PFXAFS DSP 測定データ解析プログラム

「DSP_DATARECONSTRUCTOR」

取扱説明書

2018 年 3 月 28 日

KEK-PF 仁谷浩明

Hiroaki.nitani@kek.jp

目次

1. はじめに 2
2. 動作環境 2
3. 事前に用意するデータ 2
4. ソフトウェアの起動 2
5. データ読み込みタブ 3
5.1. バイナリデータファイルの読み込み 3
5.2. DSP 設定ファイルの読み込み 4
5.3. XAFS データの読み込み 5
6. ROI 設定および XAFS 再構成タブ 5
6.1. 蛍光スペクトル表示機能 5
6.2. XAFS スペクトル再構成機能 6
7. その他 6

1. はじめに

「DSP_DataReconstructor」は PF の硬 X 線実験ステーションにおいて多素子 SSD と DSP システムを用いて蛍光 XAFS 測定した際に得られる全蛍光スペクトルデータを用いて、任意点の蛍光スペクトル取得やオフラインでの ROI の切り直しによる XAFS スペクトルの再構成が行えるソフトウェアです。

2. 動作環境

本ソフトウェアを動作させるには Microsoft .NET Framework Version 4.5.2 以上の実行環境が必要です。ソフトウェアが起動しない場合は、Windows の場合は適切な.NET Framework ランタイムを Microsoft からダウンロード、Linux の場合は Mono 実行環境をインストールしてください。

3. 事前に用意するデータ

このソフトウェアで使用するデータファイルは
・DSP バイナリデータ（*.ssd）→必須
・DSP 設定ファイル（*.ssd_ini）→オプション
・XAFS データ（9809 フォーマット）→XAFS 再構成時には必須
の 3 種類です。これらは PFXAFS ソフトウェアで DSP による蛍光 XAFS 測定を行うと自動生成されます。
このうち DSP バイナリデータは本ソフトウェアを使用する上で必須のファイルになります。このデータには全測定点・全素子の蛍光スペクトルデータがバイナリ形式で保存されています。DSP 設定ファイルは蛍光 XAFS 測定時に蛍光スペクトル上のどの領域を積算したか（どの範囲に ROI を設定したか）を読み出すことができます。本ソフトウェア上で ROI を新規に設定することも可能ですので必須ではありません。
XAFS データは通常 9809 フォーマットと呼ばれているもので、透過 XAFS 測定でも出力されるテキスト形式の XAFS スペクトルデータです。DSP バイナリデータには測定点のエネルギー情報（横軸）が含まれていないため、XAFS スペクトルを再構築するためには XAFS データファイルからエネルギー情報を読み込む必要があります。

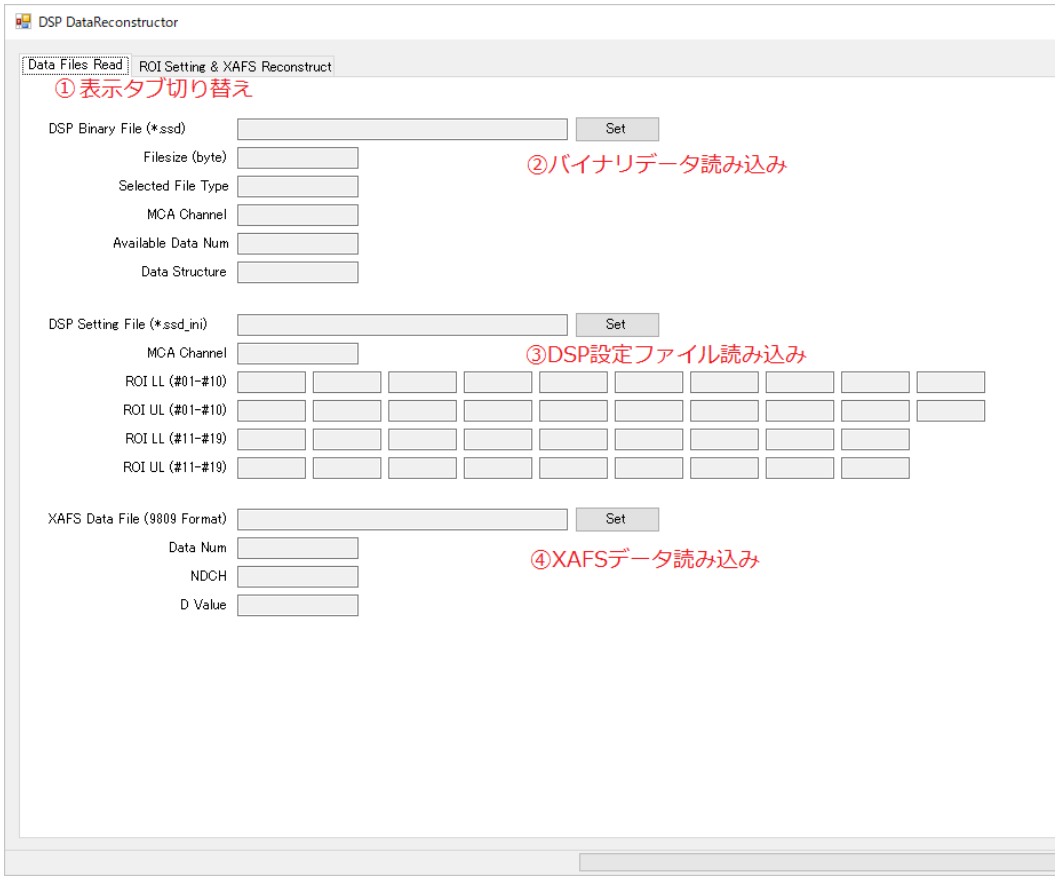
4. ソフトウェアの起動

Web で配布しているソフトウェアは ZIP 形式（パスワードなし）で圧縮してあるため、適切なソフトで展開し、実行ファイルである「DSP_DataReconstructor.exe」を取り出してください。その後「DSP_DataReconstructor.exe」を実行することでソフ

トウェアが起動します。

5. データ読み込みタブ

ソフトウェアを起動するとデータ読み込みタブが表示されます。スペクトル表示タブから移動する場合は上部にある“①表示タブ切り替え”で「Data File Read」をクリックしてください。

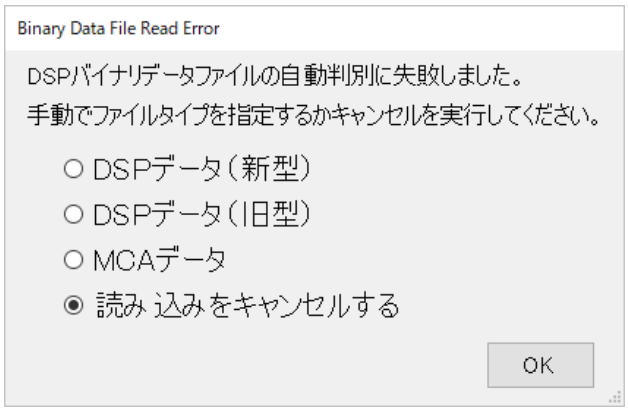


5.1. バイナリデータファイルの読み込み

蛍光スペクトルが保存されたバイナリファイル（通常数百 MB 程度）を読み込むには“②バイナリデータ読み込み”のボタンを押してファイルを指定します。すべてのデータをメモリに展開する関係上、読み込みには時間がかかります。読み込みの進捗状況は下部のステータスバーにテキストとプログレスバーで表示されます。読み込み中も他のファイルの読み込み等を行うことができます。読み込みが完了し「Data Structure」の欄に OK が表示されれば読み込み完了です。

間違ったファイルを指定したり、破損したファイルを読み込もうとしたりすると、ソフトウェアがファイル形式を自動判別できないため、読み込みを続行するかキャ

ンセルするかのダイアログが表示されます。



間違ってファイルを指定した場合は「読み込みをキャンセルする」を選択してください。

ファイルが正しいのにこの画面がでる場合はファイルが壊れています（この段階ではファイルサイズが正しいかどうかで判定しています)。この場合は、どのシステムで測定したデータかを指定して読み込みを続行してください。破損箇所に到達するまでに読み込めたデータが有効になります。なお、ファイルタイプは通常「DSP データ（新型)」です。他のタイプは DSP システム（とそれ以前に存在した MCA システム）が導入された初期の短期間に測定されたデータのみが該当します。

読み込み時に表示されるパラメータは次のようになっています。

・Filesize：バイナリファイルのサイズです。

・Selected File Type：バイナリファイルのデータ格納形式です。通常は自動判別されます。DSP mode (New)、DSP mode (Old)、MCA mode の 3 種類があります。

・MCA Channel：波高分析器のチャンネル数です。

・Available Data Num：バイナリファイルに含まれるデータセット数です。XAFS 測定時のエネルギー点の数に一致します。後述の XAFS データのデータセット数と一致しない場合は XAFS スペクトルの再構成はできません。

5.2. DSP 設定ファイルの読み込み

蛍光 XAFS 測定時に自動保存される DSP の設定ファイルから測定時に設定した ROI 情報を読み出します。“③DSP 設定ファイル読み込み”のボタンを押してファイルを指定します。読み込みが完了するとパラメータが表示されます。

・MCA Channel：波高分析器のチャンネル数です。バイナリファイルのものと一致していないと ROI ウィンドウがずれます。

・ROI LL/UL：設定した ROI の下限および上限チャンネル番号です。ファイルを読み込むとこの値が次画面に反映されます。

5.3. XAFS データの読み込み

バイナリファイルから XAFS スペクトルを再構成するためには XAFS データの読み込みが必要です。“④XAFS データの読み込み”のボタンを押してファイルを指定します。読み込みが完了するとパラメータが表示されます。

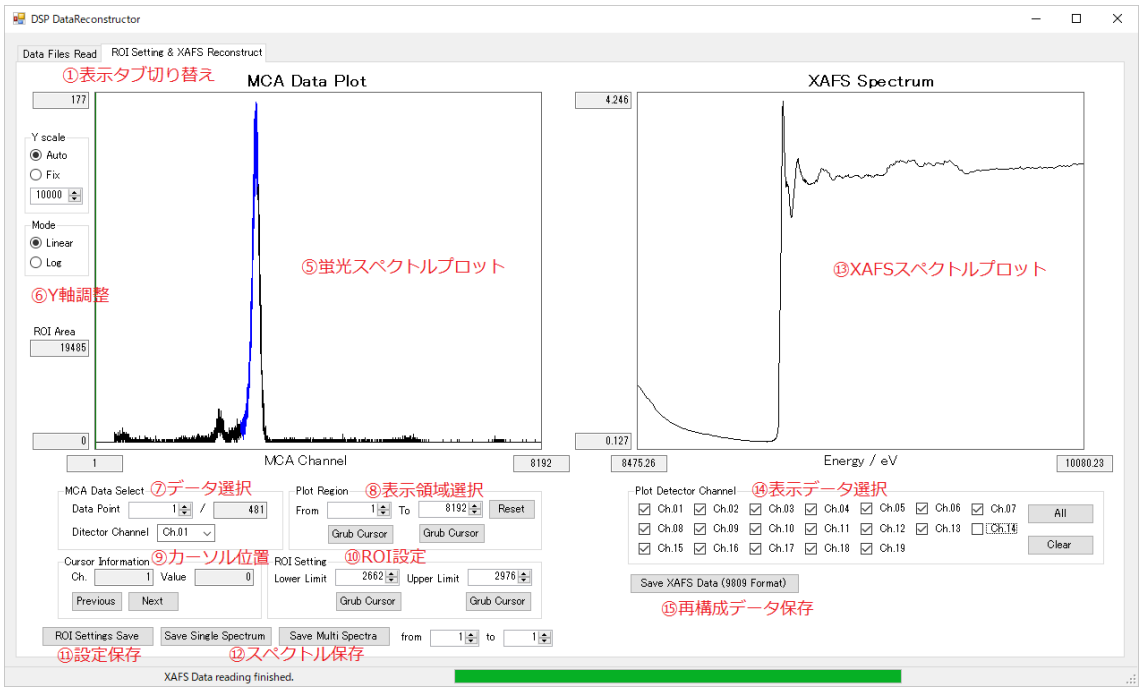
・Data Num：測定データ点数です。バイナリファイルのものと一致している場合のみ XAFS スペクトル再構成が行えます。

・NDCH：測定ファイルに記録されているデータ列数です。通常は SSD 素子数（19）+電離箱シグナル数（1～3）です。

・D Value：ブラッグ角からエネルギーへ変換する際の結晶格子面間隔です。スペクトルの表示のみに使用し、ファイル保存時にはブラッグ角のまま保存されます。

6. ROI 設定および XAFS 再構成タブ

各ファイルの読み込みが完了したら上部の“①表示タブ切り替え”で「ROI Setting & XAFS Reconstruct」をクリックしてください。



6.1. 蛍光スペクトル表示機能

バイナリファイルが読み込まれると、“⑤蛍光スペクトルプロット”が有効になります。プロットされるデータは“⑦データ選択”で、測定点番号と検出器の素子番号を指定してください。データは即座にプロットに反映されます。プロット画面をクリ

ックすると緑色のカーソルが表示されます。カーソル位置の情報は“⑨カーソル位置”情報として表示されます。また「Previous」「Next」ボタンでカーソル位置の微調整ができます。“⑥Y 軸調整”では、プロットの縦軸の最大値と表示モード（線形・対数）を変更できます。また、“⑧表示領域選択”でプロット範囲を制限することにより拡大表示を行うことができます。「Grub Cursor」ボタンを押すことでカーソル位置のチャンネル番号をピックアップすることもできます。
プロット中の青色表示になっている部分が ROI になります。この領域を積分カウントしたものが XAFS スペクトル再構成に使用されます。積分値は「ROI Area」に表示されています。この ROI 設定は“⑩ROI 設定”のパラメータで変更できます。変更した ROI 情報をファイルに保存するには“⑪設定保存”ボタンを使用します。
また、プロットされている蛍光スペクトルをテキストデータとして保存するには“⑫スペクトル保存”の「Save Single Spectrum」ボタンを使用します。保存形式は波高分析チャンネルとカウント数の 2 列を含む CSV ファイルとなります。複数のデータ点のデータを連続保存する場合には「Save Multi Spectra」ボタンを使用します。ボタンの右側にあるパラメータで保存するデータ点の範囲を設定します。From と To を同じ値にすると 1 点のみ出力します。データはデータ点ごとに連番付きファイルが 1 ファイルずつ作成されます。こちらも CSV ファイルとなっていますが、1 ファイルに 19 素子すべてのデータが含まれます。

6.2. XAFS スペクトル再構成機能

バイナリファイルと XAFS データファイルが読み込まれており、かつ、それぞれのデータ点数が一致する場合は“⑬XAFS スペクトルプロット”に XAFS スペクトルが表示されます。初期状態では 19 素子すべてのデータを足しあわせて I0 強度で割ったものが表示されています。“⑭表示データ選択”で特定の素子のみを足しあわせることができます。再構成された XAFS スペクトルをファイルに保存するには“⑮再構成データ保存”ボタンを押します。データは標準的な 9809 フォーマットで保存されますので、XAFS 解析ソフトウェアなどで利用可能となります。ヘッダー部分など SCA データ領域以外の部分は元の XAFS データファイルからコピーされたものが書き込まれます。

7. その他

ソフトウェアに関するお問い合わせは PF-XAFS Web サイトの「お問い合わせ」フォームをご利用ください。

Copyright © 2018 Hiroaki NITANI, KEK-PF All Rights Reserved.