QXAFSデータ処理プログラムの使い方

2008 3.18 小池 祐一郎

はじめに

QXAFSで測定したデータフォーマットは通常のステップスキャンと同じPF形式 (角度、I_0, I)で出力されます。違いはデータ点数です。PFの標準パラメーターを用いたステップスキャンの場合、XANESは301点、EXAFSは481点となっており、通常数百点程度となっています。ステップスキャンの測定では吸収端付近は細かく、そしてEXAFS領域は振動を抽出するために必要な数eV程度の粗さでというように、領域で測定点の細かさを変えて測定しています。そして領域ごとに一点あたりのデータ溜め込み時間(Dwell Time)を必要に応じて調節しています。一方、PFのQXAFS測定では、一点あたりの溜め込み時間(Integration Time)と測定点の細かさを1スペクトルの中で変化させることはできません(2008 3月現在)。そこでQXAFSでは全領域をXANES程度の細かさで測定し、EXAFS領域はステップスキャンに比べ細かく測定したデータを必要に応じてスムージングすることで対応しています。そのためデータ点数が数千点(最大8191 点)となります。EXAFS領域のデータ点数が多いとバックグラウンド (μ_0) が引きにくいことがあります。

そこで、生データ(PF形式)をエネルギーとμt に変換し、そのデータをスムージング処理し、データ点数を間引く(補間する)プログラム “FileConverter” を作成しました。また、QXAFSでは大量の測定ファイルを扱うことが予想されるため、複数のファイルに対して、データ変換、スムージング処理、データ補間のそれぞれの処理を一度に行うプログラム(“MultiFileConverter”, “MultiDataSmoothing”, “MultiEnergyInterpolation”)も作成いたしました。

あわせて時間分解測定のデータ処理用プログラム”CSVFileCreater”も作成いたしました。(詳細は後述)

FileConverterの機能

ファイルを1つ読み込み、ファイル変換、スムージング、エネルギー補間を吸収スペクトルの表示とともに行うプログラム。スムージングはQXAFSのデータ整理でXANES領域とEXAFS領域でスムージングの度合いを変化させられるようにエネルギー範囲を指定し、その範囲ごとにスムージングの条件を変化させられるようにした。スムージングは隣接平均とSavitzky-Golay (S-G) 法の二種類を用意した。エネルギー補間は基本的には前後5点を用いたNewton法。補間に用いるエネルギーステップはファイルを読み込むかプログラム上で設定する。

<u>機能</u>

- Angle,I0,I (PF Format) → Energy, μt (Rex format, mt file)への 変換
- データスムージング (領域で区切ってスムージング条件の変更が可能)
- エネルギー補間

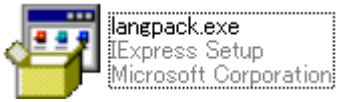
プログラムの起動

実行ファイル “FileConverter2.exe” をダブルクリックして下さい。
なお、プログラムはVisual Basic 2005で作成しているので、プログラムの起動のためにはMicrosoft .NET Frameworkのインストールが必要です。インストールされていない場合はプログラム起動時にエラーがでます。

ダブルクリックで起動

.NET Frameworkのインストールはマイクロソフトのホームページかzip file内に実行ファイルと合わせて入っているインストーラを起動してください。
(すでに.NET Frameworkがインストールされている場合は不要です)

.NET Framework2.0 インストーラー



.NET Framework2.0日本語パック

それぞれのFile形式とファイル入出力

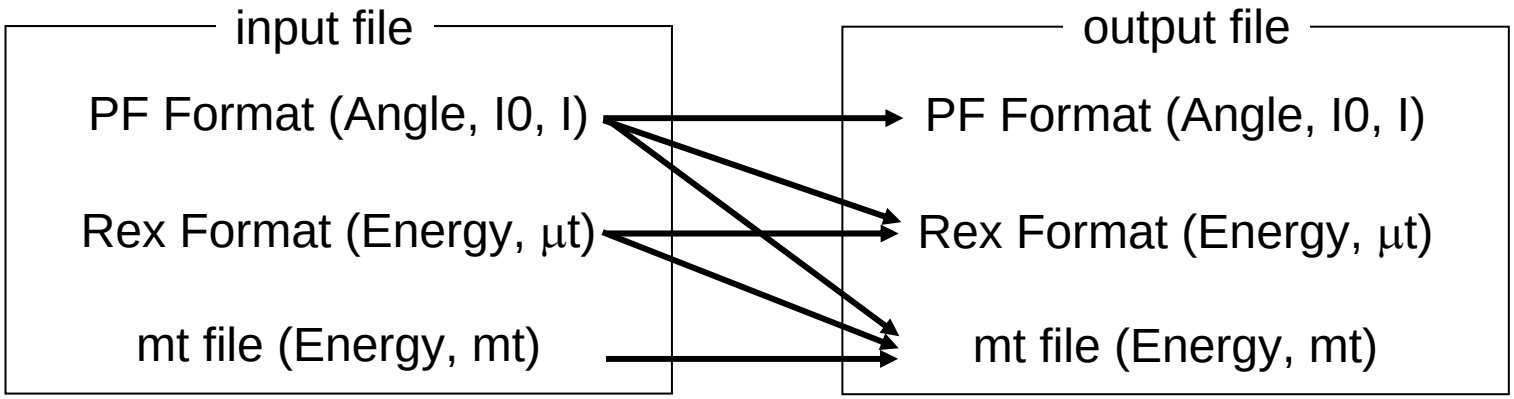
PF Format (拡張子は .qd) : 測定をすると作成されるファイル (I0, I *vs* Angle)
ステップスキャンと同じフォーマット

Rex Format (拡張子は .ex3) : Rexで読み込むことのできる形式 (μt *vs* Energy)

mt file (拡張子は .mt) : ヘッダが何もない Energy, μt の2列のデータ

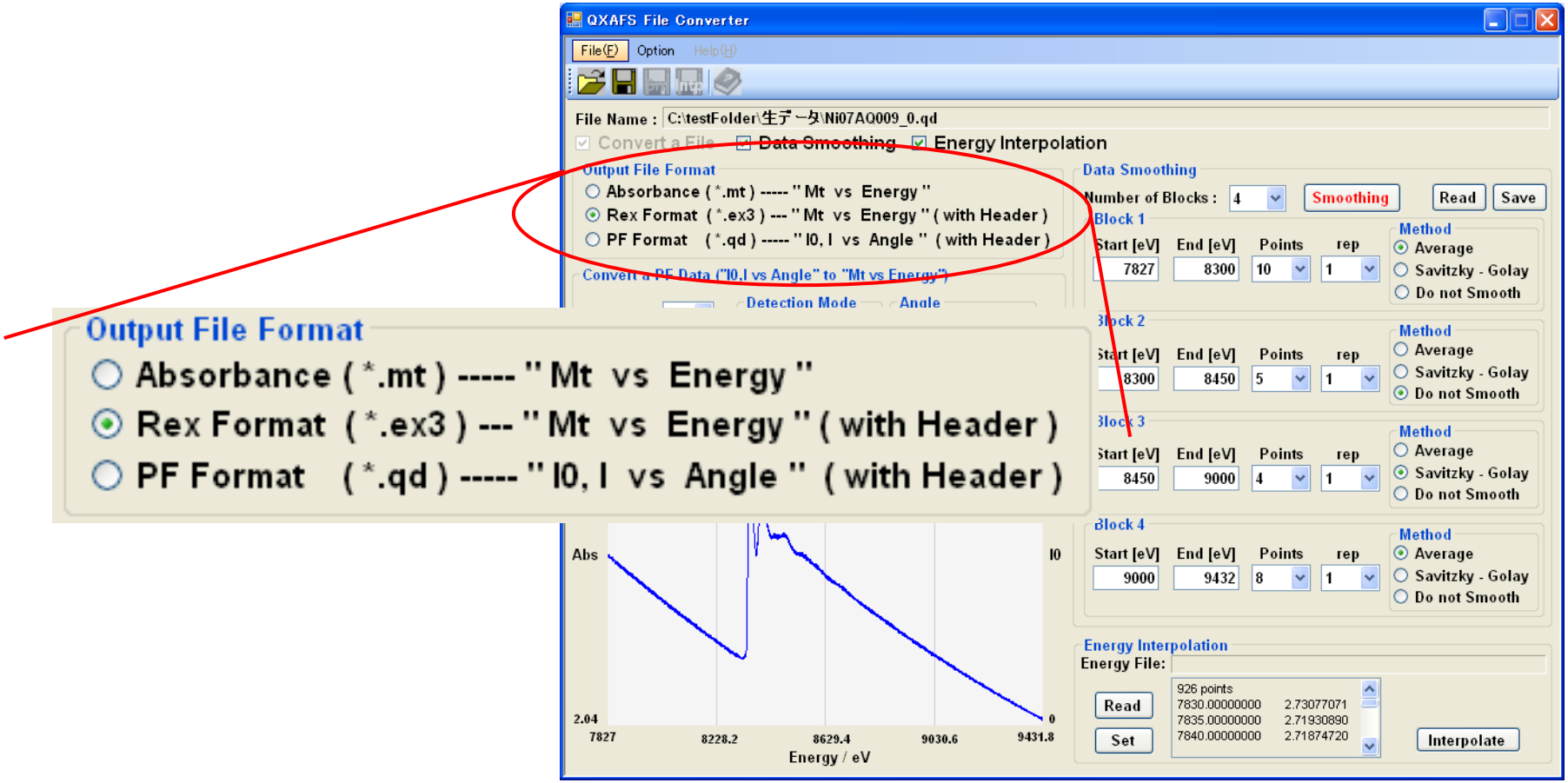
＊ PF Formatの拡張子(.qd)はQXAFSの場合です)
本プログラムはステップスキャンのデータも読み込むことは可能です

ファイルの入出力の関係



＊ mt fileを読み込んだ場合はmt fileのみ出力可能

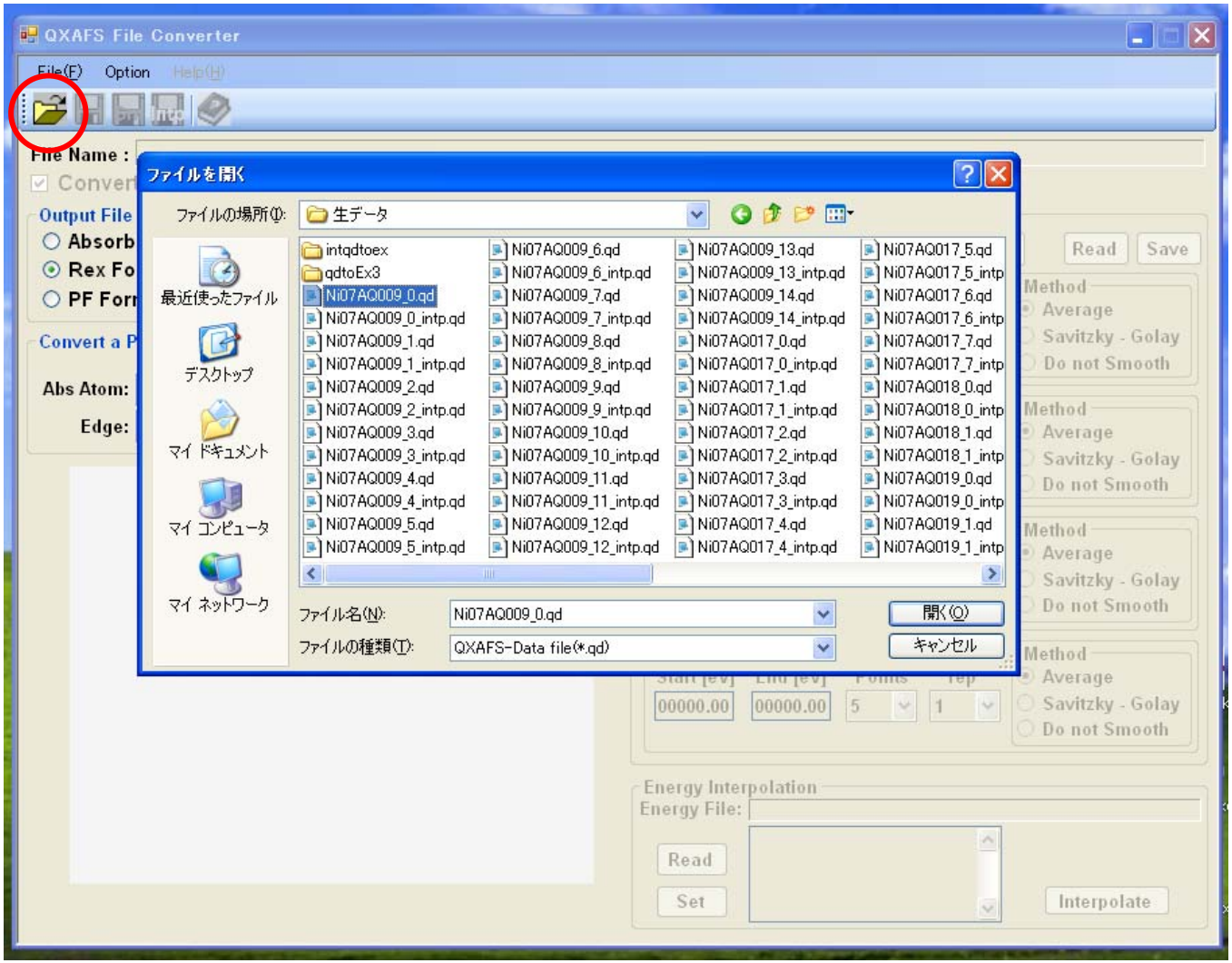
保存するファイル形式



保存するファイル形式は左上の選択により切り替えることができます

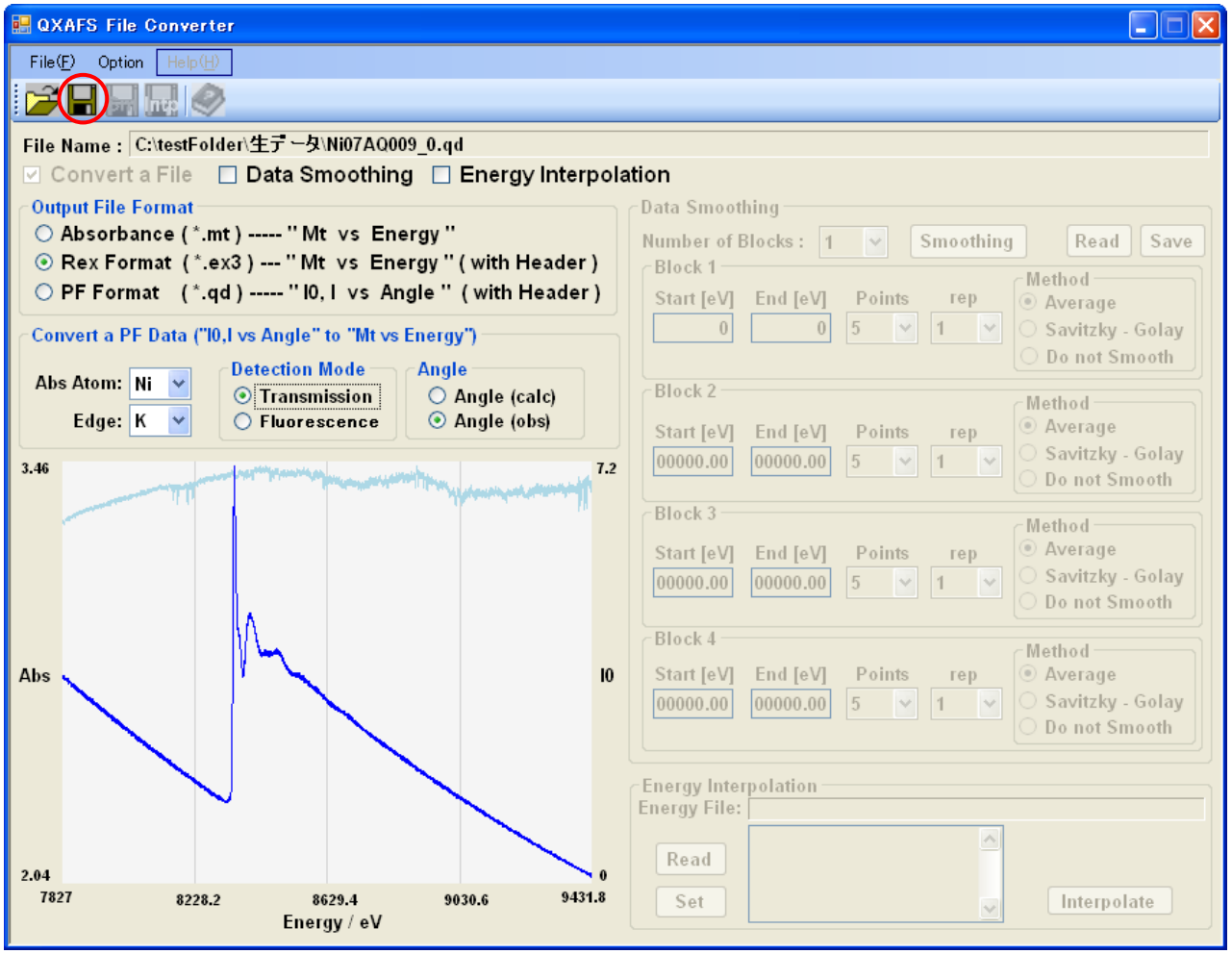
ファイルの読み込み

一番左のアイコンをクリックして開くファイルを選択します。
読み込むことのできるファイルはPF形式(角度 vs I_0, I), ex3 file(エネルギー vs μt), mt file(エネルギー vs mt)です。
どのファイルを読み込んだかはプログラムが拡張子で判断します。
PFのQXAFSデータは ".qd"という拡張子がついています。
ステップスキャンのデータを読み込む場合はファイルの種類をall fileにして下さい。



変換ファイルの保存

読み込んだデータが表示されます。PF形式のデータを読み込んだ場合はI0 とμtが、mt file, ex3 fileの場合はμtのみが表示されます。読み込んだファイルと選択している出力フォーマットによっては左から2番目の保存のアイコンがアクティブになります。このアイコンでPF形式からex3 file, mt fileへとex3 file から mt fileへ変換したファイルの保存をすることができます。

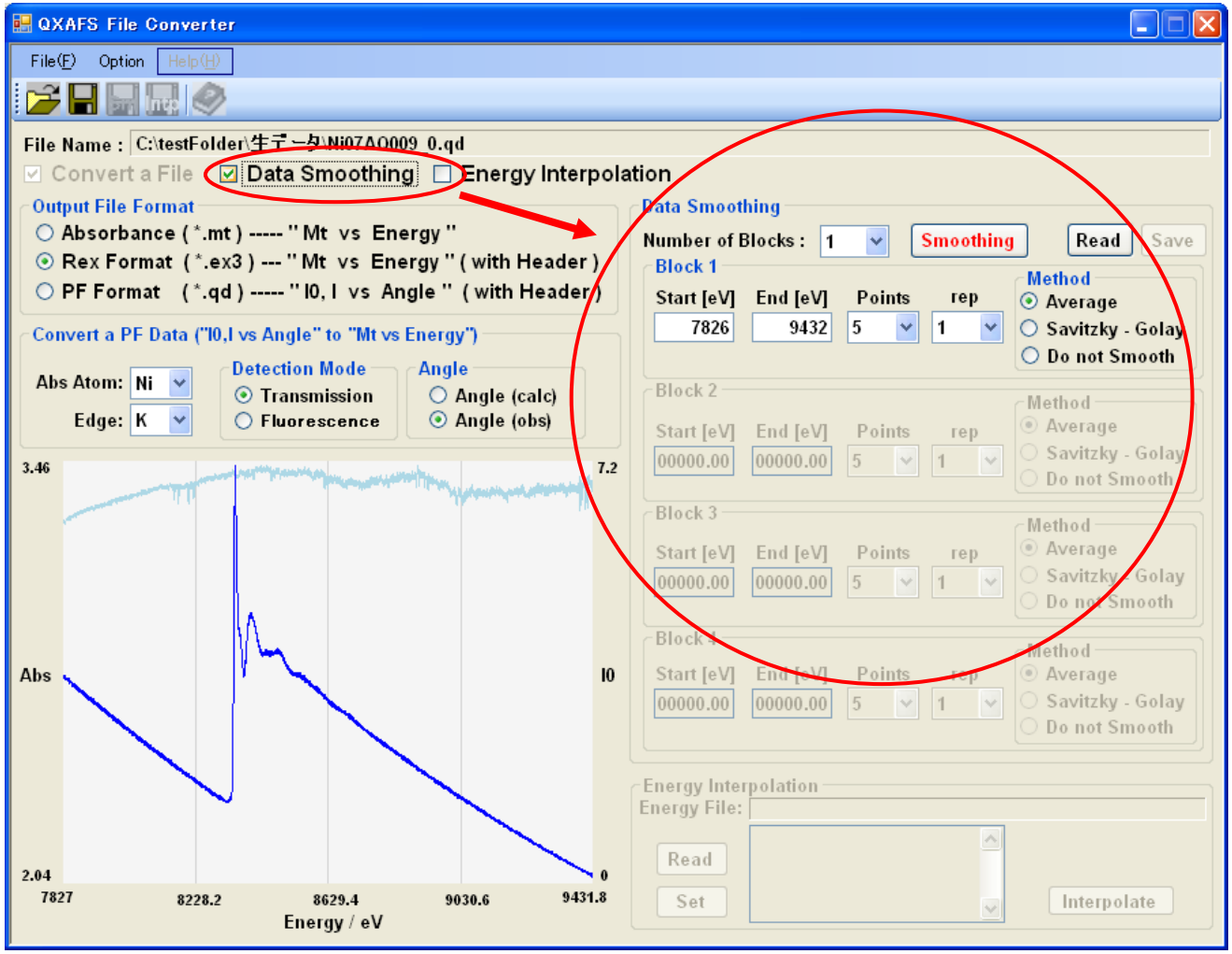


* また、角度→エネルギーの変換は $\theta = \sin^{-1}\left(\frac{定数}{2dE}\right)$ に基づいて計算しており、

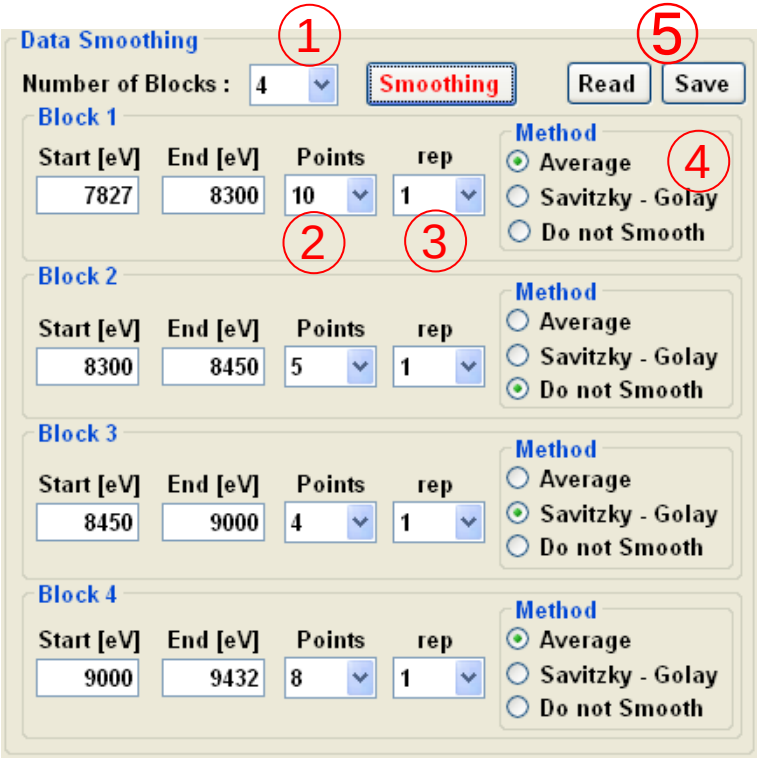
デフォルトでは定数 = 12398.52 を使用していますがOptionでRexで用いている値 12398.1に変更可能となっています。

スムージング処理 1

“Data Smoothing”のチェックボックスをオンにするとスムージングのブロックがアクティブになります。
スムージング処理の詳細は次に述べます。



スムージング処理 2



1. <u>スムージング処理のブロックわけを行う</u>

全領域を同じ条件でスムージングするときは1となる。
吸収端前、XANES付近、EXAFS領域などでスムージング条件を変化させる場合は最大4ブロックまで設定可能である。

2. <u>スムージング点数 : Points</u>

ある点のスムージングを行うときにもちいる片側のデータ点数を入力
例えば n pointsとした場合はその点を中心に2n+1のデータ点数でスムージング処理を行う。

3. <u>スムージング処理の繰り返し回数 : rep</u>

スムージング処理を繰り返す回数を設定する。例えばrep=2とすると、生データをスムージング処理したデータにたいしてさらにもう一回スムージング処理をすることになる。

4. <u>スムージング方法の選択</u>

スムージング処理の方法を選択する。
隣接平均 (Average)は各点の両側n点、つまり合計 2n+1点の平均がその点の値となる。重みは全く掛かっていない。
S-G法は実際には重みつき平均を求めているだけだが、その重み係数が丁度選択した点数の領域(2n+1)に対し多項式回帰をおこなって値を求めたことに相当するようになっている。(A.Savitzky and M.J.E. Golay, Analytical Chemistry 36(1964)1627-1639)
“Do not Smooth”を選択すればその領域はスムージングをかけない。EXAFSのためにスムージングをかけたいが、XANES領域はスペクトルがなまらないようにスムージング処理をしたくない場合などに使用できる。
* S-G法は隣接平均に比べスペクトルがなまりにくいが逆にノイズが大きい場合はノイズが消えにくい傾向にある。

5. <u>スムージング条件の保存と読み出し</u>

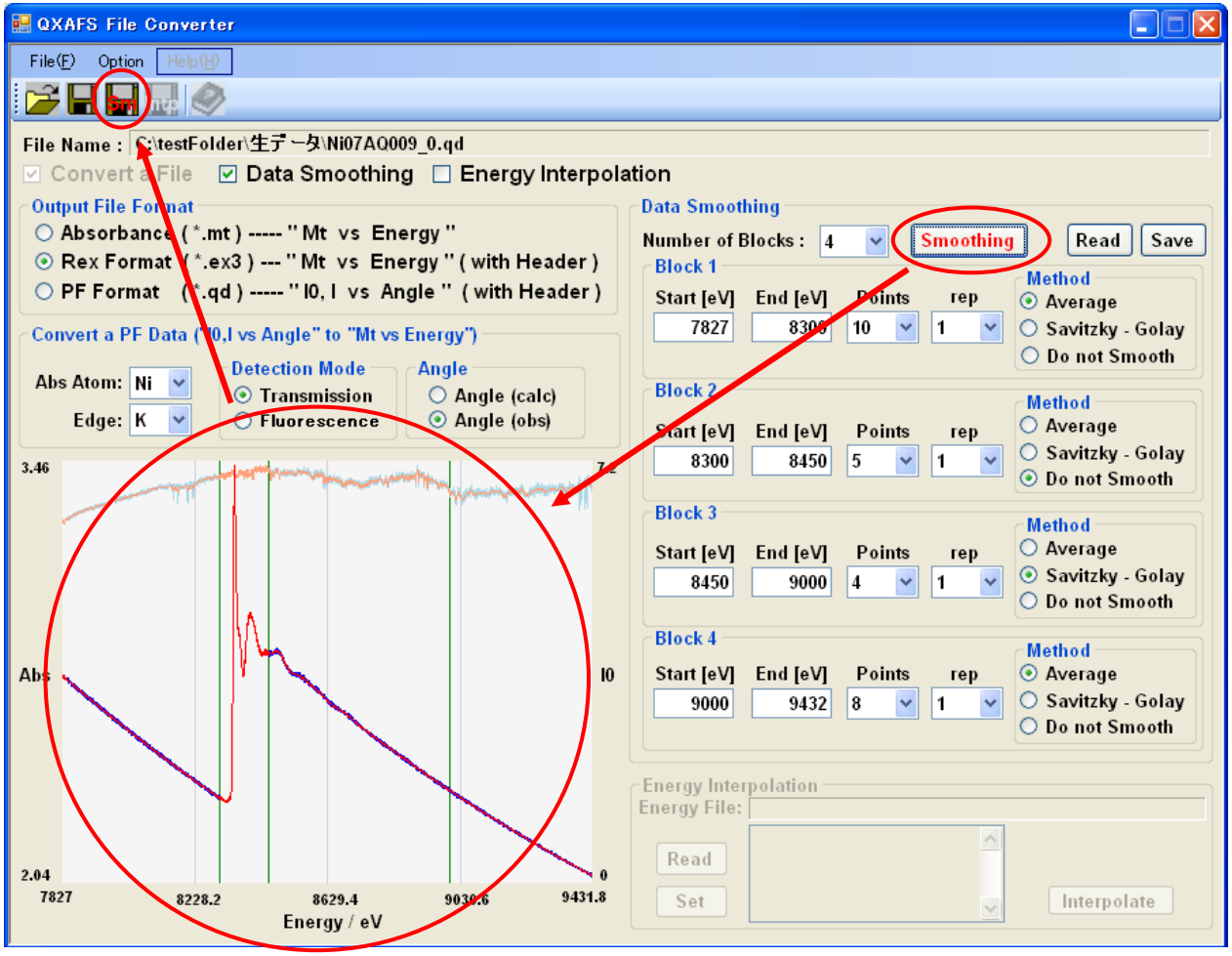
スムージング条件は” save “ ボタンをクリックして .sm という拡張子のファイルで保存することができ、” read”からこのファイルをよみこむことができる

☆ 複数のブロックでのスムージング処理に関して

複数にブロックわけをしてのスムージング処理の場合、各ブロックの設定した領域のみでスムージング計算を行っているのではない。
実際には各ブロックの設定条件でスペクトルの全領域をスムージング処理したあと、設定したエネルギー範囲のデータを各ブロックから切り出してつなぎ合わせている。そのため吸収端の途中で極端にスムージング条件を変化させるとスペクトルにガタが生じるが、それはプログラムに問題があるのではなく、設定したスムージング条件が適切でなく、スペクトルが大きくなまってしまっているからと考えられる。

スムージング処理 3

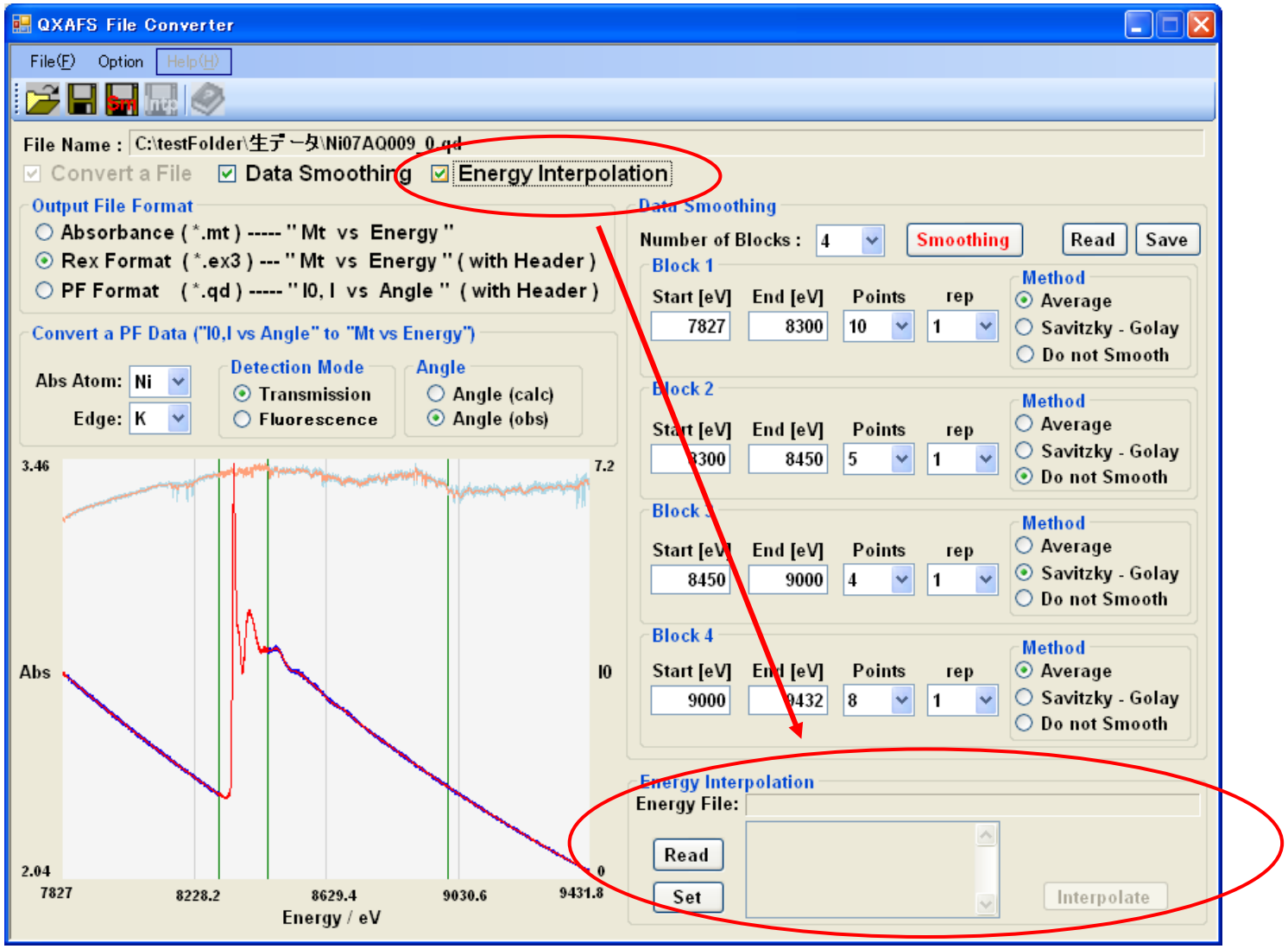
条件設定後 “Smoothing”のボタンを押すとスムージング処理が行われ、設定条件で処理を行った結果のスペクトルが赤線 (I_0はオレンジ)で表示されます。合わせてスムージング処理を複数のブロックに分けて行った場合はその境界が示されます。同時に左から3番目の赤い字で ”Sm” と書かれた保存のアイコンがアクティブになります。このアイコンをクリックするとスムージング処理を行ったデータを保存することが出来ます。



☆ PF形式で保存する場合のデータは処理前のI_0, I から計算したμt と I_0をスムージング処理し、スムージング処理したμt_smoothとI_0_smoothからI_smoothを計算しなおしてI_0_smoothとI_smoothを保存しています。

エネルギー補間 1

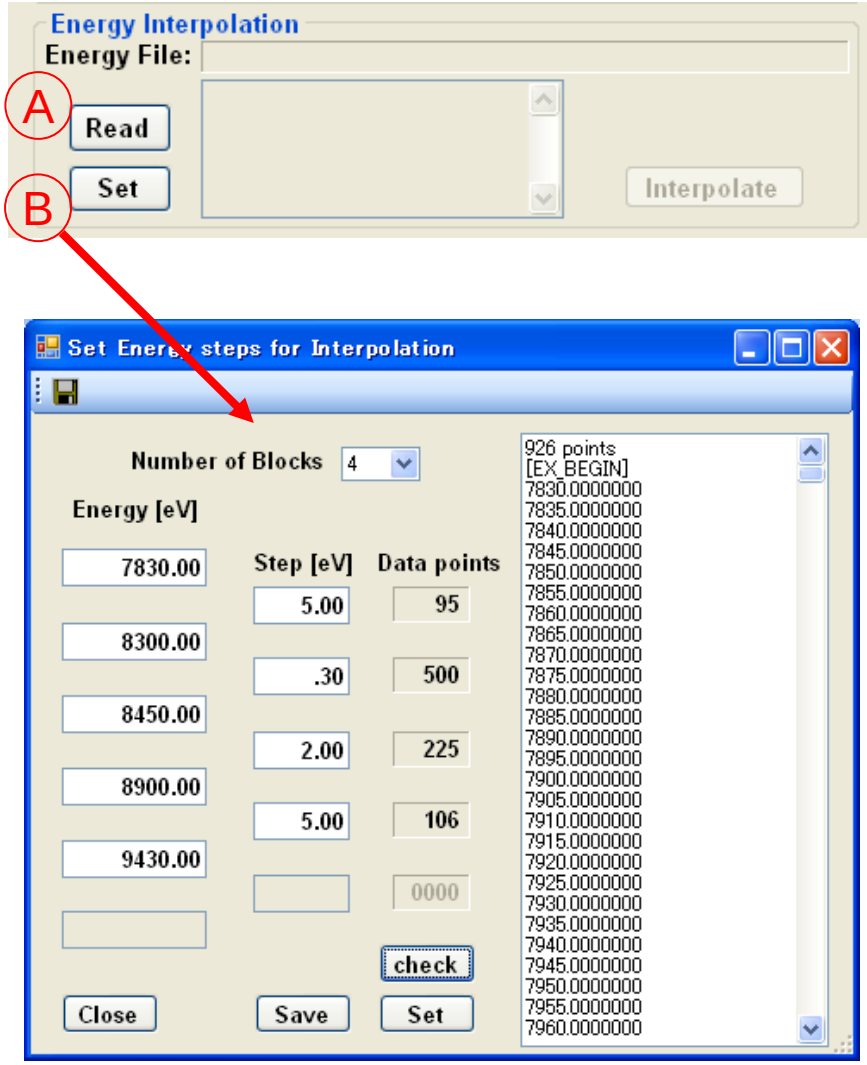
“Energy Interpolation”のチェックボックスをオンにするとエネルギー補間のブロックがアクティブになります。
この時、”Data Smoothing”のチェックボックスがオンになっており、スムージングを行った後の場合は スムージング処理を行ったデータに対して補間を行うことになります。もちろんスムージングを行わずに補間を行うことも可能です。



エネルギー補間 2

補間により新しく作成するデータのエネルギーを決定します。

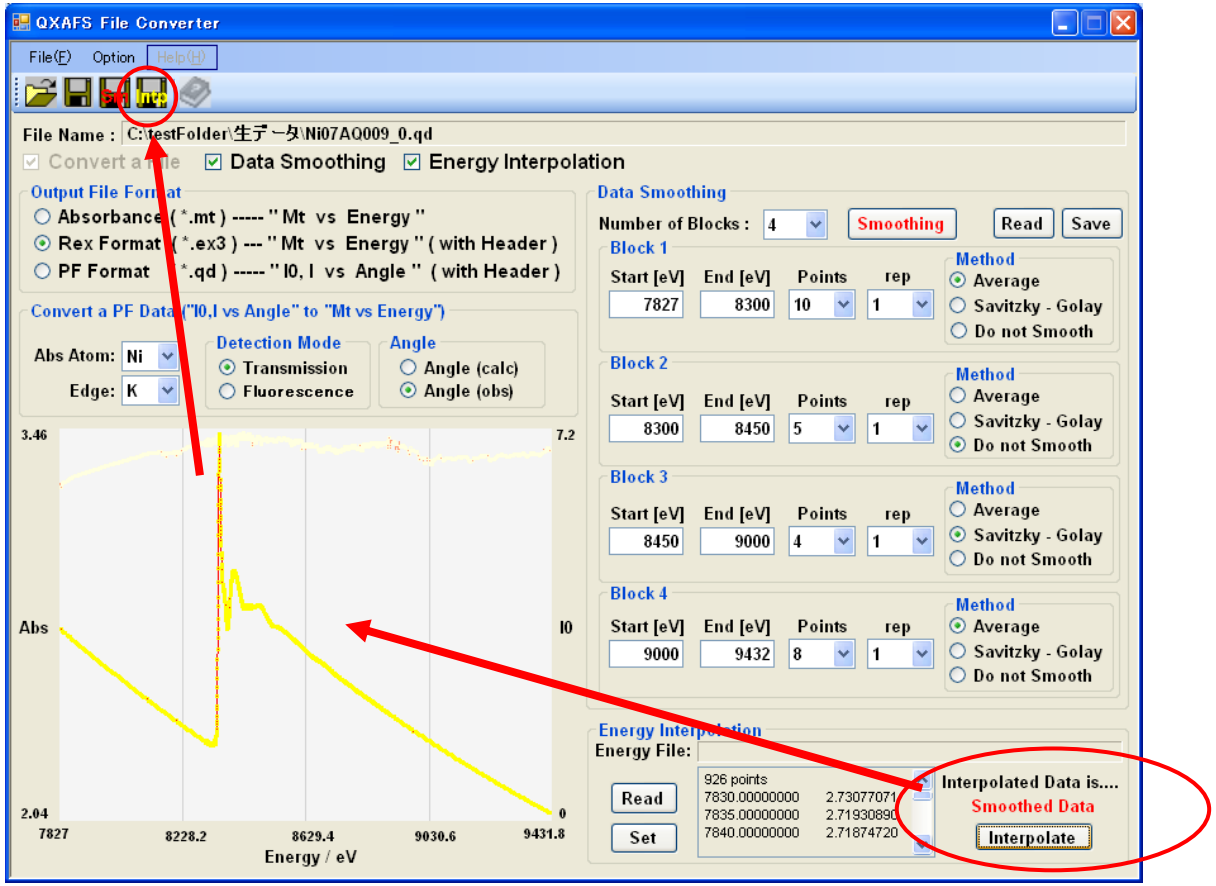
A： ”Read”ボタンをクリックしてファイルを読み込みます。読み込むファイルは 実際のデータファイルであるex3 file, mt fileか後述の”set”ボタンをクリックしたときに作成する ”.intp”という拡張子のエネルギー軸を保存したファイルとなります。



B： ”Set”ボタンをクリックして補間に用いるエネルギー軸を作成します。ブロック数、各ブロックの範囲とステップを設定後 “check”を押すと右側に設定したエネルギー軸が表示されます。ここで ”save”ボタンによりこのエネルギー軸を .intpという拡張子のファイルで保存することができます。このファイルは今後 Aの”read”から読み込むことが出来ます。”Set”ボタンをクリックすると設定したエネルギー軸が補間により作成する軸として設定されます。

エネルギー補間 3

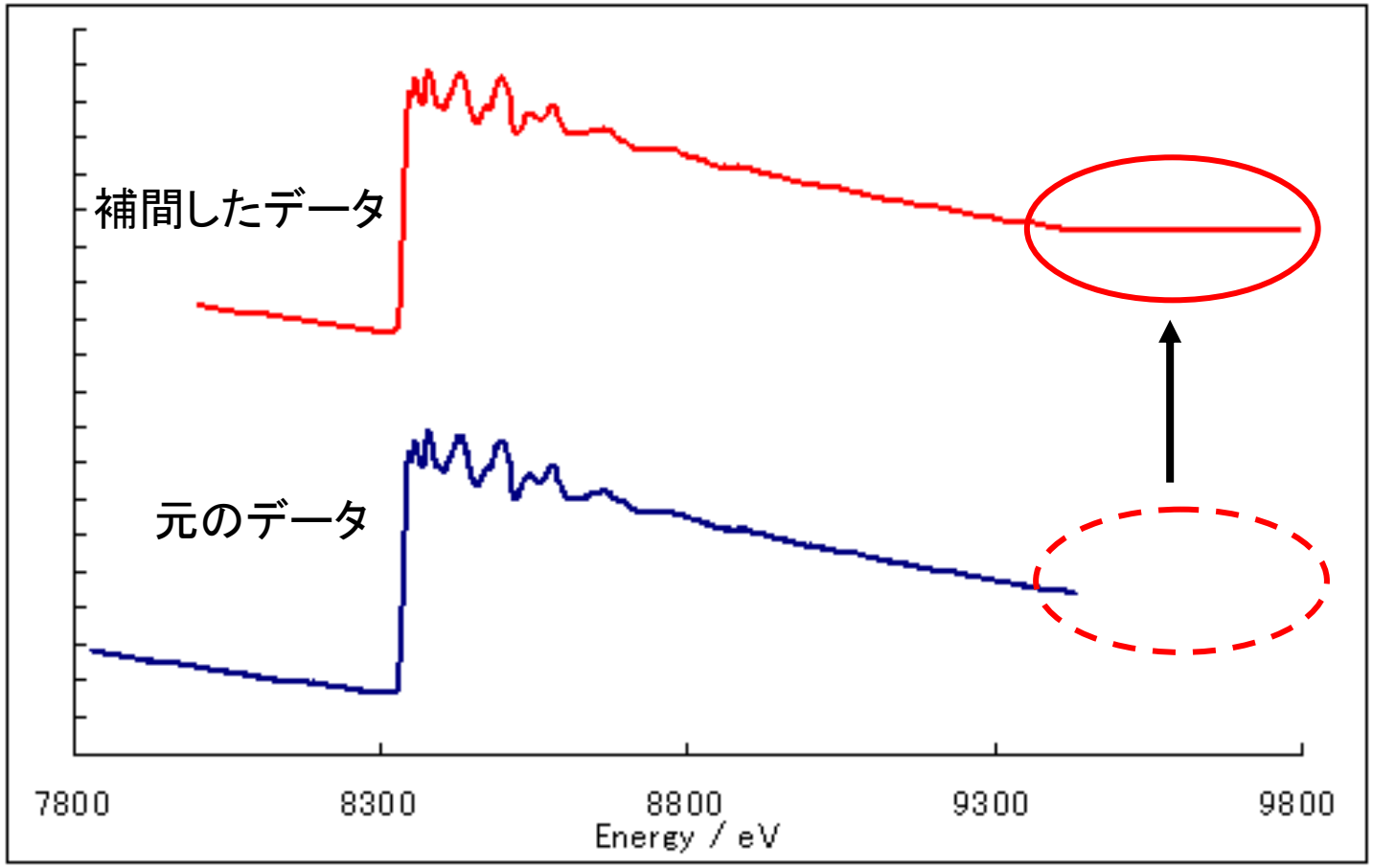
“Read” , “Set”から補間して作成するデータのエネルギー軸を 設定後、“Interpolate”のボタンをクリックすると補間を行い、補間によって作成したデータが黄色の散布図として表示されます。この時補間の元のデータがスムージング処理を行ったデータかスムージング処理を行う前のデータかが “Interpolate” ボタンの上に表示されます。もしもスムージング処理後にスムージング処理を行う前のデータに対して補間を行いたいときは ”Data Smooting”のチェックボックスをオフにしてから補間を行ってください。補間を行うと左から4番目の黄色い字で “Intp”と書かれた保存のアイコンがアクティブになります。このアイコンをクリックすると補完を行ったデータを保存することが出来ます。



☆ スムージングの場合と同様にPF形式で保存する場合のデータは処理前のI_0, I から計算したμtとI_0を補間し、補間したμt_interpolationとI_0_interpolationからI_interpolationを計算しなおして、補間に用いたエネルギーを角度に変換して保存しています。

エネルギー補間 4

☆ 補間用に設定したエネルギーが元のデータから外れている場合は端のデータが入ります



一括処理プログラム

QXAFSでは大量のデータファイルが出力されることがあります。これらのデータの処理をまとめて行うプログラムを作成しました。基本的には FileConverterのそれぞれの処理を複数のファイルに対しておこなう物となっています。

file 変換 : PF 形式 → ex3 file, mt file ・・・・・・・ MultiFileConverter

スムージング処理 ・・・・・・・・ MultiDataSmoothing

エネルギー補間、ステップ補正 ・・・・・・・・ MultiEnergyInterpolation

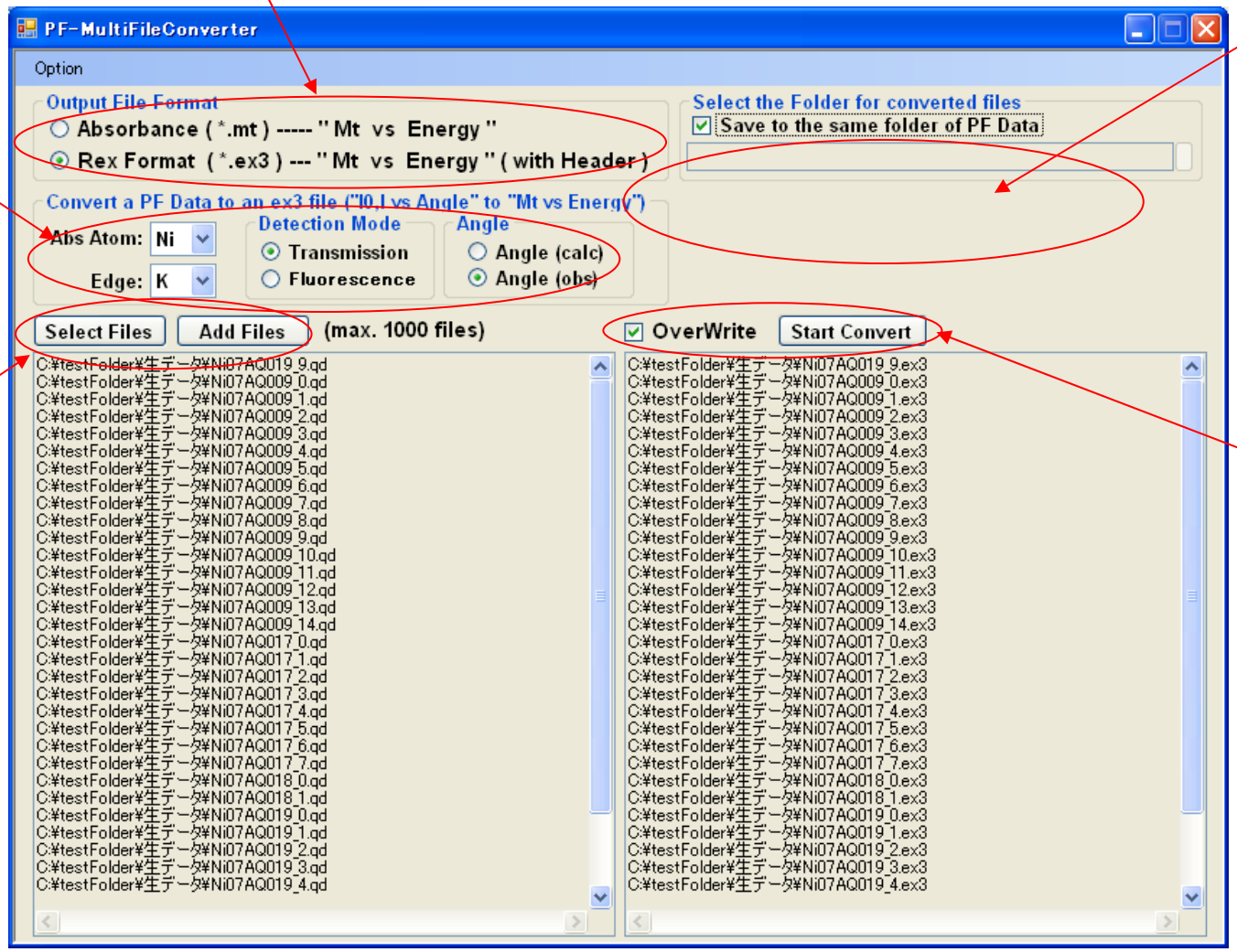
一括データ変換プログラム “MultiFileConverter”

PF形式の生データ(角度 vs I0, I)を ex3 file or mt file(エネルギー vs μt)に変換する作業をまとめて行うプログラムです。(FileConverterと同じです)

出力形式の選択

変換したファイルの保存先の選択
変換前のデータと違うフォルダに保存するときはチェックをはずして保存先を選ぶ

file作成に必要な条件設定



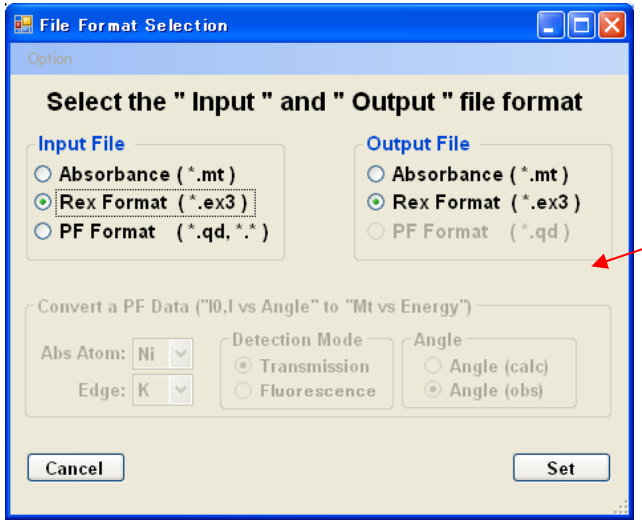
変換する
ファイルの選択

上書き保存をする場合はチェックをして変換開始

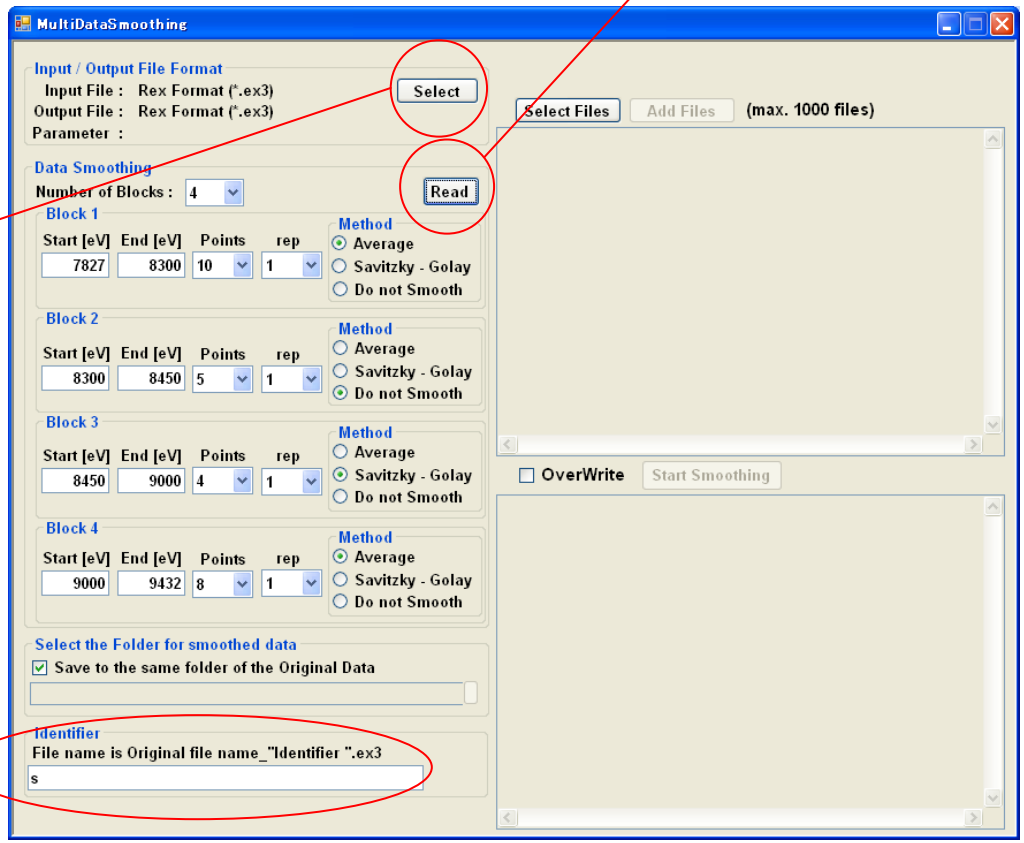
一括データスムージングプログラム “MultiDataSmoothing”

ex3 ファイルを読み込んで設定した条件でスムージング処理を行うプログラムです。
スムージング処理に関してはFileConverterの説明を参照してください。
FileConverterで適切なスムージング条件を決定してから同じ条件で測定したファイルをまとめてこのプログラムを使用して処理する時に使用して下さい。

スムージング条件ファイル .smの読み込み



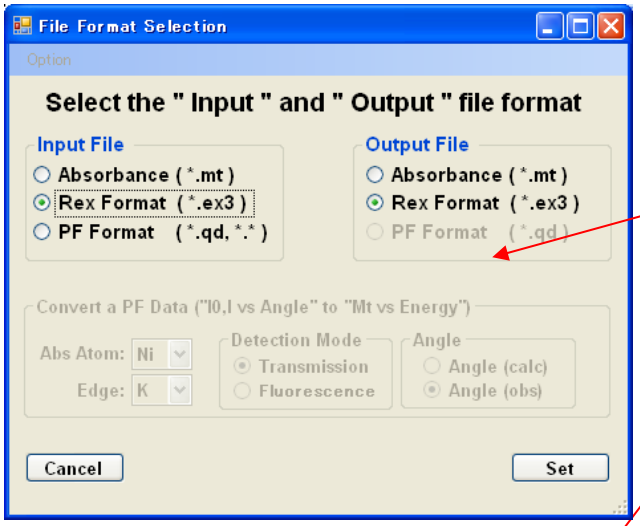
入出力ファイル形式の選択
(プログラム起動時にも立ち上がる)



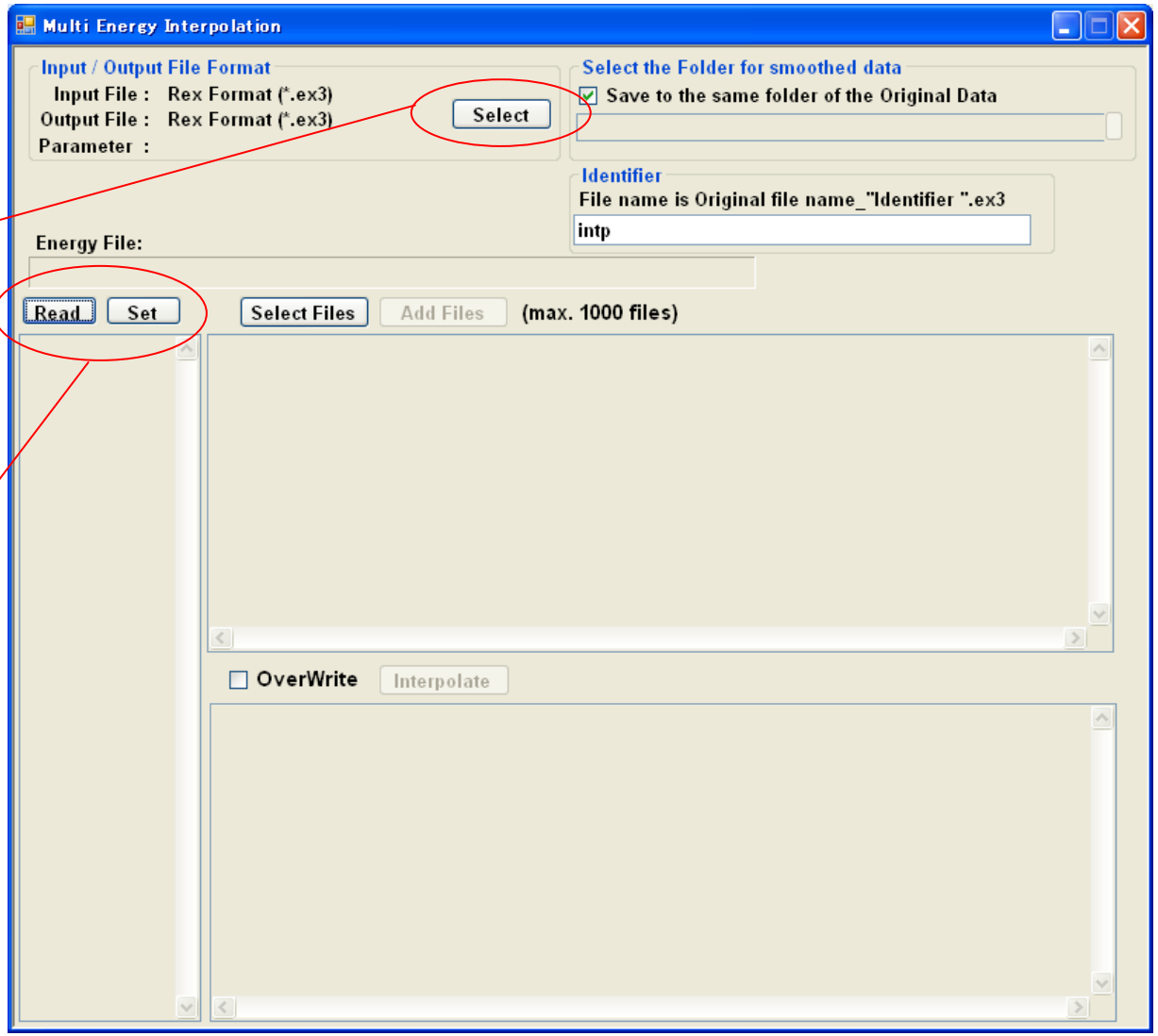
スムージング処理を行ったファイルを保存するときに付ける識別子の設定。
保存されるファイル名は元のファイル名 + “_識別子”.ex3 となります。デフォルトは”s”となっています

一括データ補間プログラム “MultiEnergyInterpolation”

FileConverterの補間処理を複数のファイルに対してまとめて行うプログラムです。
詳細はFileConverterの説明を参照して下さい。



入出力ファイル形式の選択
(プログラム起動時にも立ち上がる)



補間軸の読み込み、設定