

Instrukcja do ćwiczenia nr 4 i 5

[1] Na podstawie instrukcji do ćwiczenia nr 3 przygotuj się do zastosowania procedury opracowywania danych z wykorzystaniem programów: Origin, Excel, MATLAB z PLS-Toolbox, stosowanej w LLSM. Analizę wykonaj dla zbioru danych z katalogu LMDT/cwiczenie4.

I. Origin

- a) utwórz worksheet zawierający widma zarejestrowane w trakcie ćwiczeń
- b) zapisz utworzony plik i wyeksportuj dane do pliku postaci „nazwa.txt”
- c) wykorzystując wiersz *comments* przenieś dane dotyczące nazw próbek do programu Excel

II. Excel i notatnik

- a) utwórz plik zawierający „row labels”

III. Matlab/PLS-Toolbox

- a) w *workspace* zbuduj zbiory *y*; *y2*; *x*; *labels*
- b) w *command window* uruchom analizę PCA
- c) dokonaj analizy otrzymanych wyników

[2] Wydrukuj wykresy $Loadings\ PC1=f(wavenumber)$ oraz $Scores\ PC2=f(Scores\ PC1)$

[3] Wykorzystując spektrometr Ramana oraz program LabSpec zarejestruj widmo wycinków piersi.

Sprawozdanie z ćwiczeń nr 4 i 5 powinno zawierać:

- [1] Wydruk widma zarejestrowanego w czasie wykonywania ćwiczenia.
- [2] Wydruki *Loadings* $PC1=f(\text{wavenumber})$ oraz *Scores* $PC2=f(\text{Scores } PC1)$
- [3] Wnioski wpływające z wykonanego ćwiczenia.
- [4] Wykaz literatury.

Materiały pomocnicze do ćwiczenia nr 4 i 5 umieszczono na stronie:

<http://mitr.p.lodz.pl/raman/jsurmacki/pliki/zajecia/LMDiT/LMDiT.html>