

Průvodní zpráva k softwarovým aplikacím R

Matrix-calib

Glaze-calib

Řešitelé:

Mgr. Karel Slavíček (ÚGV PŘF MUNI)

Mgr. Jan Petřík, Ph.D. (ÚGV PŘF MUNI)

Technické řešení:

Ondřej Němeček

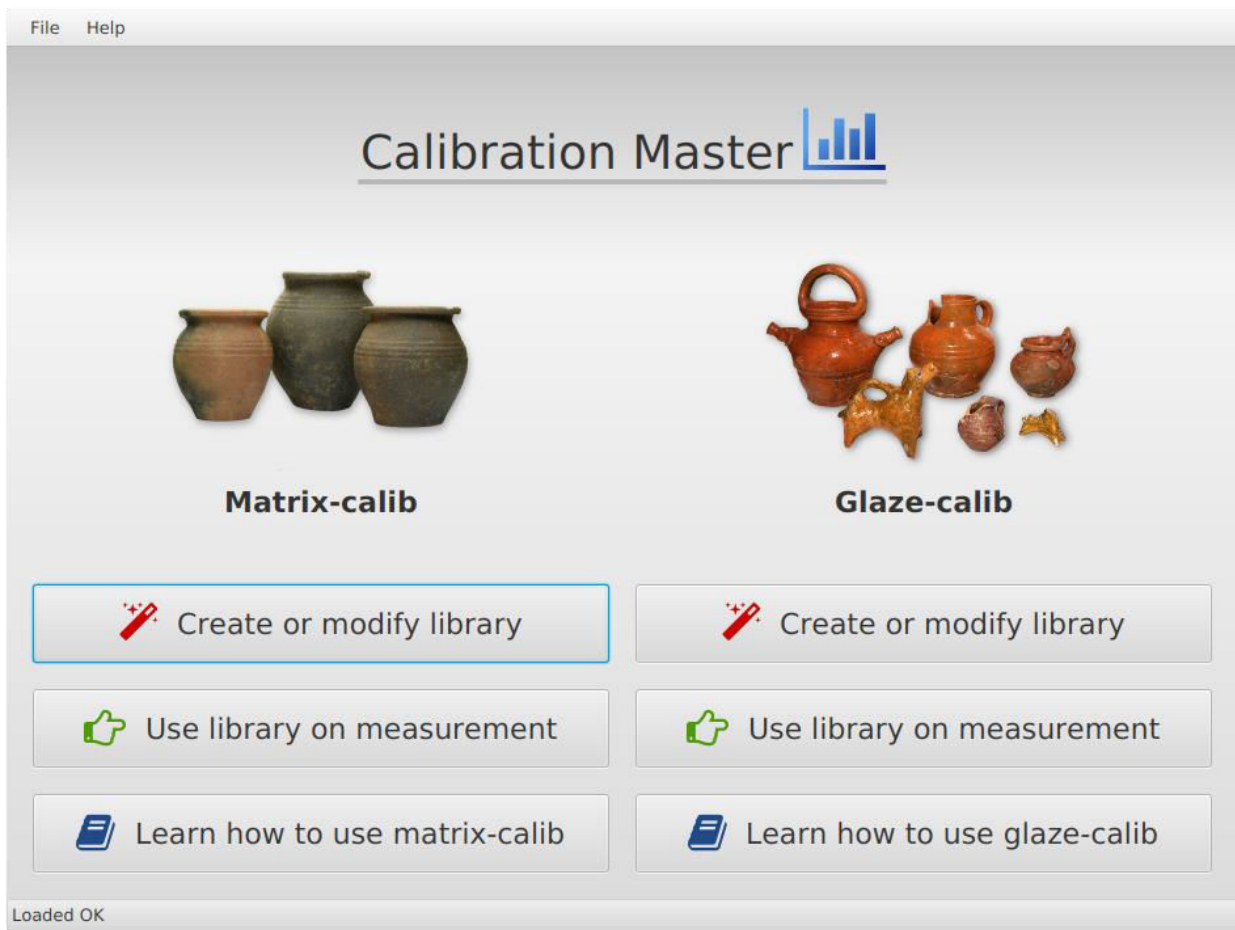
Cíl výsledku, naplnění plánovaného cíle, případně specifikace odlišností

Cílem projektu **NAKI II Vrcholně středověká keramika jako součást movitého kulturního dědictví** bylo vytvoření dvou softwarových aplikací pojmenovaných Matrix-calib a Glaze-calib.

Matrix-calib je softwarová aplikace, která umožní pracovníkům v oblasti movitého kulturního dědictví zpřesnění výsledků chemického složení keramiky získaného ruční rtg-fluorescenční spektroskopickou analýzou (pXRF) za použití korekce podle chemického složení mezinárodních referenčních materiálů. **Glaze-calib** je software pro zpřesnění kvantifikace chemického složení skel a glazur, která je založena na kalibraci dle referenčních materiálů o vhodném chemickém složení.

Obě aplikace byly sjednoceny pod společnou hlavičku nazvanou „**Calibration Master**“. Calibration Master je zaštiťujícím balíčkem obou aplikací. Balíček je dostupný ve formátu zip. Po rozbalení složky není třeba nic instalovat. Aktivací spouštěcího souboru se zobrazí úvodní obrazovka (obr. 1), ve které uživatel vybere aplikaci, se kterou chce pracovat. Tento model prezentace obou aplikací byl zvolen jako nejvhodnější. Celý balíček je lokalizovaný do anglického jazyka. V této podobě bude možné nabídnout aplikace též badatelům a studentům v zahraničí. Z toho důvodu je nápověda k programům nejen v české, ale i anglické verzi.

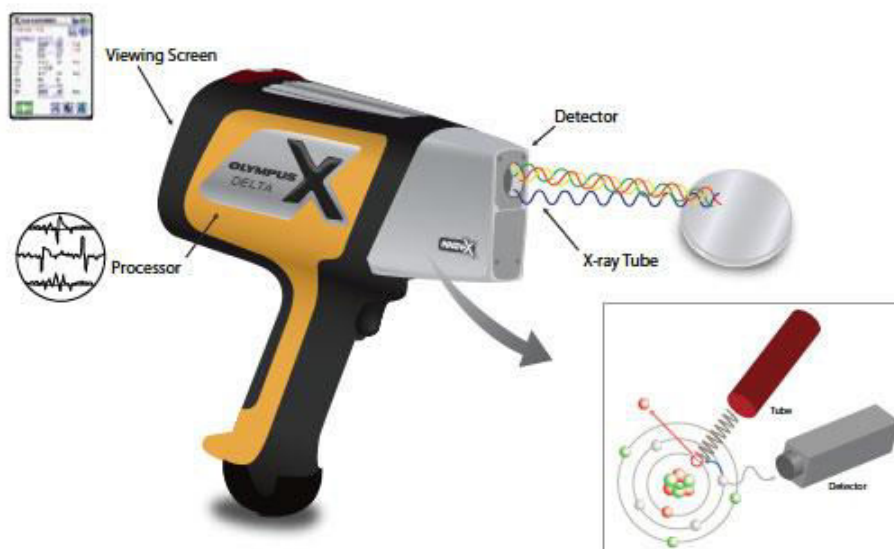
Softwarové aplikace byly vytvořeny a odzkoušeny v praxi pracovníky Ústavu geologických věd Přírodovědecké fakulty Masarykovy univerzity, kteří jsou vlastníkem autorské licence programů.



Obr. 1 Úvodní obrazovka softwaru Calibration Master, který zaštiťuje obě aplikace – Matrix-calib a Glaze-calib.

Vlastní popis výsledku

Rtg-fluorescenční analýza (XRF) je analytická metoda založená na fluorescenci rentgenovského záření, kdy svazek záření excituje elektrony atomu, které při přeskoku do energeticky méně náročné slupky emituje záření, které zachycuje detektor (obr. 2). Toto záření má pro každý atom specifické energie a intenzita záření odpovídá množství ozářených atomů. Proto je možné XRF používat pro nedestruktivní kvantitativní prvkovou analýzu. V dnešní době XRF instrumentace pokročila do takové podoby, že se běžně používají malé a cenově dostupné spektrometry. Tyto analyzátoři jsou snadné na ovládání a uživatelé jsou díky nim schopní získat velké množství dat v malém čase.



Obr. 2 Ruční analyzátor Olympus Delta (<https://www.olympus-ims.com>).

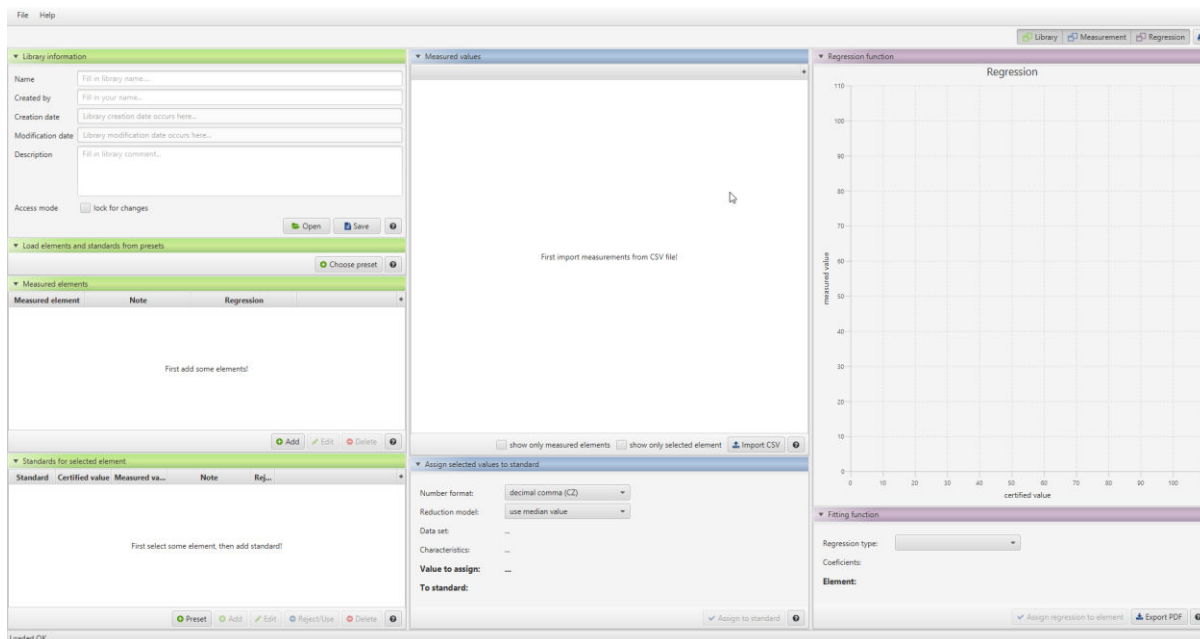
Přístroje používají i archeologové, jejichž zájmem jsou keramické artefakty. Ruční spektrometr umožňuje měření chemického složení přímo z povrchu nádob, aniž by bylo nutné poškodit kvůli vzorkování. Jelikož se keramika skládá převážně z lehčích prvků, jejichž sekundární záření

nemá dostatečnou energii, a ruční spektrometry jsou osazeny velice slabou rentgenkou, dochází při vnitřní kvantifikaci softwarem spektrometru ke zkreslení. Proto je důležité před vlastní prezentací výsledků badatelem kvantitu nejdříve „zkalibrovat“. Vhodný postup je změřením materiálu o certifikovaném složení podobném studovanému vzorku – standardu. Při použití více standardů si badatel může vytvořit kalibrační řadu, kterou proloží vhodnou regresní funkcí, jejíž pomocí může následně provést korekci svých dat získaných analýzou vzorku o neznámém složení.

Matrix-calib a Glaze-calib jsou softwarové aplikace, které fungují na dvou úrovních. První z nich je vytvoření kalibrační knihovny, kde uživatel přiřazuje jím změřené hodnoty k certifikovaným hodnotám referenčních materiálů. Obě aplikace obsahují výrobci udávané složení nejpoužívanějších referenčních vzorků pro dané typy materiálů. Po přiřazení zvolí uživatel nejvhodnější typ regresního modelu, který odpovídá každému prvku. Druhou úrovní softwarových aplikací je použití vytvořené kalibrační knihovny pro zpřesnění koncentrací chemických prvků změřené v neznámých vzorcích.

Obě aplikace se ovládají velice podobně a celý pracovní postup jejich ovládání je detailně rozepsán v nápovědě skrývající se uvnitř aplikací. Nápověda také obsahuje informativní obrazové přílohy ulehčující uživateli orientaci při práci s programy.

Hlavní okno obou aplikací se pro část určenou pro tvorbu kalibrační knihovny dělí na několik menších oken ve třech sloupcích nazvaných Library, Measurement a Regression (obr. 3). V části sloužící pro použití knihovny a přepočet vlastních analýz jsou to sloupce Library, Measurement a Result.



Obr. 3 Základní vzhled aplikace pro tvorbu kalibrační knihovny. Jednotlivá vertikální oddělení obrazovky (sloupce) je možné pro snadnější práci s programem schovávat či aktivovat.

Sloupec vlevo nazvaný Library se dělí na čtyři podokna a slouží pro uložení základních informací o knihovně, z nichž je důležité pole Description, kam si může uživatel uložit podmínky měření, které použil při analýze standardů. Při měření neznámých vzorků je nutné zachovat stejnou metodiku. V podoknech tohoto sloupce uživatel definuje prvky, jejichž koncentrace bude chtít kalibrovat a přiřadí k nim standardy. Certifikované hodnoty standardů lze vkládat ručně, nebo z tzv. tabulky Presets, kam byly uloženy nejčastěji užívané referenční vzorky – jedná se o produkty National Institute of Standards and Technology (NIST), China National Analysis Center for Iron and Steel, National Research Center for Certified Reference Materials v Číně, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology v Japonsku a MINTEK, The Society of Glass Technology (SGT), Fluxana (FLX) a Institute for Reference Materials and Measurements (IRMM).

NAKI II – Vrcholně středověká keramika jako součást movitého kulturního dědictví
DG18P02OVV020

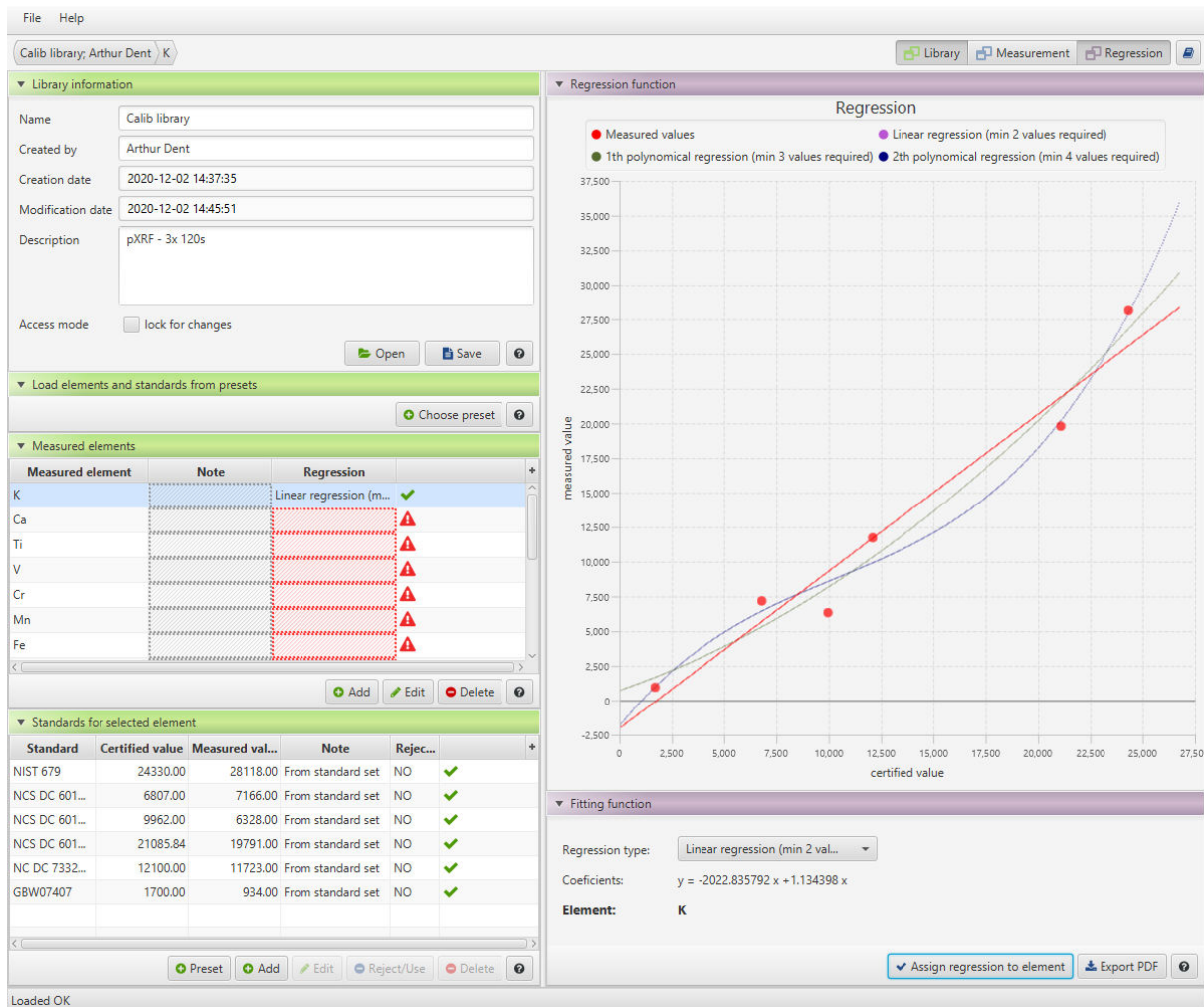
The screenshot displays a software window for creating a calibration library. It is divided into several sections:

- Library information:** Shows details for a library named 'Calib library' created by 'Arthur Dent' on 2020-12-02. The description is 'pXRF - 3x 120s'.
- Measured values:** A table with columns for element number (#), RM, K, Ca, Ti, and V. It lists 35 rows of data for various elements and standards.
- Measured elements:** A table with columns for Measured element, Note, and Regression. It lists elements K, Ca, Ti, V, Cr, Mn, and Fe, each with a red triangle icon in the Regression column.
- Standards for selected element:** A table with columns for Standard, Certified value, Measured value, and Note. It lists standards like NIST 679, NCS DC 60102, NCS DC 60104, NCS DC 60105, NCS DC 73323, and GBW07407.
- Assign selected values to standard:** A panel showing the 'Value to assign' as 7175.80 and the 'To standard' as 'NCS DC 60102 (GBW03101a); 6807.00; From standard set'.

Obr. 4 Tvorba kalibrační knihovny – po definování prvků a standardů byla načtena tabulka s naměřenými standardy, jejichž koncentrace je nutné přiřadit ke standardům (pravý sloupec obrazovky Regression je deaktivovaný pro účely prezentace).

Prostřední sloupec Measurement slouží pro import naměřených dat. Glaze-calib i Matrix-calib umožňují import dat pouze ve formátu csv se středníky jako oddělovači sloupců. Tento formát je nativní pro export archeology často užívaných ručních spektrometrů Delta. Vývoj aplikací bude pokračovat i v budoucnosti, jedním z cílů je implementovat více možností formátů dat pro import. Po načtení externích dat uživatel přiřazuje hodnoty, které naměřil, k hodnotám certifikovaným (obr. 4). Aplikace mu umožňuje vybrat více hodnot a přiřadit pouze aritmetický průměr, či medián.

NAKI II – Vrcholně středověká keramika jako součást movitého kulturního dědictví DG18P02OVV020



Obr. 5 Volba regresního modelu usnadňuje zobrazení grafu ve sloupci Regression (sloupec Measurement je deaktivovaný pro účely prezentace).

Sloupec vpravo – Regression slouží pro zobrazení rozptylového diagramu, kdy se na osu X promítají certifikované koncentrace prvku a na osu Y koncentrace změřené (obr. 5). Těmito body jsou proloženy tři regresní modely – lineární a dva polynomické. Uživatel zvolí jeden z nich a přiřadí ho k prvku. Graf je možné vyexportovat ve formátu pdf. Pravý sloupec v části aplikace sloužící pro kalibrování dat se nazývá Result. Tento sloupec zobrazuje přepočítané hodnoty a umožňuje jejich export do csv.

Technické řešení

Calibration Master je řešený jako klasická desktopová aplikace běžící na počítačích rodiny x86 s operačním systémem rodiny Windows (počínaje verzí Windows 7) a Linux (testována byla distribuce Linux Mint 20 resp. Ubuntu 20.04 LTS). Hardwarové požadavky pro běh programu ve stávající verzi byly stanoveny takto:

- počítač s procesorem rodiny x86 Intel i5 2,40 GHz nebo vyšší, alespoň 4GB RAM
- operační systém Windows ve verzích 7 či 10 nebo Linux Mint 20 / Ubuntu 20.04 LTS

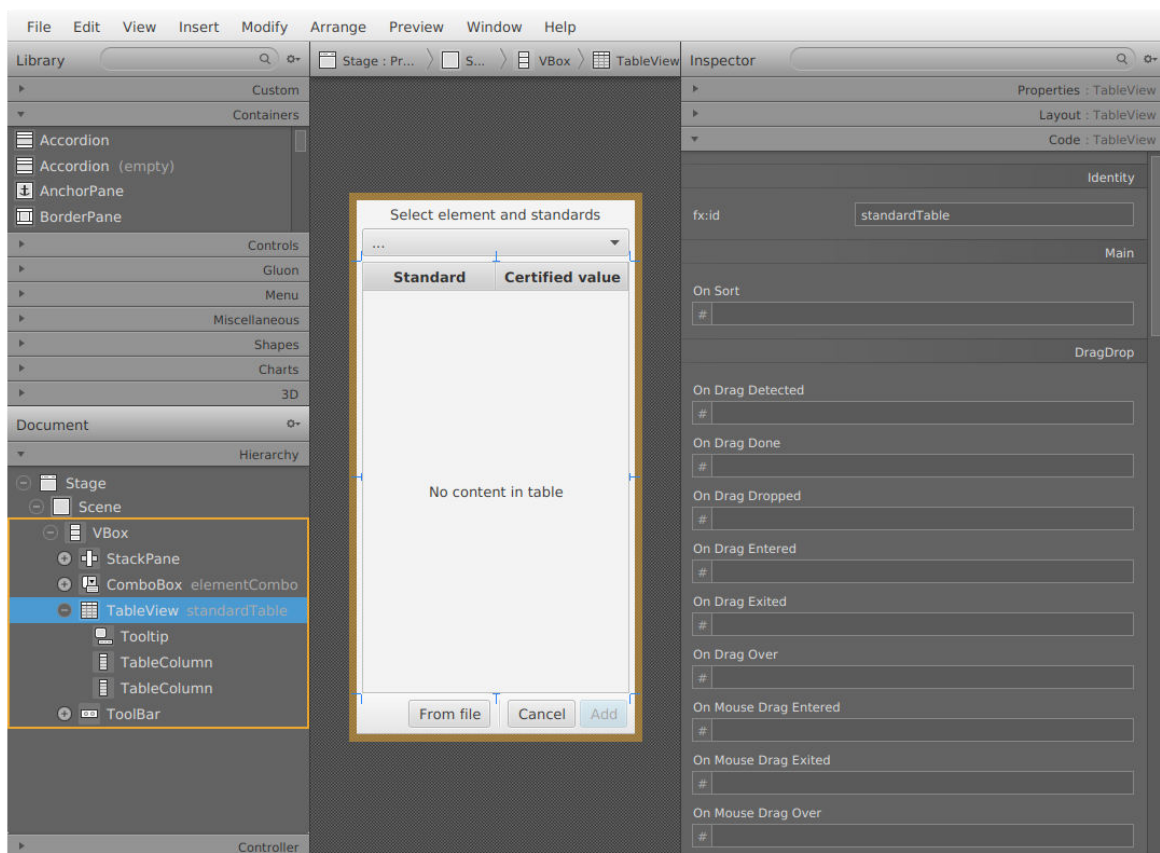
Výběr programovacího jazyka pro implementaci programu Calibration Master byl ovlivněn následujícími požadavky:

- multiplatformní podpora – běh na různých operačních systémech či platformách bez nutnosti úpravy programu
- rozšířenost platformy – platforma je dlouhodobě známá, dobře podporovaná, s početnou komunitou vývojářů
- dostupnost a otevřený zdrojový kód – kdokoli může program dále rozvíjet bez nutnosti platby licencí za programové vybavení
- další vlastnosti prostředí – podpora pro abstrakci aplikačních vrstev, dobrá podpora datových formátů, moderní vzhled aplikace, rozšířenost, dobrá úroveň produktivity během programování

S ohledem na tyto požadavky a akademické prostředí, pro které je aplikace primárně určena, byl zvolen programovací jazyk Java v aktuální verzi 14. Tento jazyk splňuje všechny výše uvedené požadavky, veškeré vybavení je zdarma dostupné pro řadu platforem, a to včetně kompletních zdrojových kódů a je aktivně vyvíjený. Další předností je skutečnost, že je běžně zařazován do výuky v akademickém prostředí a dá se tedy očekávat jeho relativní rozšířenost ve skupině potenciálních budoucích

příspěvatelů do kódu. Programovací jazyk Java je v současné době vyvíjen OpenJDK komunitou pod záštitou firmy Oracle Corporation. Prostředí je poskytováno pod licencí GPLv2 (za aplikování výjimky pro linkování).

Pro výběr toolkitu pro grafické uživatelské rozhraní byly kladeny stejné požadavky jako pro výběr programovacího jazyka. V současné době podporuje Java platforma dva univerzální toolkity – integrovaný toolkit Java Swing a modernější, nyní již samostatně vyvíjený toolkit JavaFX. Přednost byla dána modernějšímu toolkitu JavaFX, který obsahuje zabudovanou podporu pro všechny prvky uživatelského rozhraní, které připadaly v úvahu pro použití v Calibration Master, a to včetně grafů. Benefitem JavaFX je v porovnání s Java Swing modernější vnitřní architektura, nativní vzhled rozhraní a dostupnost vizuálního builderu uživatelského rozhraní – SceneBuilderu (obr. 6).



Obr. 6 Tvorba grafického rozhraní pomocí Scene Builderu.

Pomocí tohoto nástroje je možné vytvořit uživatelské rozhraní pomocí drag and drop. Takto vizuálně vytvořené rozhraní je pak načteno v programovém kódu a oživeno, tj. propojeno s daty a programovými akcemi. Pro vývoj byla využita verze aktuální v době vývoje, tedy Java FX 14. JavaFX je vyvíjeno OpenJDK komunitou pod licencí GPLv2 za podpory firmy Oracle Corporation. SceneBuilder je vyvíjen pod BSD licenci společností Gluon.

Klíčovou funkcionalitou programu Calibration Master je regresní analýza. Pro její implementaci byly zvažovány dvě podpůrné knihovny – komplexní Commons Math a minimalistická Thorwin Math. Knihovna Commons Math je komplexní nástroj zahrnující podporu pro všechny myslitelné statistické postupy, jde o dlouho vyvíjenou sadu nástrojů, které byly postupně doplňovány a rozšiřovány. Z tohoto důvodu je pro orientaci v této knihovně nutná nejen hlubší znalosti matematické statistiky, ale současně je vhodné se do určité míry seznámit i s historií knihovny samotné. Naproti tomu je Thorwin Math navržena s ohledem na jednoduchost a přímočaré programátorské rozhraní. Plusem je také důraz na vysoký výpočetní výkon, aniž by bylo nutno používat nativní sdílené knihovny, což by komplikovalo multiplatformnost programu. Z těchto důvodů byla při implementaci upřednostněna knihovna Thorwin Math. Knihovnu vyvíjí Sebaastian R. Hogenbirk a poskytuje ji pod licencí GPLv3.

Regresní metody byly implementovány s ohledem na možnost snadného doplnění dalších metod v budoucích verzích programu. Proto bylo vytvořeno obecné funkcionální rozhraní Regression operující nad desetinným datovým typem, stejný datový typ toto funkcionální rozhraní také vrací. Sada naměřených hodnot pak představuje číselnou množinu, na jejíž prvky se funkce Regression aplikuje, je-li potřeba získat sadu přesnějších přepočtených hodnot. Koeficienty regrese se získávají fittingem při analýze naměřených dat během tvorby kalibrační knihovny.

Lineární a polynomická regrese 1. a 2. stupně jsou implementovány pomocí polynomické regrese a fittingu dostupného v knihovně Thorwin Math. Pro implementaci dalších metod regrese stačí implementovat rozhraní `Regression` a instancovat regresní objekt, ostatní operace proběhnou automaticky a nový typ regrese je ihned dostupný a použitelný i v uživatelském rozhraní programu.

Klíčové funkce polynomické regrese v programu Calibration Master:

- *PolynomialRegression(String title, Integer order, List<Data<Double, Double>> data)*

instancuje regresi se zvoleným názvem, polynomickým stupněm a sadou hodnot k analýze

- *PolynomialRegression.getCoefficients()*

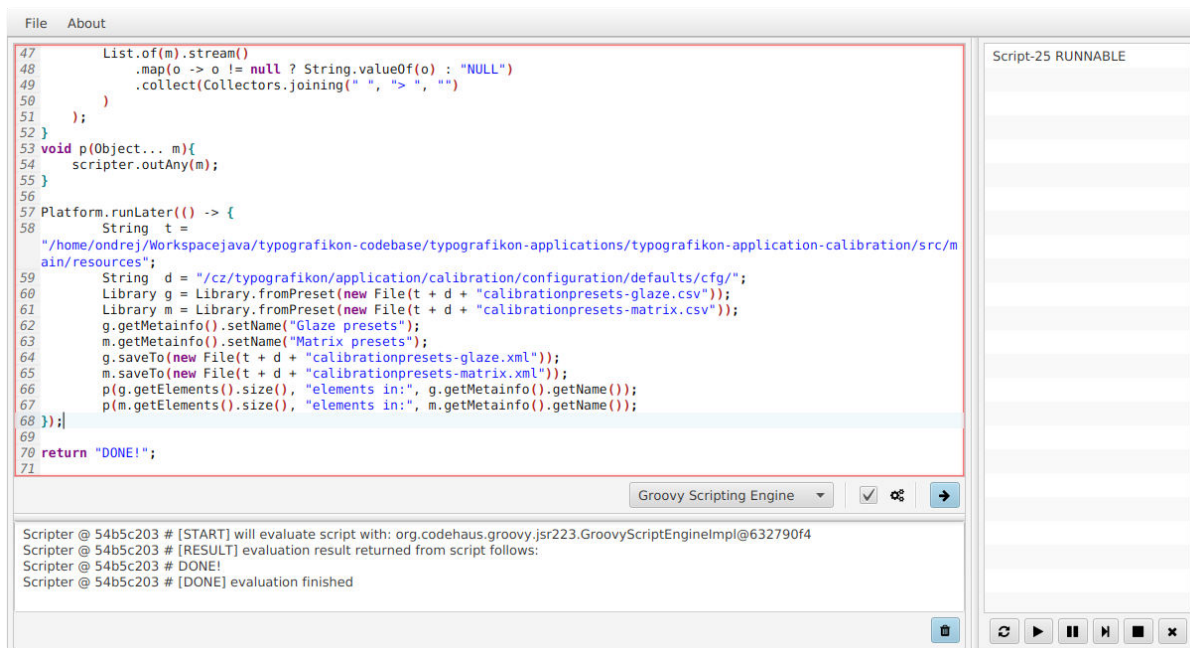
provede fitting a vrátí koeficienty polynomické regrese

- *PolynomialRegression.apply(Double)*

přepočte naměřenou hodnotu (při použití hotové kalibrační knihovny)

Pro trvalé uložení kalibrační knihovny byla zvolena serializace do formátu XML. Výhodou formátu je vynikající podpora na platformě Java a lidská čitelnost formátu. Pro serializaci byla využita třída `XMLEncoder` z interního modulu platformy OpenJDK.

V rámci vývoje programu Calibration Master jsme vyvinuli jednoduché skriptovací rozhraní, které zpřístupní programátorskou konzoli (obr. 7) pro vstup kódu v jazyce Groovy nebo kterémkoli dalším jazyce zahrnutého do běhového prostředí v rámci JSR 223. Pro užitečnost rozhraní jsme se rozhodli jej ponechat jako nedokumentovanou funkčnost i ve finální verzi programu. V případě zájmu o program toto rozhraní umožní například psaní skriptů pro doplňkové zpracování dat z měření – například import z externích datových formátů nebo jejich export.



```
47     List.of(m).stream()
48         .map(o -> o != null ? String.valueOf(o) : "NULL")
49         .collect(Collectors.joining(" ", ">", ""))
50     )
51 }
52 }
53 void p(Object... m){
54     scripiter.outAny(m);
55 }
56 }
57 Platform.runLater() -> {
58     String t =
59     "/home/ondrej/Workspacejava/typografikon-codebase/typografikon-applications/typografikon-application-calibration/src/main/resources";
60     String d = "/cz/typografikon/application/calibration/configuration/defaults/cfg/";
61     Library g = Library.fromPreset(new File(t + d + "calibrationpresets-glaze.csv"));
62     Library m = Library.fromPreset(new File(t + d + "calibrationpresets-matrix.csv"));
63     g.getMetainfo().setName("Glaze presets");
64     m.getMetainfo().setName("Matrix presets");
65     g.saveTo(new File(t + d + "calibrationpresets-glaze.xml"));
66     m.saveTo(new File(t + d + "calibrationpresets-matrix.xml"));
67     p(g.getElements().size(), "elements in:", g.getMetainfo().getName());
68     p(m.getElements().size(), "elements in:", m.getMetainfo().getName());
69 }
70 return "DONE!";
71 }
```

Scripter @ 54b5c203 # [START] will evaluate script with: org.codehaus.groovy.jsr223.GroovyScriptEngineImpl@632790f4
Scripter @ 54b5c203 # [RESULT] evaluation result returned from script follows:
Scripter @ 54b5c203 # DONE!
Scripter @ 54b5c203 # [DONE] evaluation finished

Obr. 7 Skryté skriptovací rozhraní vyvinuté pro účely programu Calibration Master.

Návrh využití výsledku – definování subjektů, které by měly být uživateli

Cílovým uživatelem aplikací Matrix-calib a Glaze-calib je badatel zaměřující se na výzkum keramiky. Typicky to budou pracovníci v oblasti památkové péče, zaměstnanci univerzit, muzeí, Akademie věd, či studenti oborů archeologie, muzeologie a geologie, kteří se zabývají petroarcheologií pravěké, protohistorické (antické) a historické (středověké a novověké) keramiky. Software může být využit konzervátory a restaurátory keramiky pro průzkum chemického složení. Je možné použití obou softwarů i pro studium moderních, průmyslově vyráběných keramických materiálů. Jelikož uživatel není limitován použitím přednastavených keramických standardů a může zadat hodnoty vlastní, je program použitelný pro kohokoliv, kdo ve svém oboru vyžaduje přepočet hodnot pomocí regresní funkce. Software je volně dostupný ke stažení ve formátu zip na adrese Digitálního archivu středověké keramiky www.dask.zcu.cz v sekci výstupy projektu též pro zájemce o problematiku z řad veřejnosti. K dispozici jsou zde rovněž nápovědy k oběma programům

Literatura:

Hunt, A. M. W., Dvoracek, D. K., Glascock, M. D., & Speakman, R. J. (2014a). Major, minor and trace element mass fractions determined using ED-XRF, WD-XRF and INAA for five certified clay reference materials: NCS DC 60102–60105; NCS DC 61101 (GBW 03101A, 03102A, 03103, and 03115). *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, 302(1), 505–512.

Hunt, A. M. W., Dvoracek, D., Glascock, M. D., & Speakman, R. J. (2014b). Major, minor and trace element mass fractions determined using ED-XRF, WD-XRF and INAA for three synthetic mullite reference materials (NCS HC 14807; NCS HC 14808; and NCS HC 14809) and five stream sediment reference materials (GBW 07302; GBW 07310; GBW 07311; GBW 07312; and GBW 07405). *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, 303(1), 1005–1007

Jochum, K. P., Nohl, U., Herwig, K., Lammel, E., Stoll, B., & Hofmann, A. W. (2005). GeoReM: A New Geochemical Database for Reference Materials and Isotopic Standards. *Geostandards and Geoanalytical Research*, 29(3), 333–338.

Elektronické zdroje:

Apache Commons v. 1.8. [online]. Dostupné z:

<https://commons.apache.org>

Hogenbirk, S. R. (2020). Thorwin Math. Mathematics library for Java.

[online]. Dostupné z: <http://www.thorwin.nl>

JavaFX. [online] Dostupné z:

<https://www.oracle.com/java/technologies/javase/javafx-docs.html>

Java Platform, Standard Edition v. 14. [online]. Dostupné z

<https://www.oracle.com/java/technologies/java-se-glance.html>

OpenJDK v. 14. [online]. Dostupné z: <https://openjdk.java.net/>

OpenJFX v. 14. [online]. Dostupné z: <https://openjfx.io/>