CSV File Creater for PF-QXAFS

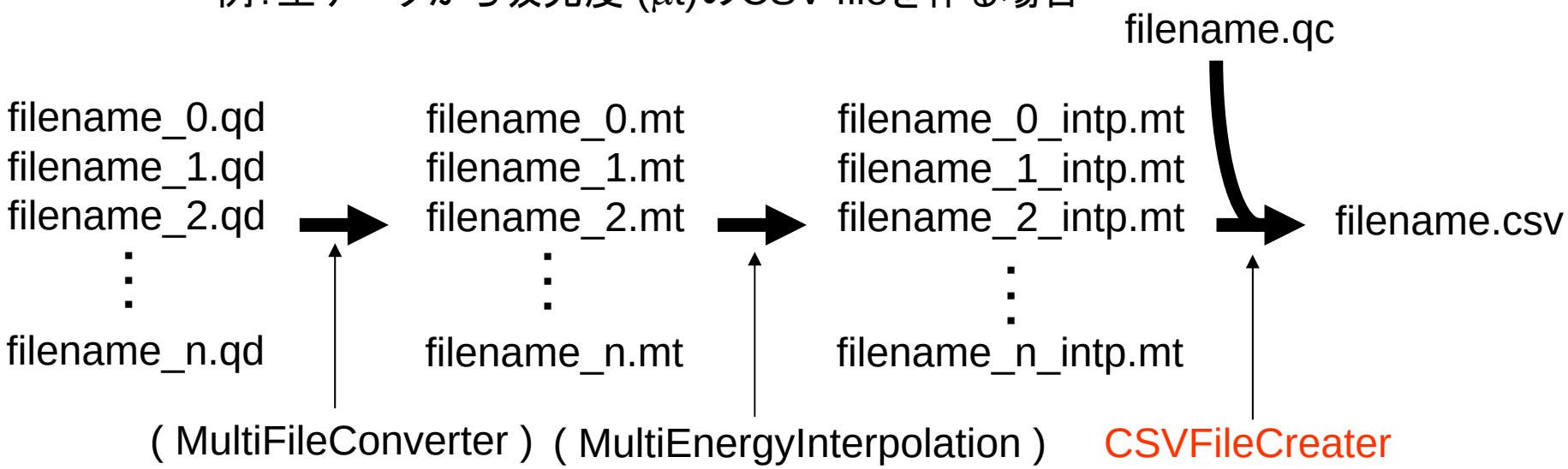
はじめに

PFにおけるQXAFSは比較的遅い変化を対象とした時分割測定に用いることができます。実際の測定で出力されるファイルは通常のステップスキャンと同じフォーマットのデータ (拡張子は.qc)と測定開始時間などが記録された条件ファイル (拡張子は.qd)となります。

時分割測定の解析ではXANESやEXAFSのフーリエ変換の時間変化を調べたりプロットしたりすることが予想されます。また、XANESのあるエネルギーの吸光度の時間変化をプロットすることもあるかもしれません。そこで、qc file から時間とデータファイル名を読み込み、時間に対してプロットしやすいようにまとめたファイル (csv file か dat file for gnuplot)を出力するプログラムを作りました。

なお後述の通り、一つのX軸に対して複数のデータをまとめるため、ex3 fileやmt fileを読み込んでμtの時間変化を見るためには全てのファイルのエネルギー軸が同じである必要があります。元のQXAFSデータはエンコーダの実測値が入るので測定データを変換しただけのex3 fileや mt fileのエネルギー軸は一致していません。データ補間プログラム (FileConverter か MultiEnergyInterpolation) を用いて全てのデータの軸を揃えてから読み込んでください。

例：生データから吸光度 (μt)のCSV fileを作る場合



概要

QXAFS測定時に作成される条件ファイル filename.qcから測定開始時間を読み込んで、
その測定データ filename_rep.qdから作成された データファイル(.mt , .ex3 , .rex)を
時間に対して並べたファイルを作成します。
出力されるファイルはcsv形式もしくはgnuplotで三次元プロットをするための形式 (.dat)
となります。読み込むX軸 (下の例ではエネルギー軸)は最初のファイルのものとなります。

例: n個のex3ファイルを読み込んで出力した場合

CSV file

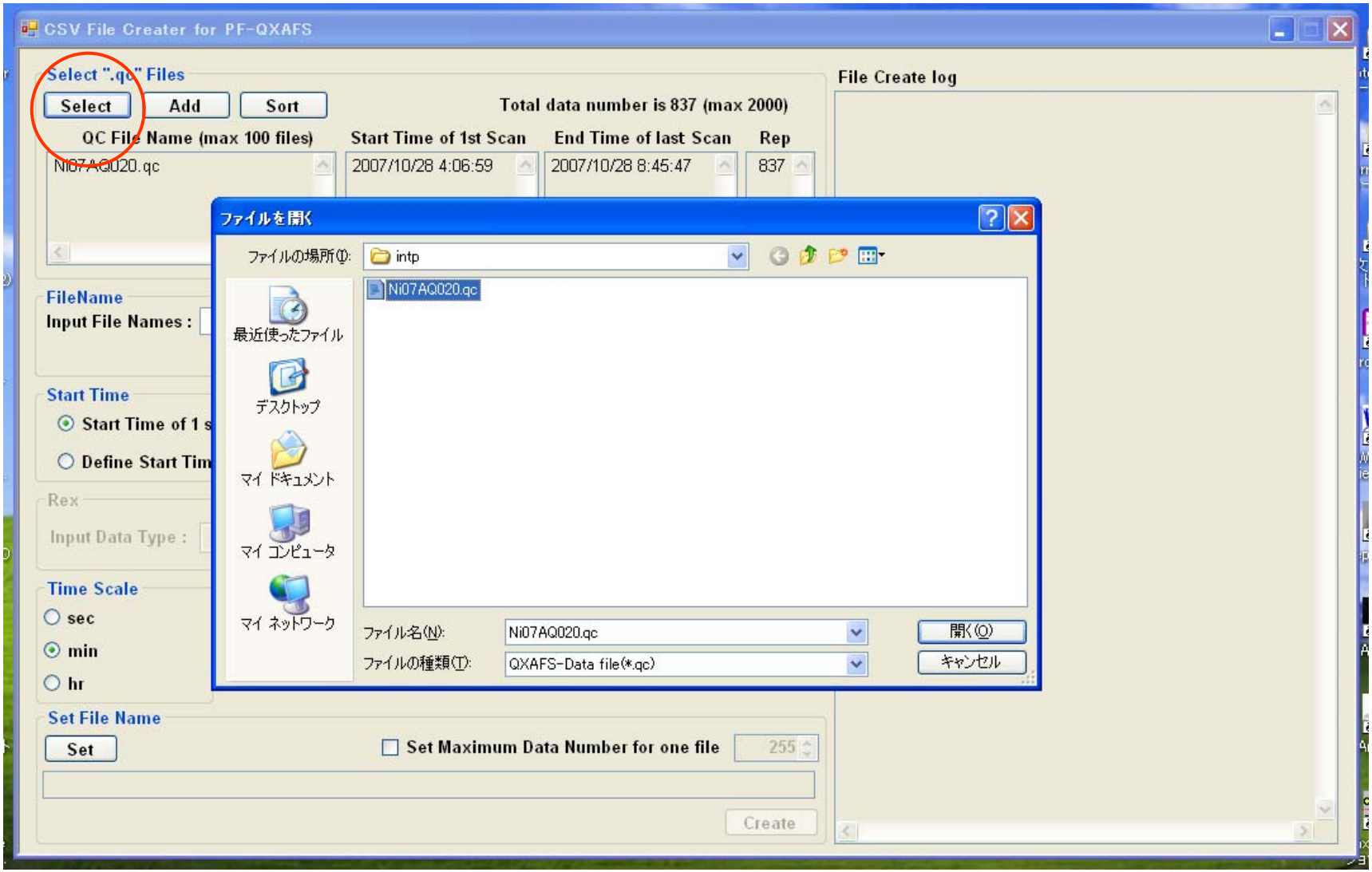
$$
\begin{array}{l}
\quad T_1, \quad T_2, \quad \cdots\cdots, \quad T_n \\
E_1, \mu t_1(E_1), \mu t_2(E_1), \cdots\cdots, \mu t_n(E_1) \\
E_2, \mu t_1(E_2), \mu t_2(E_2), \cdots\cdots, \mu t_n(E_2) \\
E_3, \mu t_1(E_3), \mu t_2(E_3), \cdots\cdots, \mu t_n(E_3) \\
\vdots \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad \vdots \\
E_k, \mu t_1(E_k), \mu t_2(E_k), \cdots\cdots, \mu t_n(E_k)
\end{array}
$$

dat file (for gnuplot), タブ区切り

$$
\begin{array}{lll}
T_1 & E_1 & \mu t_1(E_1) \\
T_1 & E_2 & \mu t_1(E_2) \\
\vdots & \vdots & \vdots \\
T_1 & E_k & \mu t_1(E_k) \\
 & \text{(space)} & \\
T_2 & E_1 & \mu t_2(E_1) \\
T_2 & E_2 & \mu t_2(E_2) \\
\vdots & \vdots & \vdots \\
T_2 & E_k & \mu t_2(E_k) \\
 & \text{(space)} & \\
\vdots & \vdots & \vdots
\end{array}
$$

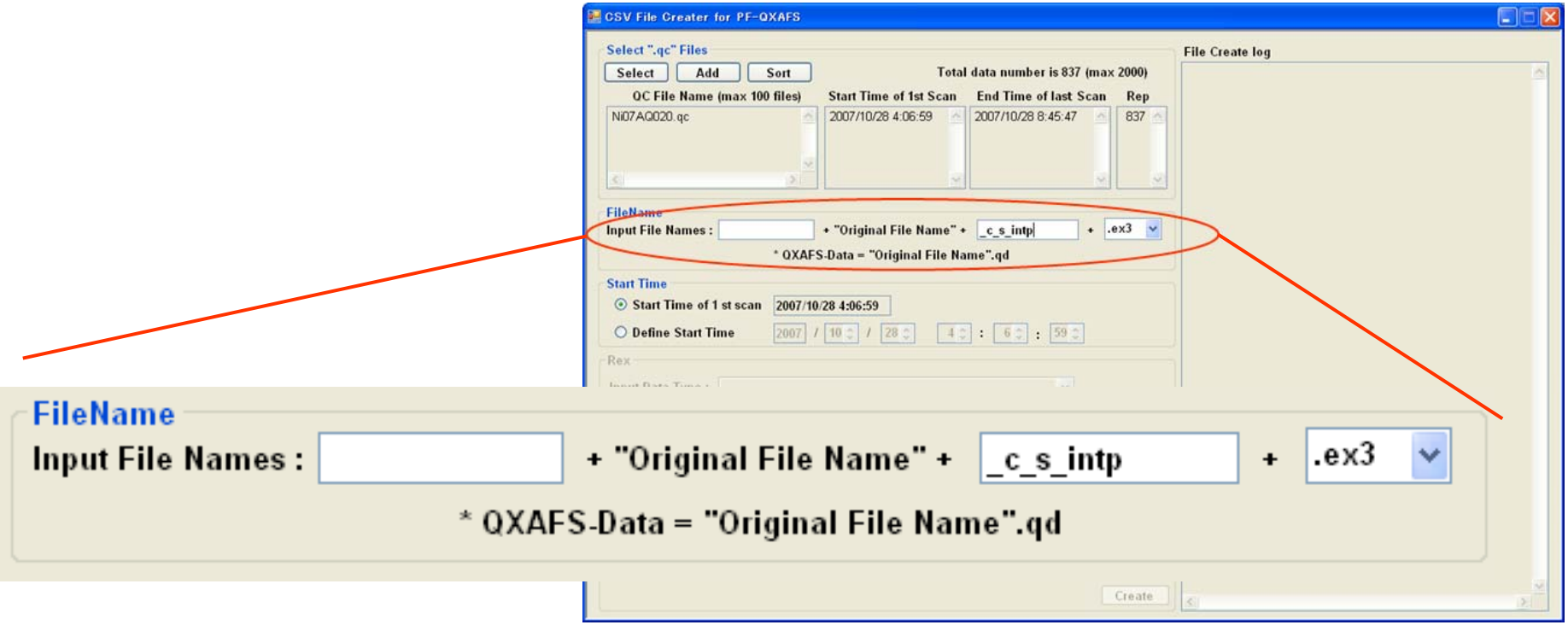
* CSV file, dat fileともに読み込むファイル (ex3, mt, rex)の軸
(ex3 fileの場合は エネルギー)がそろっている必要があります。

QXAFS条件ファイル (*.qc)を選択する



左上の “select” をクリックして qc fileを選択します (複数選択可能)
複数のqc fileを選択した場合は “sort”をクリックすると時間順に並べ変えます

読み込むファイル名を記入する

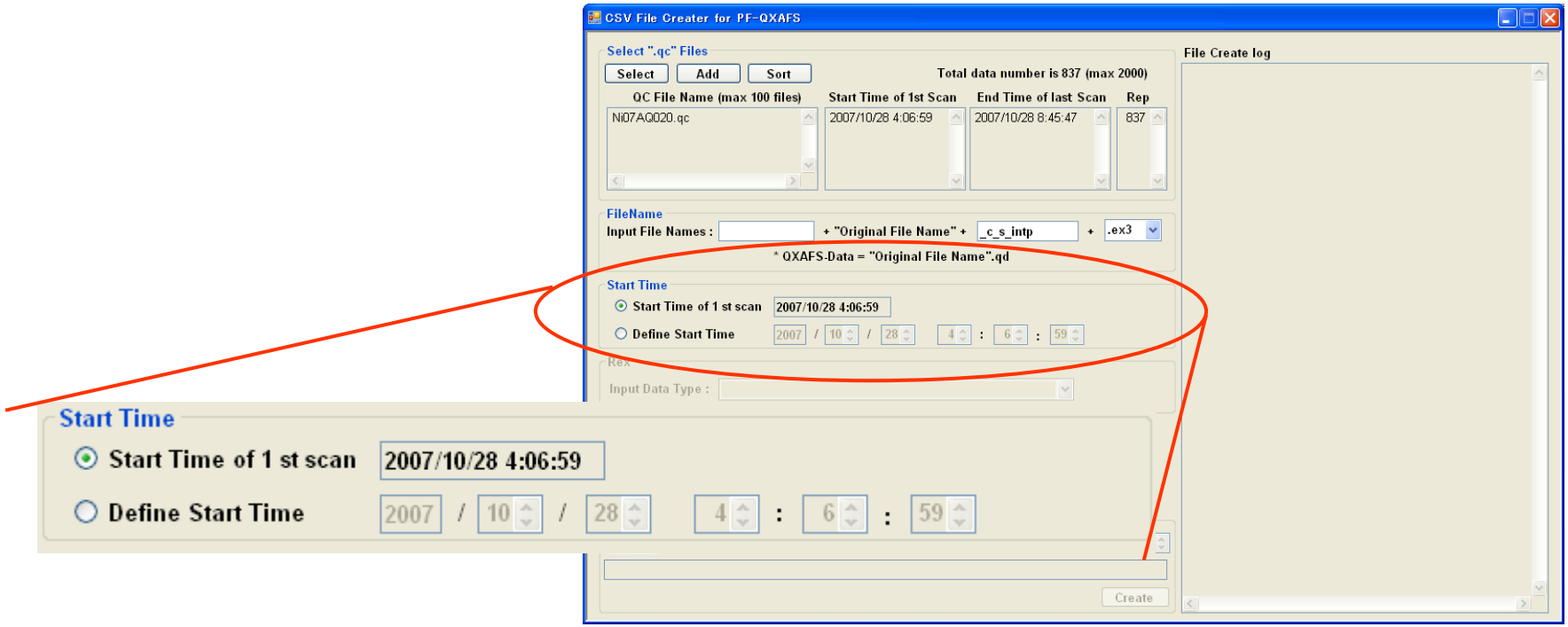


filename.qcという条件ファイルを読み込んだ場合、実際の測定ファイルは
filename_rep.qdというファイル (rep:繰り返し回数)になります。
“ Original File Name “ は “ filename_rep “となります。

もしも filename_rep_c_s_intp.ex3 という一連のex3 fileを読み込むときは
後ろの空白に “_c_s_intp” と入力し、拡張子 “.ex3”を選択します

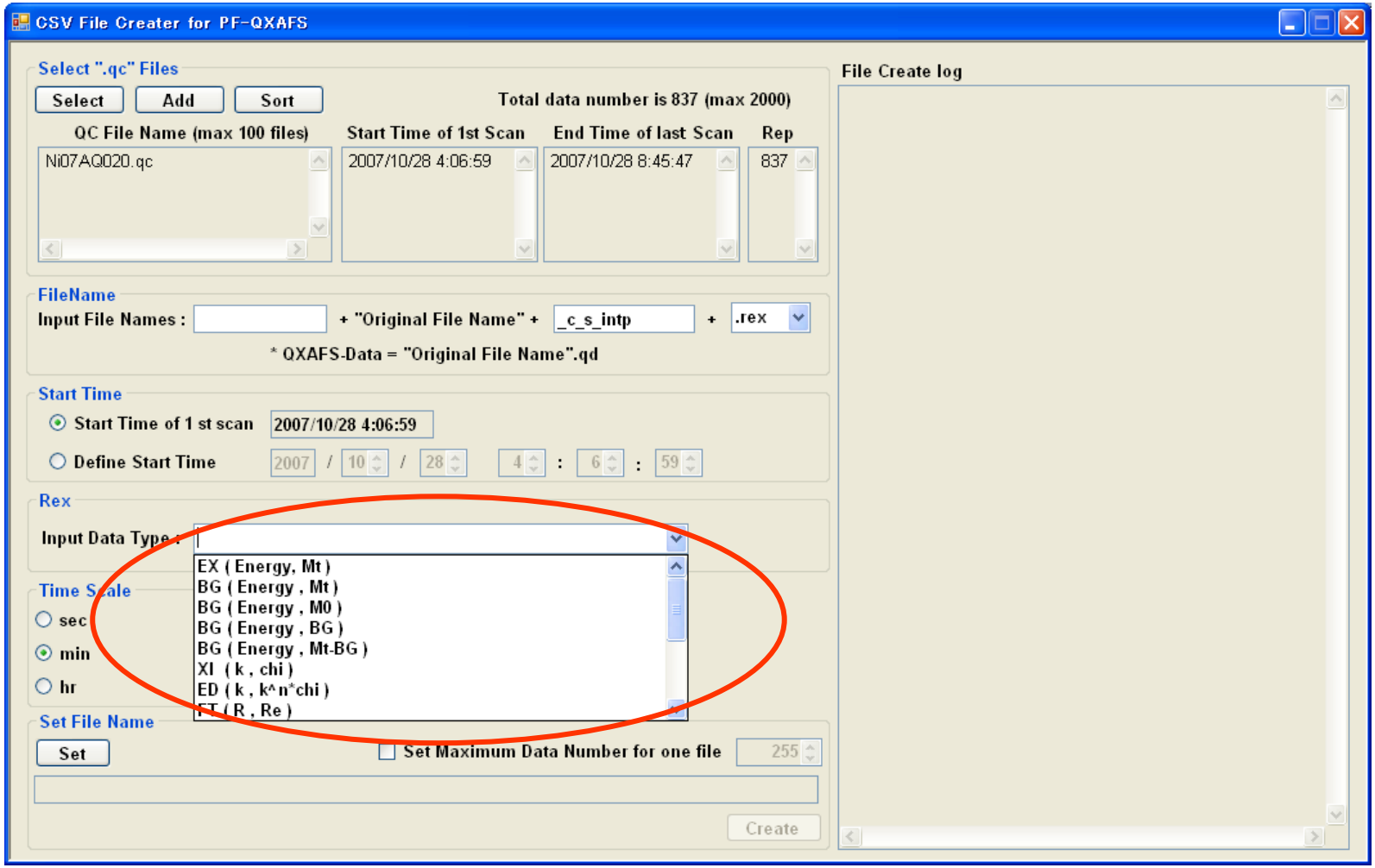
＊ 読み込むファイルと対応するqc fileは同じフォルダになければなりません

時間の原点を選択、入力する



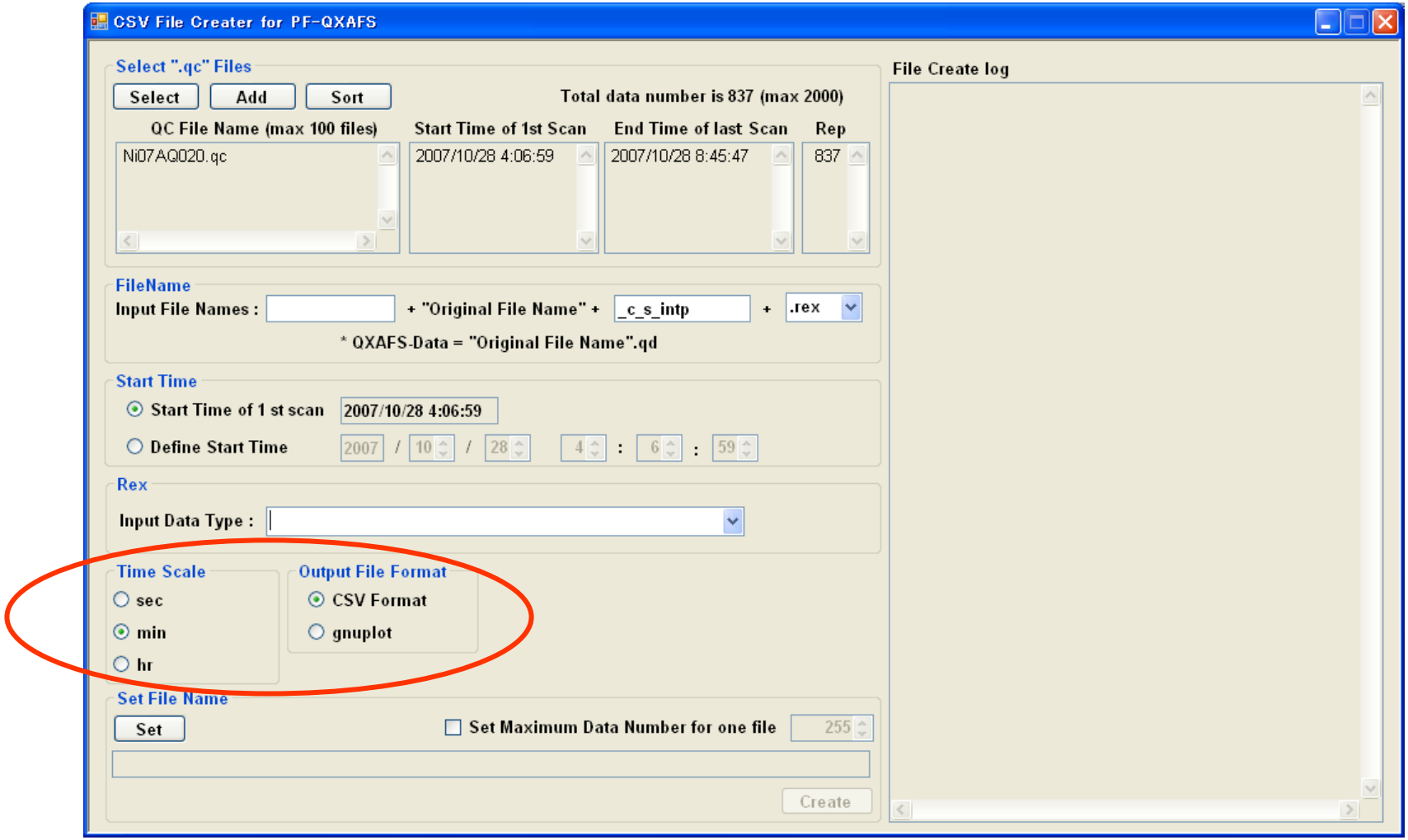
qc fileを選び、複数の場合は ”sort”をクリックすると、最初の測定開始時間がデフォルトの原点の時間 (start time, t=0)となります。出力されるファイルの時間はこの時間からのずれが記録されます。
Defile start timeを選択すればこの原点の時間 (t=0)を任意に設定することが可能です。

rex fileの場合はfile中のどの情報を読み込むかを選択する

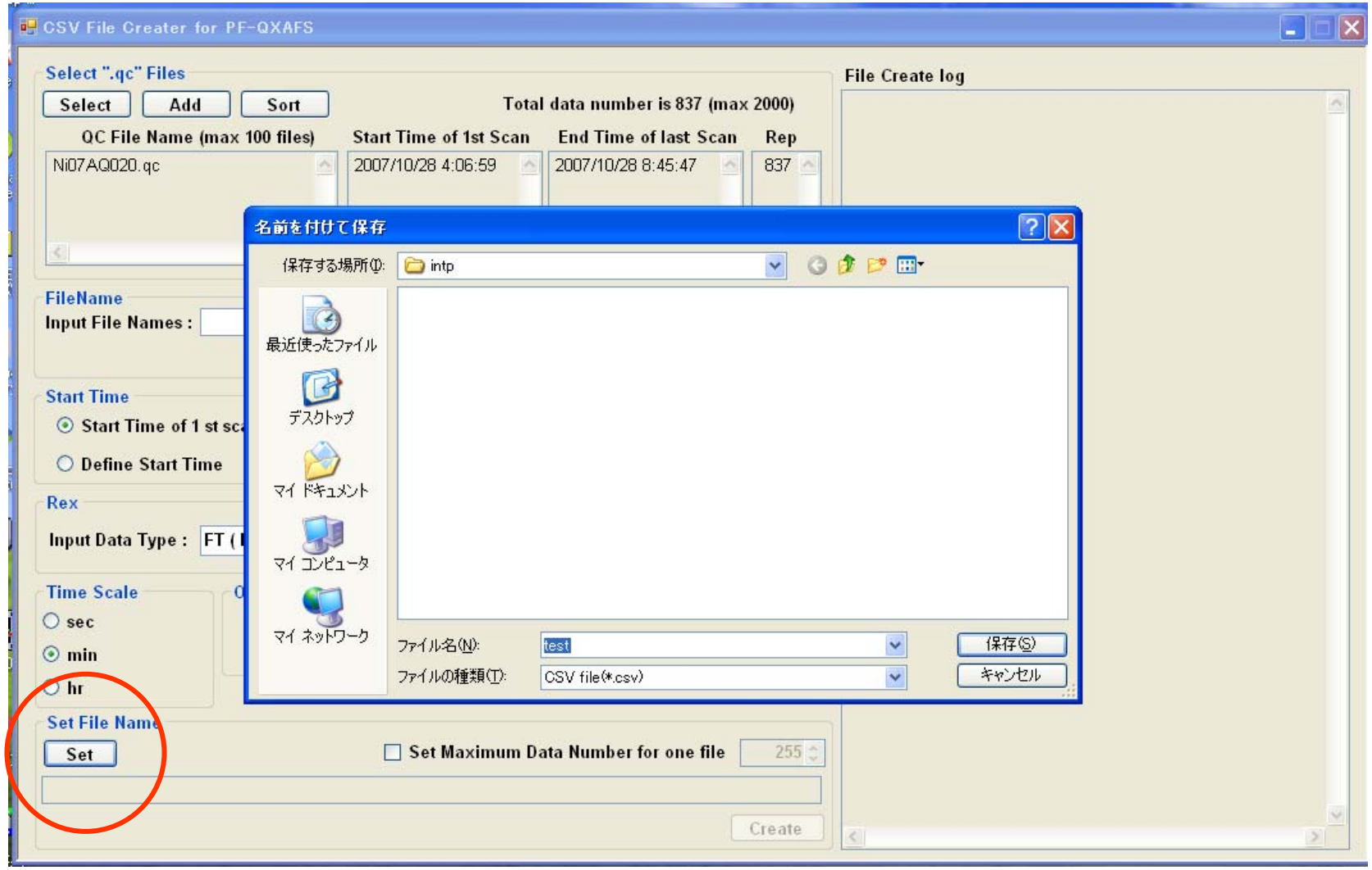


rex fileの場合は μt , χ(k), FTなど、どれをファイルに書き出すかを選択する

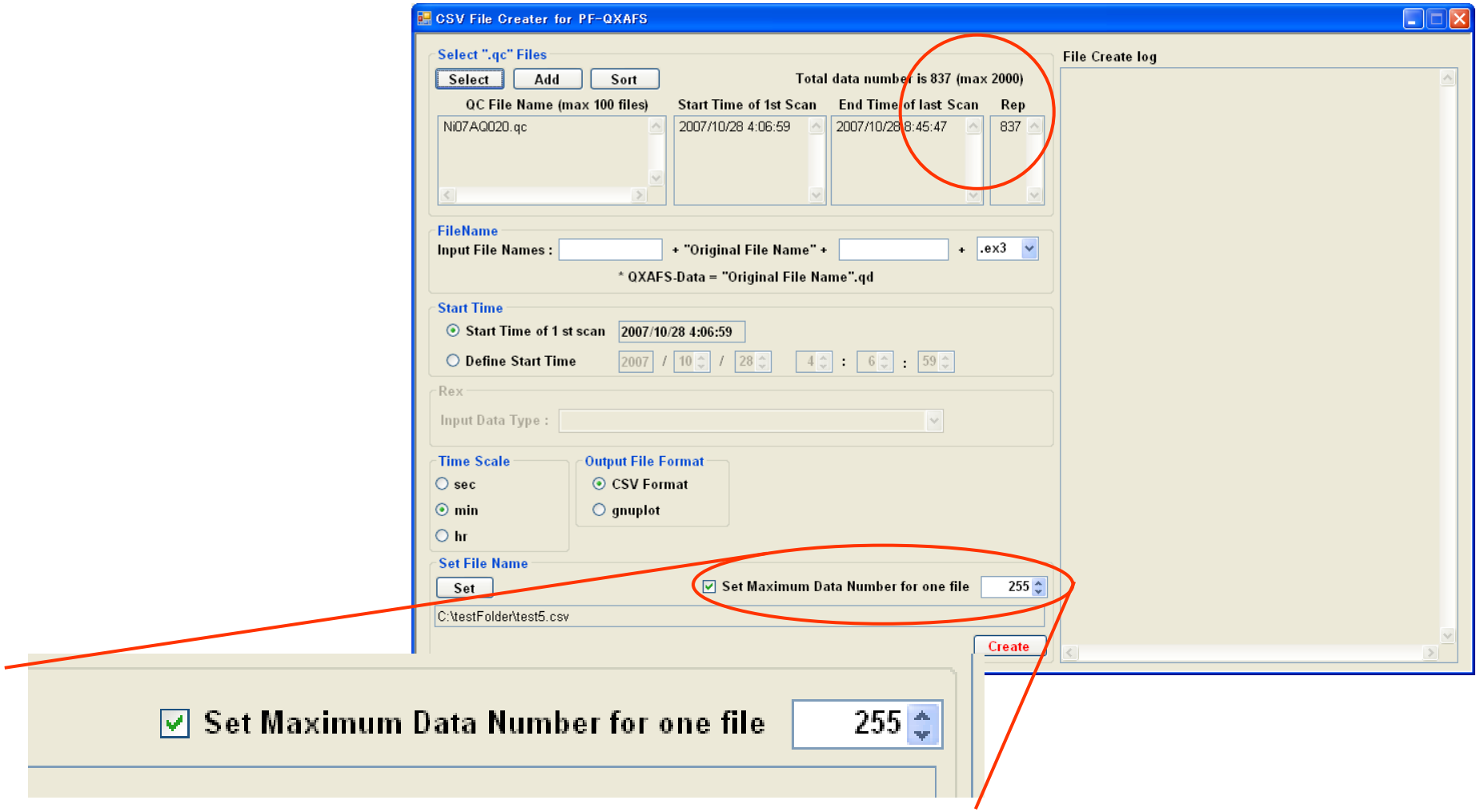
記録する時間スケールと出力形式を選択する



保存先とファイル名を入力する

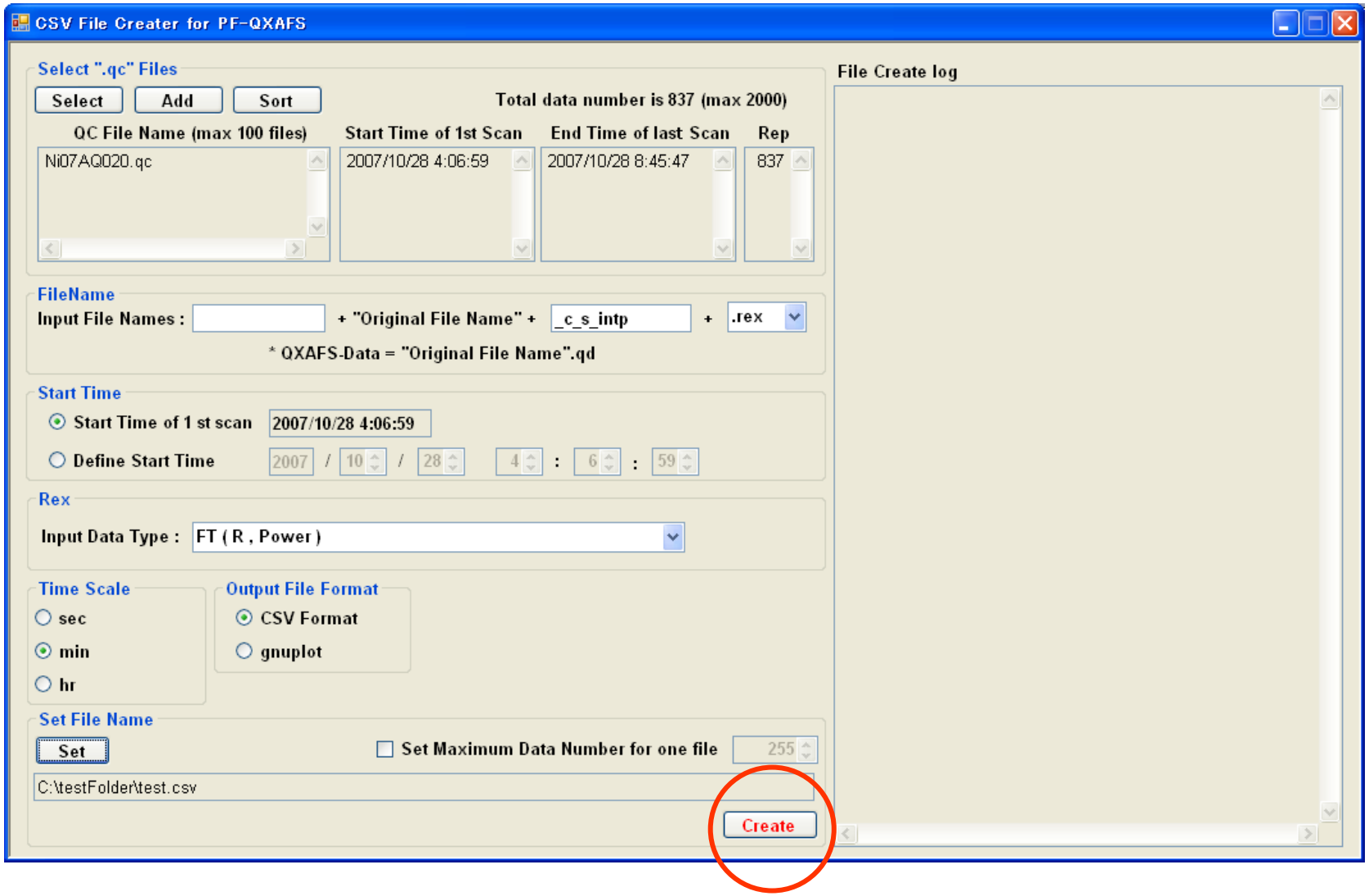


1ファイルあたりのデータ数に制限をかける



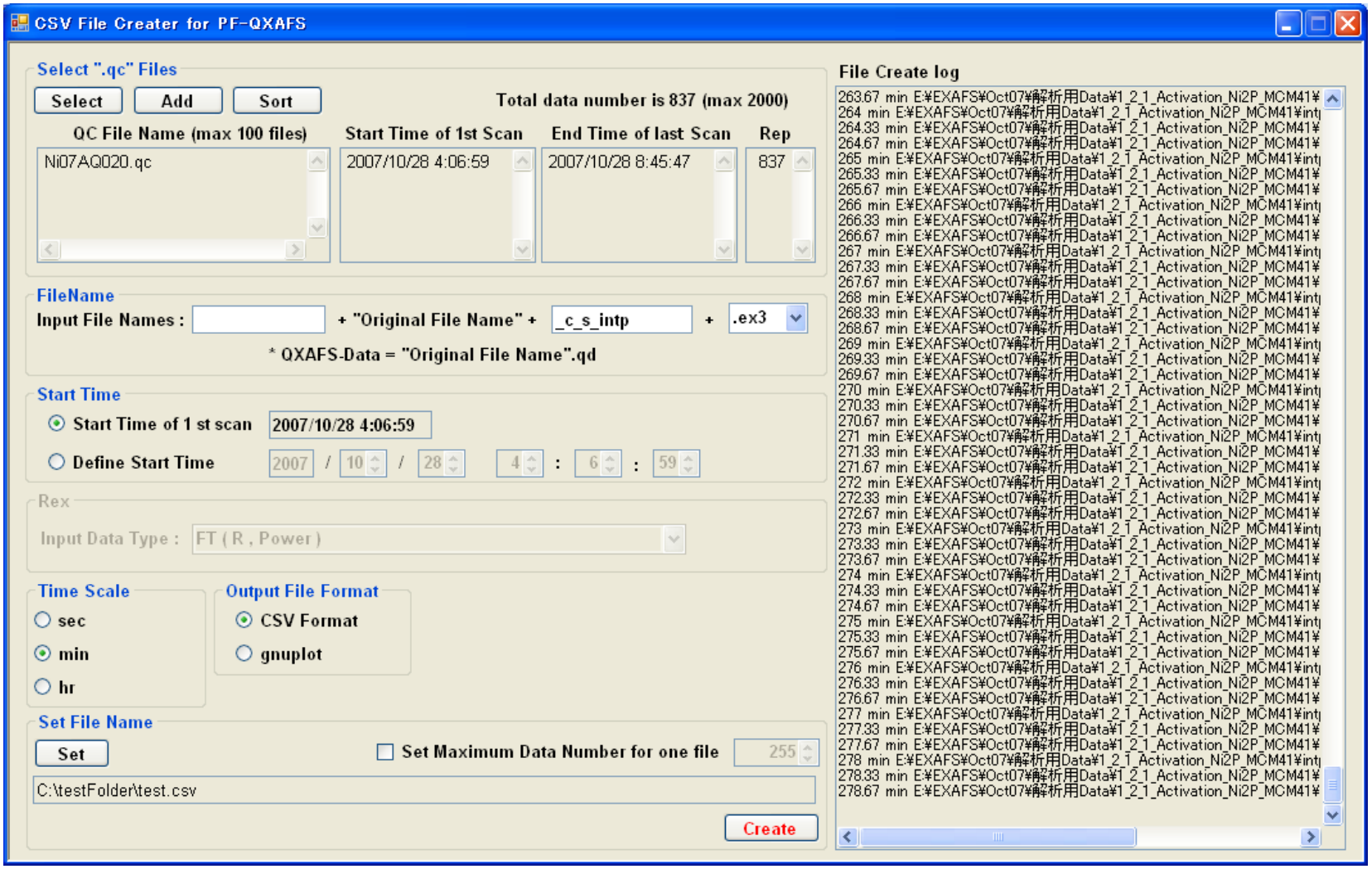
Office 2007以前のExcelでcsv fileを開く場合最大で列数が256列までしか開くことが出来ません。
上図のようにデータ数が837 の場合、一つのcsv fileにまとめてもExcel 2003などでは全てを開くことが出来ないことになります。そのような場合は set Maximum Data Number... のチェックをオンにして値を設定すれば、その値を超えるデータ数がある場合は複数のファイルに分けて保存します。

ファイルを作成する



保存先と読み込むqc fileおよびデータファイル (ex3, mt, rex)を選択すると
“create”のボタンがアクティブになるので、クリックしてファイルを作成する

ファイルを作成終了



ファイルの作成が完了すると、右のウインドウに処理に関するログが表示される