

Zastosowanie spektroskopii klasy NIR SCAN do ekspresowych badań spektroskopowych obiektów ze zmieniającymi się w czasie parametrami optycznymi

por. mar. mgr inż. Marek GĄSIOROWSKI

Spektroskopia w podczerwieni bliskiej NIR (Near-Infrared) jest techniką analizy chemicznej, która wykorzystuje absorpcję promieniowania podczerwonego w zakresie 800-2500 nm do określenia składu chemicznego badanej próbki. Analiza widm NIR pozwala na szybkie i nieinwazyjne określenie składu próbek w różnych dziedzinach, takich jak przemysł spożywczy, farmaceutyczny, medyczny czy rolniczy. Przez długi okres czasu istniały pewne trudności z analizą widm NIR, które nie są proste w interpretacji. Było to związane z brakiem implementacji odpowiednich metod analizy, które wymagały odpowiedniej mocy obliczeniowej. Dziś znany jest cały wachlarz metod analizy widm. Istnieją odpowiednie programy oraz moc obliczeniowa dzisiejszych komputerów w ciągu kilku sekund pozwala na wydobywanie użytecznej informacji z widm NIR. Jedną z nowoczesnych metod analizy widm NIR, która może być zastosowana są SSN (Sztuczne Sieci Neuronowe). Matematyczne modele umożliwiające uczenie maszynowe, a ich zastosowanie w analizie widm NIR pozwala na automatyczne rozpoznawanie charakterystycznych wzorców i wykrywanie związków chemicznych w próbkach. Metoda ta jest szczególnie przydatna w przypadku skomplikowanych, wielowymiarowych widm NIR, które są trudne do analizy przy użyciu tradycyjnych metod statystycznych.

Drugim aspektem pracy związanym z spektroskopią jest zastosowanie małogabarytowego mobilnego spektrometru DLP NIR Scan Nano EVM, który w ciągu kilku sekund może być gotowy do pracy. Urządzenie rejestruje widmo w ciągu 2 sekund. Współpracuje z komputerem posiadającym odpowiednie oprogramowanie, generując pliki w formacie .csv oraz .dat, które można implementować w łatwy sposób do innych programów takich jak np. Matlab.

W pracy badano obiekty, które wykazują zmiany widmowe w określonym przedziale czasowym. Wyróżnić można trzy grupy materiałów. Pierwszą grupą były materiały pochodzenia organicznego. Badano zmiany zachodzące w produktach związane z procesami dojrzewania a w przypadku roślin zielonych badano zmiany zachodzące w liściach na skutek usychania. Była to grupa obiektów testowych pozwalająca na opracowanie koncepcji pracy z widmami NIR w programie Matlab. Drugą grupą były materiały, które mogą być wykorzystane w elektronice jako kleje lub hermetyzację, badano proces krzepnięcia. Docelową grupą były materiały PM (Perovskite Materials) wykorzystywane do budowy nowoczesnych ogniw fotowoltaicznych, pozyskane dzięki współpracy z firmą SAULE. Badano zmiany widmowe zachodzące w materiałach w okresie 30 dni, zaobserwowano pewne zmiany. Badania nad poprawą stabilności ogniw PSC (Perovskite Solar Cells) w dalszym ciągu są bardzo intensywne ponieważ jest to główny problem nowoczesnych ogniw.

Wykorzystując program Matlab opracowano odpowiedni model SSN, który został wytrenowany i przetestowany na uzyskanej bazie widm materiałów perowskitowych. W oparciu o analizę MSE (Mean Square Error) wytypowano najlepsze metody uczenia oraz optymalną ilość neuronów w warstwie ukrytej. Określono również wpływ IDP (Initial Data Preprocessing) na działanie SSN. Program stworzony przez autora pracy pozwala na rozpoznawanie czasu pomiarowego losowego widma z serii pomiarowej oraz określa miarę podobieństwa wybranego widma względem pozostałych. Powiązanie zmian widmowych z informacją o sprawności ogniwa mogłoby być potężnym narzędziem umożliwiającym rozpoznawanie stadium degradacji ogniw.