficznego, takich jak np. czas naświetlenia.

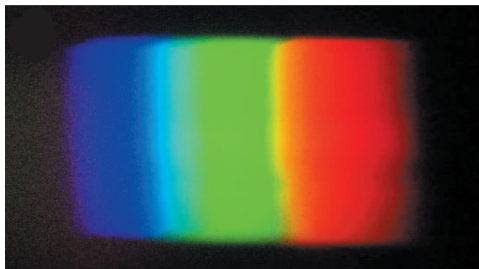
Korzystając z rurki Plücker'a, sfotografowano spektrum neonu (rys. 9b), które składa się z wielu intensywnych i położonych blisko siebie linii, co sprawia, że choć są one widoczne, to ich poświaty znacząco zwiększają wartość tła.



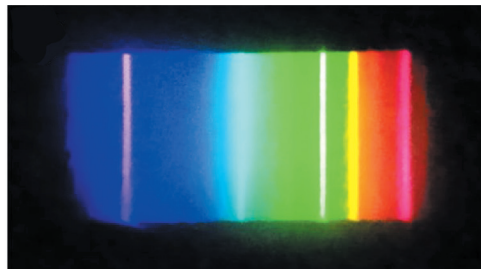
**Rys. 9.** Zdjęcia widm światła pierwiastków pochodzącego z lampy spektralnej sodu domieszkowanego rtęcią (a) i rurki Plücker'a neonu (b)

Najprostszym eksperymentem do wykonania jest obserwacja widma różnego typu żarówek. Przykładowo żarówki LED dają pełne spektrum światła widzialnego (rys. 10a). Innego rodzaju widmo daje żarówka z dużym udziałem rtęci (rys. 10b), w której spektrum widać silne linie rtęci.

a)



b)



Rys. 10. Zdjęcia widm światła: a) białej żarówki LED; b) żarówki rtęciowej

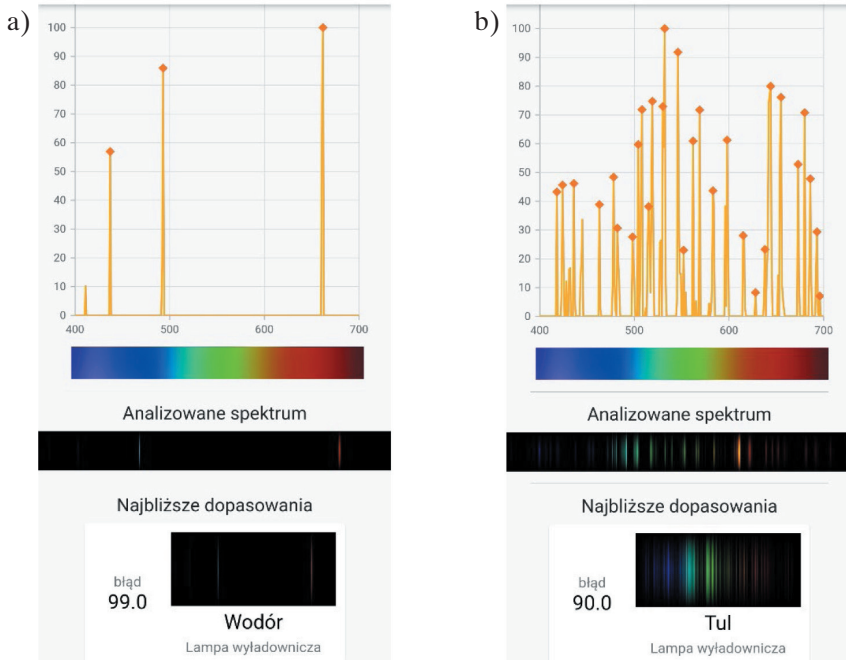
### 3.2. Detekcja pików na podstawie wykonanych zdjęć

Do porównania uzyskanych wyników z założeniami teoretycznymi wykorzystano miarę  $Acc_n$  (dodatek D.4), którą algorytm nadaje najbliższemu przyporządkowaniu oraz teoretycznemu wynikowi. W celu sprawdzenia efektywności algorytmów do określenia długości fal badanego widma wykorzystano wzorcowe dane dla wodoru (rys. 11a) i węgla (rys. 11b). Są one pozbawione takich problemów jak szumy lub niedokładna reprezentacja kolorów przez matrycę aparatu.

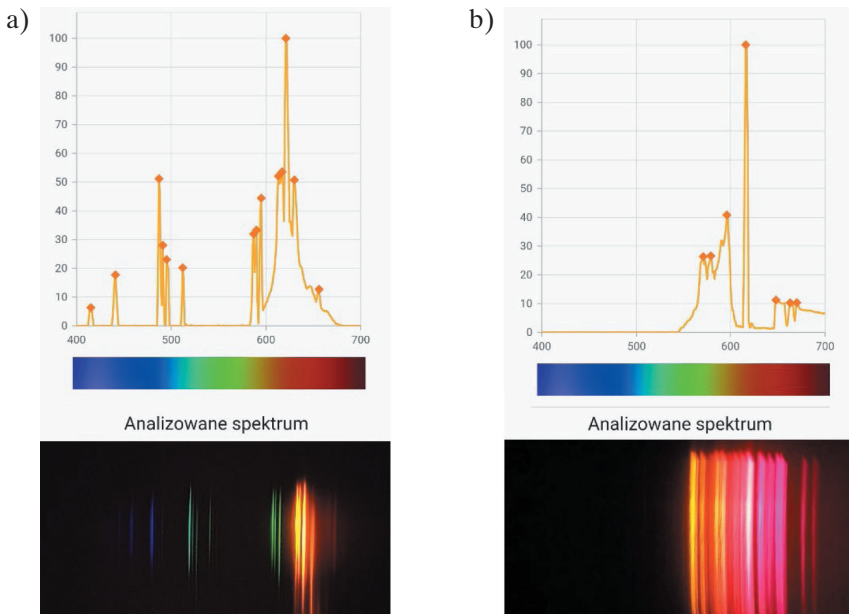
W przypadku serii Balmera uzyskane wyniki są bardzo zbliżone do tych teoretycznych, co ma też odzwierciedlenie w najbliższym dopasowaniu wodoru, z miarą  $Acc_n = 99$ . Podczas analizy widma emisyjnego węgla najbliższym dopasowaniem okazał się pierwiastek tul z miarą  $Acc_n = 90$ , ale węgiel uzyskał również wysoki wynik  $Acc_n = 87$ . Rezultaty te wskazują na to, że algorytm działa bardzo dobrze w przypadku prostych widm z niewielką liczbą prążków, ale gorzej dla tych bardziej skomplikowanych. Widoczne jest również to, że większość znaczących pików jest wykryta i zaznaczona w aplikacji.

Kolejnym etapem była analiza widm pochodzących z rurek Plücker'a i lamp spektralnych. Przeanalizowano uzyskane spektroskopem widma sodu (rys. 12a) i neonu (rys. 12b).

W przypadku danych rzeczywistych widoczne jest to, że algorytm wykrywania pików zadziałał prawidłowo we wszystkich znaczących maksimach. Podczas analizy zdjęcia z lampy spektralnej sodu domieszkowanej rtęcią najbliższym dopasowaniem okazał się wapń z wynikiem  $Acc_n = 90$ , natomiast spodziewany niższy wynik  $Acc_n = 79$  uzyskał sód. W przypadku rurki Plücker'a neonu zarówno bar, jak i spodziewany neon uzyskały identyczny wynik  $Acc_n = 95$ , w takim przypadku algorytm klasyfikacji pozwala na zawężenie wyboru widma do tych dwóch pierwiastków.



**Rys. 11.** Wyniki analizy syntetycznych danych dotyczących:  
 a) wodoru; b) węgla pochodzących z bazy Atomic-Spectra.net



**Rys. 12.** Wyniki analizy zdjęć widm światła pochodzącego: a) z lampy spektralnej sodu domieszkowanego rtęcią; b) rurki Plücker'a neonu

Na zdjęciach wykonanych ze spektroskopem prążki są wykrywane, ale dochodzi do ich przesunięcia w zakresie długości fal, co powoduje propagację błędów w algorytmie klasyfikacji. Jest to widoczne przy porównaniu z analizą danych wzorcowych. Oba algorytmy wymagają usprawnień, aby aplikacja prezentowała dokładne wyniki dla zdjęć wykonanych spektroskopem. Niemniej w obecnej formie jest ona więcej niż wystarczająca dla celów edukacyjnych i amatorskich.

#### 4. Podsumowanie

Spektroskopia bez wątpienia należy do najważniejszych dziedzin współczesnej nauki – zarówno jako technika badawcza, jak i samodzielna dyscyplina. Zaprezentowany projekt stanowi wkład w powszechne zrozumienie tematów związanych z naturą światła, dyfrakcją i analizą widm wśród młodzieży i osób niezwiązanych na co dzień z nauką.

Skonstruowany spektroskop umożliwia obserwację widma światła widzialnego z dużą rozdzielczością. Dzięki niskiej cenie i nieskomplikowanemu procesowi wytwarzania może posłużyć do wykonania eksperymentów szkolnych dla uczniów na każdym etapie edukacji. Jak pokazaliśmy, wokół nas istnieje wiele źródeł światła, które mogą stanowić podstawę do urozmaicenia szkolnych lekcji i lepszego przedstawienia tematu.

W parze z konstrukcją zaprezentowaliśmy aplikację mobilną, która oferuje kompleksowe środowisko do analizy otrzymanych spektrów, obróbki zdjęć oraz bazę danych dla wielu widm pierwiastkowych. Algorytmy zostały przetestowane na danych syntetycznych i rzeczywistych, a analiza spektralna daje zadowalające rezultaty, a problemy napotyka jedynie wtedy, gdy nie jest możliwe wykrycie pikseli granicznych. Aby ułatwić dostęp potencjalnym użytkownikom, planowane jest opublikowanie aplikacji w serwisie Google Play.

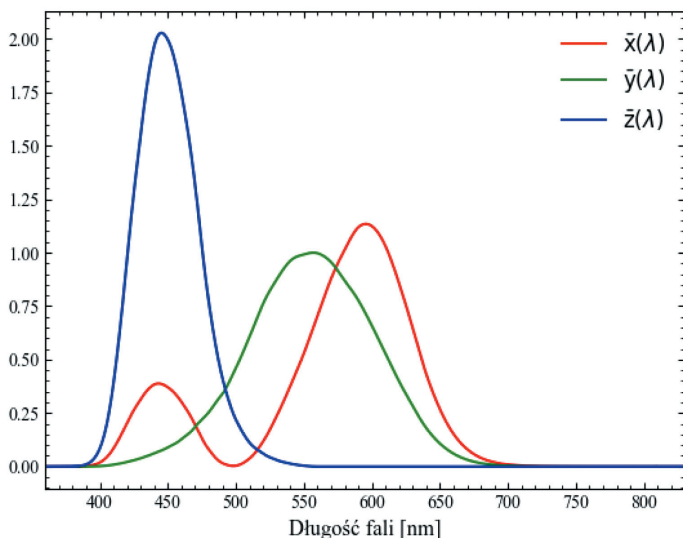
Tani spektroskop w połączeniu z przyjazną użytkownikowi aplikacją mobilną może być bardzo użyteczny w pracy nauczycieli szkolnych i akademickich. Opierając się na własnych doświadczeniach, dostrzegamy mocne strony projektu i widzimy jego przyszłość właśnie w dziedzinie popularyzacji nauki.

#### Dodatek: Analiza spektrum

Analiza spektrum światła to problem polegający na wyznaczeniu intensywności odbieranych fal elektromagnetycznych dla każdej wartości długości fali z przedziału zainteresowania. Istniejące aplikacje (np. *Theremino\_Spectrometer* [7]) działają precyzyjnie, lecz wymagają kalibracji w postaci określenia długości fali przynajmniej dwóch punktów na obrazie. Dodatkowo każda zmiana pozycji detektora względem siatki dyfrakcyjnej skutkuje koniecznością ponownej kalibracji. Zaprezentowany algorytm przeprowadza kalibrację automatycznie, ułatwiając rozpoczęcie analizy oraz pozwalając na nieprzytwierdzanie detektora (aparatu fotograficznego telefonu komórkowego) na stałe do spektroskopu.

### D1. Ustalanie przedziałów składowych pikseli pozwalających na wyznaczenie długości fali światła

W celu wyeliminowania konieczności kalibracji algorytmu konieczne jest stworzenie algorytmu, który dokona detekcji długości fali na podstawie samego zdjęcia spektrum. Założenie relacji liniowości między wartością *Hue* pikseli w formacie HSV<sup>2</sup> i długością fali w pewnym przedziale obu tych wartości jest obarczone zbyt dużym błędem. Z tego powodu posłużono się przestrzenią barw CIEXYZ<sup>3</sup> [8] ze względu na możliwość jej uzyskiwania z długości fali światła (rys. D1.1) oraz zdolność do konwersji na przestrzeń RGB<sup>4</sup>, otrzymywaną ze zdjęć zrobionych aparatem telefonu komórkowego.



Rys. D1.1. Trójchromatyczne składowe widmowe przestrzeni barw CIEXYZ

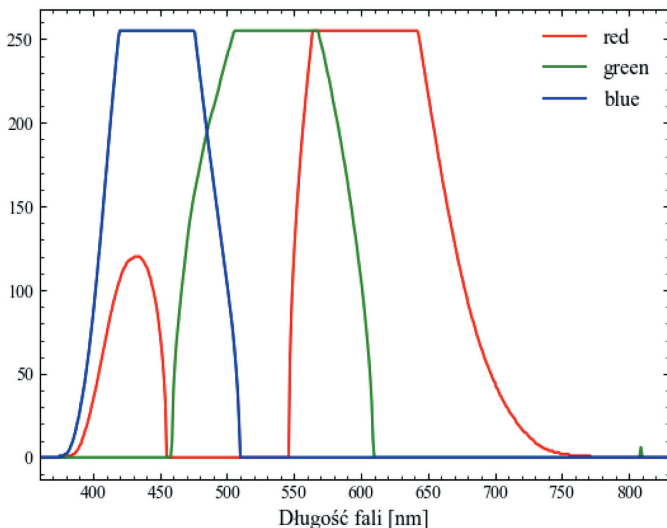
Konwersja z CIEXYZ do RGB powoduje utratę informacji (rys. D1.2). Przedziały, w których tylko jedna składowa RGB ma wartość większą niż zero, są problematyczne ze względu na brak możliwości odróżnienia pikseli o wysokiej intensywności i mniejszej częstotliwości od pikseli o niskiej intensywności i wyższej częstotliwości. Ten problem

<sup>2</sup> HSV to model przestrzeni barw oparty na sposobie ich postrzegania przez ludzi. Składowa *H* (*Hue*) to odcień światła wyrażony w postaci kąta na kole barw; przyjmuje ona wartości od 0° do 360°. Składowa *S* (*Saturation*) to nasycenie koloru z zakresu [0, 100], a składowa *V* (*Value*) to moc światła z zakresu [0, 100].

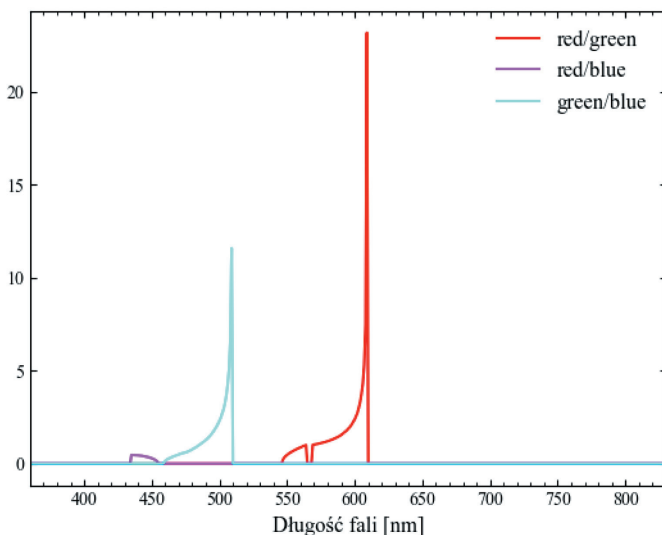
<sup>3</sup> CIEXYZ to przestrzeń barw opracowana w 1931 roku przez Międzynarodową Komisję Oświetleniową (*Commission Internationale de l'Éclairage*). Istnieje odwzorowanie pozwalające na otrzymanie barwy z tej przestrzeni na podstawie długości fali światła. To odwzorowanie oraz możliwość konwersji na RGB jest podstawą działania algorytmu analizy.

<sup>4</sup> RGB to model przestrzeni barw, który opisuje kolory za pomocą składowych: *R* – red (czerwony), *G* – green (zielony) oraz *B* – blue (niebieski).

dotyczy około połowy możliwych długości fali z przedziału 400–700 nm. Dlatego konieczne jest wyznaczenie przedziałów wartości długości fali, dla których stosunki  $R/G$ ,  $R/B$  oraz  $G/B$  mają unikalną wartość. Piksele unikalne to takie, których wartość RGB spełnia ten warunek (rys. D1.3).



**Rys. D1.2.** Trójchromatyczne składowe widmowe po konwersji na format RGB przy użyciu standardowego iluminanta D65, odpowiadającej temperaturze światła białego o wartości 6504 K



**Rys. D1.3.** Stosunki wartości RGB w przedziałach, w których możliwe jest określenie długości fali piksela. Przedziały, w których stosunki wartości  $R$ ,  $G$  i  $B$  nie są unikalowe, zostały wyzerowane

## D2. Wyznaczanie długości fali światła odpowiadającej składowym pikselem

Algorytm otrzymuje obraz spektrum w formacie RGB, na którym piksele przedstawiają kolory. Ich wartości długości fali zmieniają się w kierunku horyzontalnym. Następnie wyznacza lewą i prawą granicę spektrum (odpowiednie piksele nazywa się dalej pikselami granicznymi) tworzoną przez pierwsze i ostatnie znalezione piksele unikalne. W celu zniwelowania wpływu szumu na wyniki piksele, których wartości są brane pod uwagę, muszą spełniać następujące warunki:

- składowa *Value* z przestrzeni HSV w granicach [15, 100],
- składowa *Saturation* z przestrzeni HSV w granicach [7, 100].

Algorytm przy wyznaczaniu pikseli granicznych próbuje znaleźć piksele unikalne, które są otoczone przez przynajmniej  $N$  pikseli unikalnych z obu stron, oraz piksele graniczne znajdujące się w odległości wynoszącej przynajmniej 40% szerokości obrazu. Jeżeli takie sąsiedztwo nie istnieje, zmniejsza liczbę  $N$  o 1 i ponawia próbę, aż nie osiągnie wartości 0. W przypadku osiągnięcia wartości  $N$  wynoszącej 0 algorytm przyjmuje domyślne granice spektrum w postaci lewej i prawej krawędzi obrazu wejściowego.

Za znormalizowaną pozycję  $x_{rel}$  pikselu granicznego przyjmuje się taką wartość funkcji  $f_{x_{rel}}(\lambda)$ , że stosunki  $R/G$ ,  $R/B$  oraz  $G/B$  dla  $\lambda$  (rys. D1.3) są najbardziej zbliżone do tych stosunków w pikselu. Korzystając z równania na kąt załamania fali elektromagnetycznej na siatce dyfrakcyjnej, otrzymano funkcję opisującą zależność między pozycją prążka światła na detektorze a długością fali, zadaną wzorem:

$$f_x(\lambda) = \tan \left( \sin^{-1} \left( \frac{\lambda}{d} \right) - \sin^{-1} \left( \frac{\lambda_{center}}{d} \right) \right) \cdot l \quad (D2.1)$$

gdzie:

- $d$  – stała siatki dyfrakcyjnej,
- $\lambda_{center}$  – długość fali, która pada na centrum ekranu dla danego spektroskopu,
- $l$  – odległość ekranu od siatki.

Po normalizacji metodą min-max otrzymuje się funkcję  $f_{x_{rel}}(\lambda)$  określającą pozycję widma pierwszego rzędu fali o długości  $\lambda$  na detektorze z przedziału [0, 1]:

$$f_{x_{rel}}(\lambda) = \frac{f_x(\lambda) - \min f_x(\lambda)}{\max f_x(\lambda) - \min f_x(\lambda)} \quad (D2.2)$$

Funkcja  $f_{x_{rel}}(\lambda)$  przyjmuje wartość 0,5 dla  $\lambda$  równego  $\lambda_{center}$ .

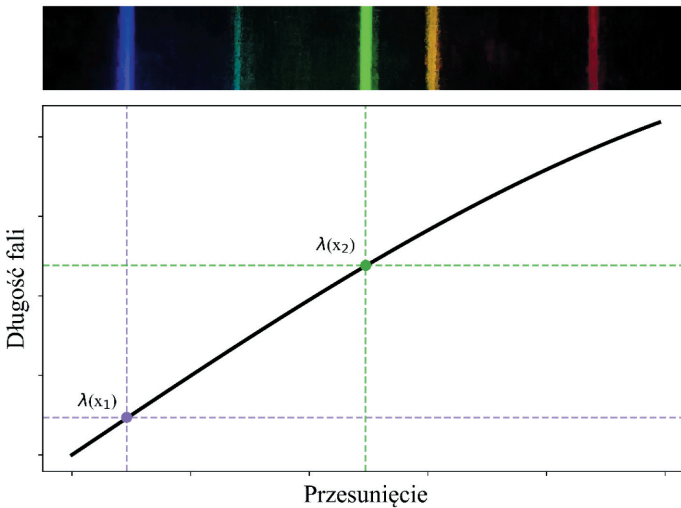
Ze względu na normalizację odległość siatki dyfrakcyjnej od ekranu nie ma znaczenia tak długo, jak znajduje się na nim całe spektrum.

Po wyznaczeniu pikseli granicznych długość fali odpowiadająca pozostałym pikselom jest ustalana przy użyciu funkcji (rys. D2.1):

$$\lambda = f_{x_{rel}}^{-1}(x_{rel}^i) \quad (D2.3)$$

gdzie:

- $\lambda$  – obliczona długość fali piksela,
- $f_{x_{rel}}$  – funkcja zwracająca znormalizowaną pozycję prążka światła o danej długości fali na spektrum dla wybranej stałej siatki dyfrakcyjnej (D2.3),
- $x_{rel}^i$  – znormalizowana pozycja  $i$ -tej kolumny obrazu (przesunięcie) obliczona na podstawie pozycji na obrazie względem pikseli granicznych (rys. D2.1).



Rys. D2.1. Wykryte piksele graniczne i wizualizacja ekstrapolacji długości fali na pozostałe piksele

### D3. Analiza spektralna

W celu otrzymania względnej intensywności dla każdej długości fali występującej na obrazie sumowane są wartości pikseli zgodnie ze wzorem:

$$X = \left\{ i : \lambda = f_{x_{rel}}^{-1}(x_{rel}^i) \right\} \quad (D3.1)$$

$$Intensity(\lambda) = \sum_j \sum_{i \in X} \frac{Value(j, i)}{Saturation(j, i)}, Saturation(j, i) \neq 0$$

gdzie:

$Value(j, i)$  i  $Saturation(j, i)$  – odpowiednio składowe  $V$  i  $S$  z formatu HSV piksela znajdującego się w  $j$ -tym rzędzie i  $i$ -tej kolumnie obrazu,

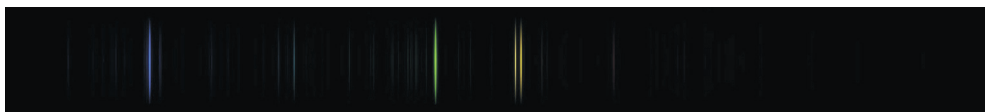
$H$  – liczba rzędów obrazu.

#### D4. Detekcja pików i klasyfikacja widm

Aplikacja powinna pozwolić na zidentyfikowanie otrzymanego spektrum. W tym celu potrzebna jest analiza numeryczna widma spektroskopowego. Istotnym elementem, na podstawie którego można porównać i sklasyfikować widma emisyjne pierwiastków, są występujące piki, dlatego program powinien zawierać metodę ich detekcji, bazę danych z wartościami dla przykładowych widm oraz algorytm klasyfikujący.

Metoda detekcji pików opiera się na wykrywaniu maksimum lokalnych, które są następnie filtrowane w celu wyeliminowania tych wynikających z szumów. Usuwane są maksima znajdujące się w bliskim otoczeniu innych oraz te o niskim przewyższeniu względem otoczenia, zgodnie z algorytmem zaproponowanym przez firmę MathWorks [9].

W celu znalezienia odniesienia do algorytmu klasyfikacji, jak też ilustracji do aplikacji, porównano publicznie dostępne bazy danych zawierające spektra emisyjne różnych pierwiastków: NIST Atomic Spectra Database [10], Atomic-Spectra.net [11] i Spectra V1.0 [12]. Ostatnią z nich odrzucono ze względu na brak odniesienia do praktycznych różnic w proporcji poszczególnych fragmentów spektrum. Bazę NIST wybrano jako odniesienie teoretyczne ze względu na dużą ilość wiarygodnych danych, a Atomic-Spectra.net jako źródło ilustracji, ponieważ udostępnia ona realistyczne wizualizacje spektrum w domenie publicznej. Przykładowa ilustracja z tej bazy jest przedstawiona na rysunku D4.1.



Rys. D4.1. Przykładowe spektrum emisyjne rtęci z bazy Atomic-Spectra.net

W celu klasyfikacji zaprojektowano algorytm umożliwiający przyporządkowanie wyniku zgodności pomiędzy widmem z bazy a zarejestrowanym, następnie wybierane jest spektrum z najlepszym wynikiem. Dla każdej pary widm następuje przyporządkowanie najbliższych sobie pików, na podstawie minimalizacji odległości Czebyszewa<sup>5</sup> dla długości fal:

$$d_{ch}(t, r) = \max_i |t_{\lambda_i} - r_{\lambda_i}| \quad (\text{D4.1})$$

gdzie:

- $t$  – pik w bazie,
- $r$  – pik rejestrowany,
- $t_{\lambda}$  – długość fal w bazie,
- $r_{\lambda}$  – długość fal rejestrowanych.

<sup>5</sup> Odległość Czebyszewa – miara odległości między dwoma punktami równa maksymalnej różnicy korespondujących współrzędnych.

Następnie dla każdej pary widm jest liczona sumaryczna odległość euklidesowa pomiędzy przyporządkowanymi pikami, gdzie długość odcinka pomiędzy dwoma pikami jest wyrażona jako:

$$d_e(t, r) = \sqrt{(t_\lambda - r_\lambda)^2 + (t_I - r_I)^2} \quad (\text{D4.2})$$

gdzie:

- $t$  – pik w bazie,
- $r$  – pik rejestrowany,
- $t_\lambda$  – długość fali w bazie,
- $r_\lambda$  – długość fali rejestrowanej,
- $t_I$  – intensywność fali w bazie,
- $r_I$  – intensywność fali rejestrowanej.

Ostatecznie wynik jest normalizowany do postaci od zera do stu, gdzie zero to najgorsze, a sto – najlepsze dopasowanie zgodnie ze wzorem:

$$Acc_n = \left( 100 - \frac{\min(Acc)}{\max(Acc)} \cdot 100 \right) \quad (\text{D4.3})$$

gdzie:

- $Acc$  – sumaryczne odległości par dla dwóch widm,
- $Acc_n$  – znormalizowany wynik.

## Literatura

- [1] Material Design, *Design – Material Design*, <https://m2.material.io/design> [dostęp: 27.06.2024].
- [2] Ling S.J., Sanny J., Moebs W., 2016, *University Physics*, vol. 3, OpenStax, Houston Texas, <https://openstax.org/books/university-physics-volume-3/pages/1-introduction> [dostęp: 30.09.2024].
- [3] National Nanotechnology Infrastructure Network, *Using CDs and DVDs as diffraction gratings*, [https://www.nnin.org/sites/default/files/files/Karen\\_Rama\\_USING\\_CDs\\_AND\\_DVDs\\_AS\\_DIFFRACTION\\_GRATINGS\\_0.pdf](https://www.nnin.org/sites/default/files/files/Karen_Rama_USING_CDs_AND_DVDs_AS_DIFFRACTION_GRATINGS_0.pdf) [dostęp: 30.09.2024].
- [4] Woo Y., Ju Y.G., 2019, *Fabrication of a high-resolution smartphone spectrometer for education using a 3D printer*, *Physics Education*, vol. 54, art. 015010, <https://doi.org/10.1088/1361-6552/aaea0e>.
- [5] Fiji ImageJ, <https://imagej.net/software/fiji/> [dostęp: 27.06.2024].
- [6] Nielsen J., 1994, *Enhancing the Explanatory Power of Usability Heuristics*, [w:] *CHI '94: Proceedings of the SIGCHI Conference on Human Factors in Computing Systems (Boston, MA, April 24–28)*, s. 152–158, <https://doi.org/10.1145/191666.191729>.

- [7] Theremino, *Theremino Spectrometer Technology*, [https://www.theremino.com/wp-content/uploads/files/Theremino\\_Spectrometer\\_Te.](https://www.theremino.com/wp-content/uploads/files/Theremino_Spectrometer_Te.), 1931, *The C.I.E. colorimetric standards and their use*, Transactions of the Optical Society, vol. 33, no. 3, s. 73–134, <https://doi.org/10.1088/1475-4878/33/3/30>.
- [9] MathWorks, *Prominence – MATLAB & Simulink*, <https://ch.mathworks.com/help/signal/ug/prominence.html> [dostęp: 27.06.2024].
- [10] Kramida A., Ralchenko Yu., Reader J., NIST ASD Team, 2023, *NIST Atomic Spectra Database (version 5.11)*, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, <https://physics.nist.gov/asd> [dostęp: 27.06.2024].
- [11] Gagnon J., *Atomic-Spectra.net*, <https://atomic-spectra.net/index.php> [dostęp: 27.06.2024].
- [12] Tukcer N., *Spectra V1.0*, <https://ch.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/27796-spectra-v1-0> [dostęp: 27.06.2024].