

2dXafsView

Introduction to
2D XAFS Data Viewing and Analyzing program Ver. 1
Manual version 1.0

名古屋大学シンクロトロン光研究センター
田渕雅夫

2025/5/15 初稿編集開始

目次

1 はじめに	1
2 2dXafsView の概要	2
3 メインウインドウ	4
3.1 データ読み込み部	4
3.1.1 I1 データ読み込み	5
3.1.2 I0 データ読み込み	9
3.1.3 ダークデータ読み込み	9
3.1.4 蛍光型の読み込み	10
3.2 画像表示部	10
3.2.1 表示される像の選択	10
3.2.2 積分範囲	11
3.2.3 マウス操作	11
3.2.4 選択範囲を最大表示	12
3.2.5 表示位置、大きさのリセット	13
3.2.6 表示色(明るさ)スケールの設定	14
3.3 表示選択部	14
3.3.1 画像表示部に表示するものの選択	15
3.3.2 メインウインドウ以外のウインドウ表示	15
3.4 候補元素選択部	15
3.5 情報表示部	16
3.5.1 積分範囲と分析刻み	17
3.5.2 着目点の記録と再生	18
3.6 データ保存部	20
3.6.1 画像/データ保存	20
3.6.2 データ保存	22
3.7 スペクトル表示ウインドウ(メインウインドウ附属/解析ウインドウ付属)	22
3.7.1 スペクトル表示ウインドウの機能(共通)	22
4 解析ウインドウ	23
5 較正ウインドウ	23
6 統計表示ウインドウ	23
7 画像解析ウインドウ	23
8 バッチ処理	23

目 次	ii
9 設定ファイル	23
10 他のソフトウェアとの連携	23
10.0.1 STARS 経由での連携	23
10.0.2 直接の TCP/IP コネクションでの連携	23
11 不具合等	23
11.1 不具合	23

1 はじめに

面内に構造を持った試料や何らかの不均質があると予想される試料があると、その試料について面内の場所ごとの状態の違いを知りたいという需要があります。この様な場合、古くは集光された光を用いて試料位置スキャンを行うことで実現されてきました。近年では、高速読み出しが可能で感度が高い2次元検出器が比較的手軽に利用できるようになってきたことから、逆に広がった光を用い、2次元検出器と組み合わせることで2D-XAFS (two-dimensional X-ray absorption fine structure) 測定が行われるようになっています。

あいち SRでも、イメージングビームラインBL8S2で、エネルギーを変えた撮像を行うことで2D-XAFS測定を行えます。また、硬X線XAFSビームラインBL11S2においても、分光器下流に設置された集光ミラーを平面ミラーと交換可能にすることと、6.5μm画素のカメラを導入することで、硬X線領域の2D-XAFS測定を可能にするビームライン整備が行われました。

この様に、測定側の環境が整い2D-XAFS測定が実施できるようになってきた一方で、その解析について考えると、2D-XAFS測定で得られるデータは測定エネルギー1点分の多量の2次元画像で、それを解析して特定の点のXAFSスペクトルを得るのは、単にデータの取り扱だけを考えても、通常のXAFS測定に比べると難易度が上がっています。さらに、各点のスペクトルを自在に得ることや、それを解析すること、解析結果の場所による変化を2次元のマップとして示すことなど、色々な作業をシームレスにストレス無く行うことができないと2D測定の恩恵を十分に得ることは難しいと考えると、それを実現する難易度は更に上がります。

この様な要求を完全に満たすことは容易ではありませんが、少なくとも、測定を行ったその場でその結果を簡単に確認し、2次元の各点でのXAFSスペクトルを見ることやきちんと解析した時にどの様な結果が得られそうかをおおよそ確認することを最低限の目標とし2次元のXAFS測定結果のビューアとして2dXafsViewの開発を行いました。その後、今まで使い勝手に関する利用者の方々の声や、要望のあった各種解析法を可能な限り取り入れて実現するよう継続的に開発を進めています。

この様に2dXafsViewの開発は継続中です。このため、本マニュアルは、現時点でのスナップショットについての解説になってしまいますが、それでも現時点で2dXafsViewで何ができるかを示し、すでに十分複雑になっている2dXafsViewの操作法を知ってもらう助けになればと考えています。

参考: 本マニュアルを作成するに際して、画面のスクリーンショットを撮ったり、動作確認をしたりするのに使ったのは2025年6月時点の2dXafsViewです。

2 2dXafsView の概要

2dXafsView は

- XAFS のエネルギー点に対応して撮影された 2 次元画像データを読み込み、任意のエネルギー点の画像を表示すること
- 表示されている画像内で指定された任意の点の XAFS スペクトルを表示すること / 保存すること
- その際、面内で存在し得るエネルギーシフトを補正すること
- 各点でのスペクトルを幾つかの手法で解析し、その結果得られる数値(エネルギーシフトや組成等)で作成したマップを撮影された画像と重ねる形で表示すること
- こうした結果を、画像、もしくはデータとして保存すること

などを行うためのツールとして作成されました。

図1に、2dXafsView のメインウインドウに重ねて、解析ウインドウ、解析スペクトル表示ウインドウが表示されている様子を示します。

この様に 2dXafsView では、幾つかの機能や表示内容を幾つかのウインドウに振り分けます。この後、順に説明しますが、2dXafsView は次のような、何かの役割を持つ大小 7 つのウインドウを持っています(ファイル読み込みの際のダイアログウインドウ等は除く)。

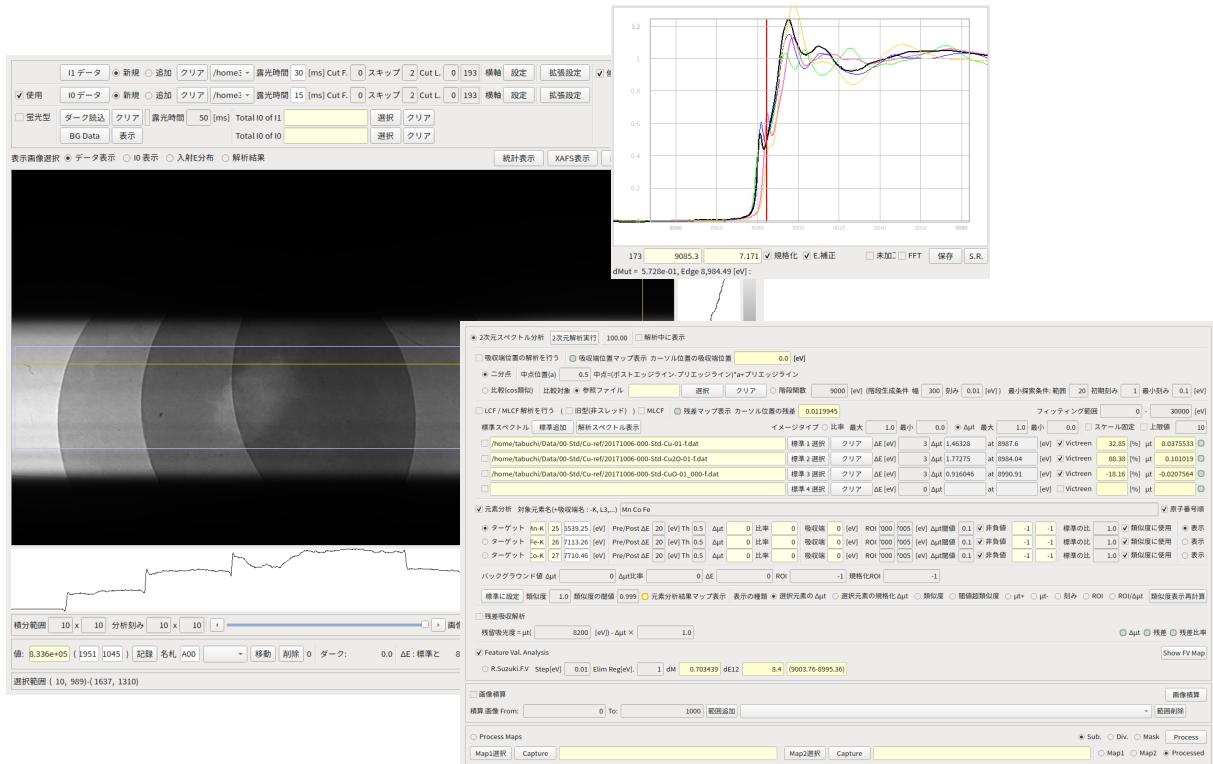


図 1: 2dXafsView の概観

- メインウインドウ: 起動時に表示される。データの読み込みや2次元像の表示、特定の点の選択等を行います。
- 解析ウインドウ: 各種の解析操作を行います。
- 較正ウインドウ: 2次元の面内各点でのエネルギーシフトの値を決め補正します。
- 統計ウインドウ
- 画像処理ウインドウ
- XAFS スペクトル表示ウインドウ (メインウインドウ附属)
- 解析スペクトル表示ウインドウ (解析ウインドウ附属)

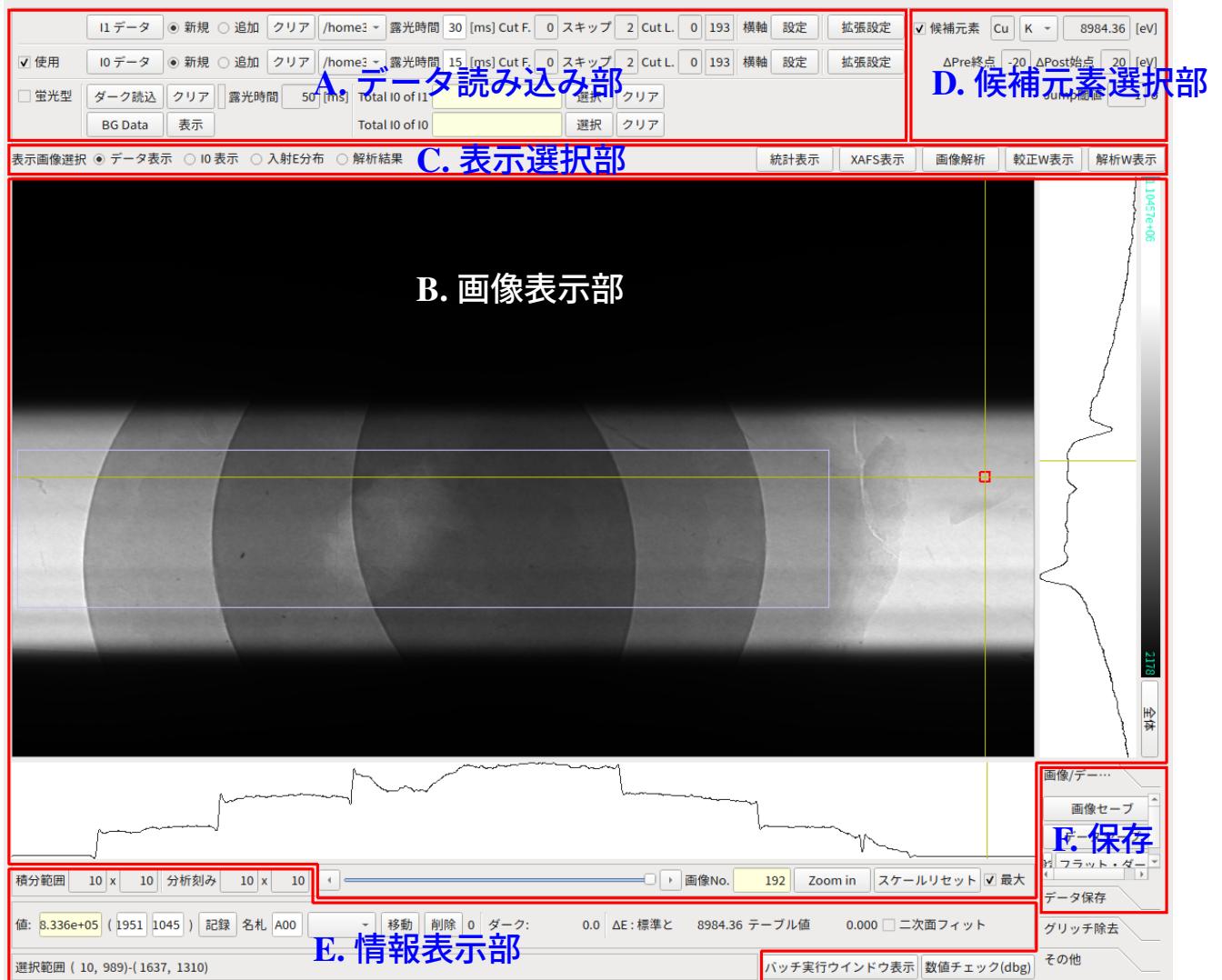


図 2: メインウインドウの全景とそのブロック分け

3 メインウインドウ

2dXafsView を起動すると 図 2 の様な メインウインドウが現れます。ここでは、メインウインドウを 図 2 の赤枠で示したような幾つかのブロックに分けて説明していきます。

3.1 データ読み込み部

図 3 にデータ読み込み部を拡大して示します。ここには測定されたデータファイルの読み込みに関する操作が集中しています。図中で番号を付けた各要素を簡単に説明すると次のようにになります。

1. 「I1 データ」 読込。ファイル選択ウインドウが開きます。複数選択可能。
2. 「I1 データ」 読込時、既読のファイルを消して新規に読み込むことを選択。

3. メインウインドウ

5

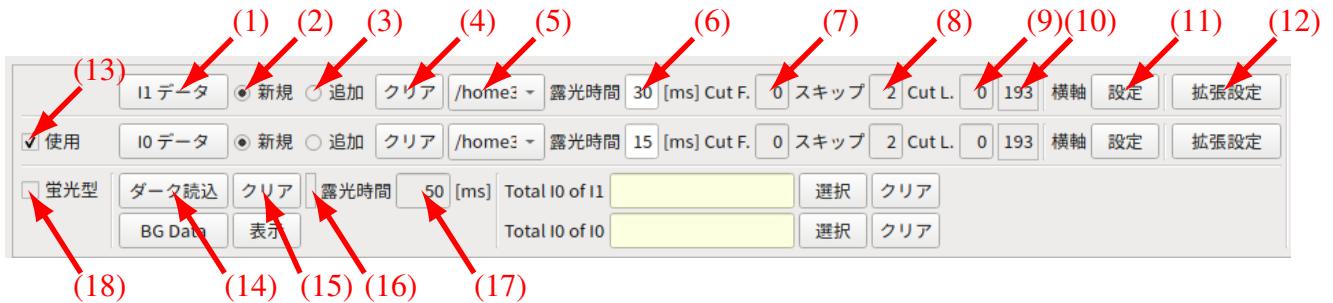


図 3: データ読み込み部

3. 「I1 データ」 読込時、既読のファイルを残して追加で読み込むことを選択。
4. 「I1 データ」 の既読のファイルを消して、何も読み込んでいない状態に戻す。
5. ファイルリスト。「I1 データ」 の既読ファイルを読み込んだ順に表示。
6. 「I1 データ」 ファイルから「露光時間」 が取得できた場合、それを表示。
複数選択されたファイルの露光時間が異なる場合、先頭のファイルの露光時間を表示。
7. 「I1 データ」 読込制限。先頭の何本のファイルを読まない (Cut First する) かの指定。
8. 「I1 データ」 読込制限。ファイルを何本おきに読むかの指定 (1: 全て、2: 一本おき...)。
9. 「I1 データ」 読込制限。末尾の何本のファイルを読まない (Cut Last する) かの指定。
10. 「I1 データ」として実際に読み込まれたファイルの数の表示。
11. 「I1 データ」 読込時、撮影したエネルギーの指定方法を決めるウインドウが開く。
12. 「I1 データ」 読込時の少し特殊な設定を行うウインドウが開く。
13. 「I0 データ」 が既読の時、それを使うかどうかの指定。
2dXafsView は「I0 データ」 がなくても「I0 は一定だった」と仮定して動作。
14. 「ダーク像」 読込。カメラに光が入っていない時に撮影された像を指定し読み込める。
15. 既読のダーク像を消して、何も読み込んでいない状態に戻す。
16. ダーク像が既読のとき、そのファイル名を表示。
17. 「ダーク像」 ファイルから「露光時間」 が取得できた場合、それを表示。
18. 読み込んだデータは蛍光測定のデータであることを指示。

3.1.1 I1 データ読み込み

I1 データ (試料がある状態で撮影した画像ファイル) を読み込むには、どの様にファイルを読み込むかの設定を行った後、図 3-(1) ボタンを推して現れるファイル選択ダイアログ(図 4 左)でファイルを選択します。ファイルは複数選択可能です。通常のファイル選択ダイアログ同様に、次のような操作も有効です。

- 一つファイルを選択してから、シフトキーを押しながら別のファイルを選択
⇒ 間のファイルが全て選ばれる

- コントロールキーを押しながらファイルを選択
⇒ それ以前の選択に影響を与えることなく、一つだけの選択/非選択を選べる

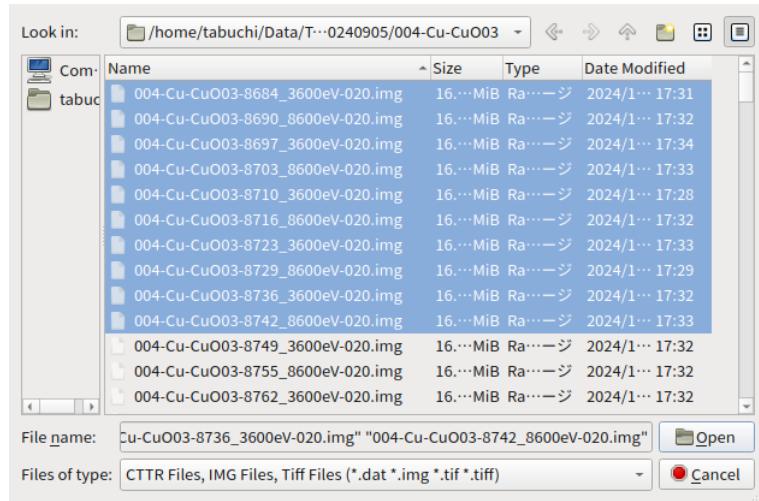


図 4: I1 ファイル選択ダイアログ

ファイル読み込みに関する設定は次のようなものが有ります。

- 新規(図 3-(2))/追加(図 3-(3)):
既読のデータを消す / 消さずに追加で読み込む

- 先頭 Cut(図 3-(7))、スキップ(図 3-(9))、末尾 Cut(図 3-(9)):
読み込み選択したファイルの内、実際には読み込まないファイルを指定します。
現在 2dXafsView がサポートしているカメラ(浜松ホトニクス X-ray sCMOS)は、画像サイズを制限せずに撮影した場合、1枚の画像は 8MB または 16MB です。このため、例えば Quick-2D-XAFS を行って 4000 点の測定をすると、その全画像を読み込むには $8\text{MB} \times 4000 = 32\text{GB}$ のメモリが必要になります。Cut や スキップの設定はこれを減らすためのものです。
例えば「先頭 Cut」を 100、「末尾 Cut」を 200 にして、ファイル選択ダイアログで合計 500 本(File-001～File-500)のファイルを選択した場合、実際には File-001～100 の 100 本と File-301～500 の 200 本は読みません。加えて「スキップ」が 1 なら、File-101～File-300 の 200

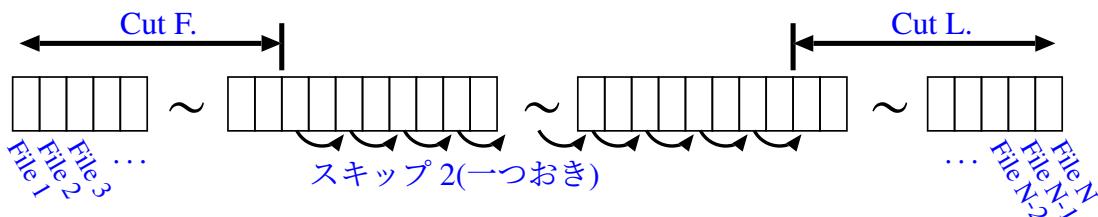


図 5: 読込指定したファイルの内、先頭の'Cut F.' 本、末尾の'Cut L.' 本は読み込まれません。また、skip を指定すると、2 の場合には 1 本おき、3 の場合には 2 本おき... の様に間引いて読み込まれます。

本全部が読まれますが、2なら1本飛びで 101, 103, 104,... が、3なら2本飛びで 101, 104, 107,... が読まれます。

設定(測定エネルギーの設定):

2D-XAFS 測定で撮影された像の集合から XAFS スペクトルを得るには、個々の像がどのエネルギーで撮影された像なのかを知る必要があります。2dXafsView では、このために3つの方法を準備しています。図 3-(11) のボタンで起動されるダイアログ(図 6)では、その方法を指定します。

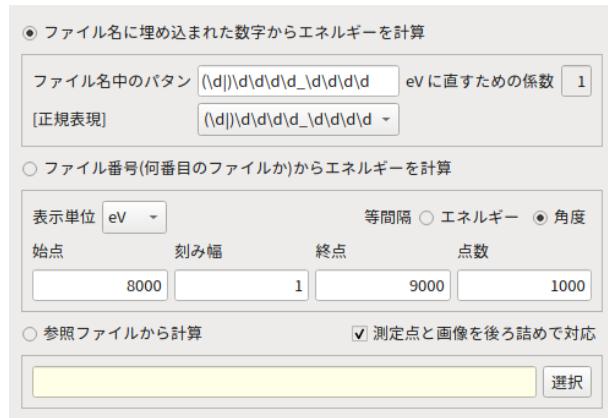


図 6: I1 読み込み時の横軸(エネルギー)設定ダイアログ

1. ファイル名に埋め込まれた数字からエネルギーを決定:

XafsM2 を使って Step-2D-XAFS 測定を行った場合、撮影されたファイルのファイル名には測定点のエネルギーが埋め込まれています。その他の方法で測定/撮影された像でもファイル名にエネルギーが埋め込まれていれば、その値を抽出して測定点のエネルギーにすることができます。

「ファイル名中のパターン」はファイル名中にエネルギーがどの様な形で埋め込まれているかを示す「正規表現」です¹。XafsM2 での測定結果なら設定をかえずにそのまま使えます。よくありそうなパターンが幾つかその下のリストに登録されていますのでそこから選ぶことができます。

¹ 詳細は web 等で「正規表現」「パターンマッチング」等で検索してみて下さい。以下、簡単な説明を試みます。正規表現は自分が意図した文字列のパターンを表現するためのものです。正規表現ではほとんどの普通の文字はそのままその文字として扱い、一部特殊な文字を例外扱いします。例えば'abc'はそのままアルファベット3文字の'abc'という文字列(というパターン)を意味します。特殊な文字としては、ピリオド('.')、アスタリスク('*')、プラス('+')、カギカッコのペア('[';']')、バックスラッシュ('\'', '¥')などが有ります。'.'は任意の一文字と一致するとみなされるワイルドカードのような文字です。'*'はその直前の文字が任意の数(0でもOK)並んだ文字列と一致します("a*"は"aaaa"等と一致)。'+'はその直前の文字が1個以上任意の数並んだ文字列と一致します。'[]'はその中に入っている任意の1文字と一致します("[abc]"は、a,b,cのどれかと一致)。'\'', '¥'はその次の1文字によって意味が変わりますが、ここで大事なのはおそらく、'¥d': 数字一文字、'¥D': 数字以外の文字一文字、'¥.': 特殊な意味を持たない単なるピリオド1文字、等です。これを使って、ファイル名中にエネルギーがどんな形で埋め込まれているかを指定できると、2dXafsView はそれを読みます。例えば'8090.10'の様な形なら、'¥d¥d¥d¥d¥.¥d¥d'です。ファイル名に複数の数字が含まれていて区別するのに前後の文字も必要ならそれを追記しても構いません。例えば'data-20250607-8090_10eV.dat'だとしたら、'-¥d¥d¥d¥d¥d¥deV'と書くことで"-記号で始まって4桁の数字、'.'記号、2桁の数字の後にeV"という文字列を列を認識します。この時'.'は自動的に小数点に変換され、余分なアルファベットは削除されます。

きます。

「eV に直すための係数」は、埋め込まれている数字が eV 単位なら 1、keV 単位なら 1000 になります。これも、XafsM2 での測定結果ならデフォルトの 1 のままで構いません。

2. ファイル番号からエネルギーを計算 :

「1keV 範囲を等間隔に 2000 枚撮影した」というようなケースなど、撮像時のエネルギーが、その画像が何枚目の画像かによって計算で求められる場合にはこの方法が選択できます。

3. 参照ファイルから計算 :

XafsM2 を使って Quick-2D-XAFS 測定を行った場合はこの方法がオススメです。「参照ファイル」としては、XafsM2 で生成される測定結果のファイル(普通の XAFS 測定の時のデータファイル)を指定して下さい。

「測定点と画像を後ろ詰めで対応」は、現在の測定システムの不具合に対応するための設定です。現在の測定システムでは Quick-2D-XAFS 測定で、例えば 2000 枚の撮像を行う設定にした時、実際にはそれよりも数枚から 10 数枚少ない画像しか撮影されないときがあります。この時、画像の欠損は測定点の先頭で起こっていることがわかっているので(最初の数枚から 10 数枚の画像が撮影されていない)、参照ファイルの測定点と付き合わせる時は最後の画像が、最後の点に対応するように後ろ詰めで対応させる必要があります。このチェックボックスはその設定です。

XafsM2 で 2D-XAFS 測定を行った結果を解析する場合、Step 測定なら 1. の方法が、Quick 測定なら 3. の方法がオススメということになります。

拡張設定(その他の設定):

図 3-(12) のボタンで起動されるダイアログ(図 7)ではファイル読み込みに関連した追加の設定を行えます。



図 7: I1 読み込み時のその他の設定ダイアログ

- 「最新読み込み画像表示」:

チェックすると画面に表示される像は最後に読み込んだ像になります。チェックしない場合ファイルを読み込んでも表示される像は変化しません。

- 「'Live' ファイル無視」：
チェックすると選択されたファイルの中に、ファイル名に'Live' という文字列が含まれファイルがあった場合、その画像は読み込まれません。
- 「暗領域設定」「更新」「解除」：
「設定」ボタンを押すと、現在の選択領域(「画像表示部」参照)が「暗領域」に設定されます。
蛍光 2D-XAFS 測定のために準備された特別な機能です。画像が非常に暗い時に必要にならりますがここでは解説しません。
- 「異常ピクセル定義選択」：
X 線カメラはピクセル数の多い高精度のカメラなので、幾つか動作しないピクセル(異常ピクセル)がある時があります。異常ピクセル定義ファイルで、異常ピクセルを指定すると、解析などの際そのピクセルにマスクをかけて除外することができます。この機能を用いる場合、指定するファイル(デフォルトでは“errPoints.txt”)は、異常ピクセルの x,y 座標値が 1 行に 1 つずつ書かれた、異常ピクセルの数分の行があるテキストファイルです。
これも、画像が暗い時に重要性が増す機能です。

3.1.2 I0 データ読み込み

I0 データ(試料が無い状態で撮影した画像ファイル)を読み込む操作や設定は、I1 データについての操作や設定と同じです。一つだけ違うのは I0 データについては図 3-(13) の「使用」チェックボックスが有ることです。

2dXafsView は I0 データが読み込まれていない場合には、仮に「全ピクセルで I0 は 1」として $\log(I_0/I_1)$ を計算します。このため、I0 のデータを読み込む前から(I0 での割り算をしていないので不正確では有りますが) 吸収スペクトルの形を見るすることができます。

一方、I0 を読み込んでいても「次に読む I1 は別の日に測定したものなので今の I0 で割り算はできないはず」という場合が有ります。この様な時には「使用」のチェックを外せば読み込んでいる I0 を使用しません。

3.1.3 ダークデータ読み込み

測定に使うカメラの画像で、光がない時でも値が 0 にならないようなら吸光度を計算する際に歪みのもとになります。そこで、図 3-(14) の「ダーク読込」で、光がない状態で撮影した画像を指定して読み込んでおくことで、これを差し引くことができます。ファイルを読み込むと図 3-(16) の場所に読み込んだファイル名が表示されます。図 3-(15) の「クリア」は、読み込んだファイルをクリアし読み込んでいない状態に戻せます。

図 3-(17) に表示されるのは読み込んだ画像を撮影した時の露光時間です。2dXafsView は、この露光時間(表示値)を I0 や I1 の露光時間(表示)と比較して、定数倍した数値を差し引きます。例えば I1 の露光時間が τ_1 、ダークの露光時間が τ_{dark} の時、

$$I_1(x, y)_{\text{corrected}} = I_1(x, y)_{\text{measured}} - \frac{\tau_1}{\tau_{\text{dark}}} I_{\text{dark}}(x, y)$$

となります。もし表示されている露光時間が、実際の露光時間と異なっている場合は正しい値を入力して下さい。

補足: 図3-(14)の「ダーク読み込み」のボタンの下には「BG Data」というボタンがあります。また、少し右の方には「Total I0 of I1」や「Total I0 or I0」などの表示と関連したボタンがあります。これらは、2D XAFS測定ではI0とI1を同時に計測できないことを考慮し、2D測定時にイオンチャンバーで測定したI0やI1の値を使って補正を掛けることを目的に準備されていますが、現時点では機能していません(何を読み込んでも変わりません)。

3.1.4 蛍光型の読み込み

図データ読み込み部-(18)の「蛍光型」のチェックボックスを入れると、吸光度を計算する際に $\log(I_0/I_1)$ ではなく、 I_1/I_0 の形で計算するようになります。これは、2次元の蛍光測定を行った結果のデータを扱う時用の機能です。

3.2 画像表示部

画像表示部の画像表示エリアには、撮影されたI1やI0の像や、データを解析することで得られたマップが表示されます。何を表示するかは次節で説明する表示選択部で選択します。

また、表示されている画像に関する幾つかの操作を行うためのボタン等が、画像の下に並んでいます(図8)。



図8: 画像表示部の下には、表示されている画像を操作する幾つかのボタン等が有ります

3.2.1 表示される像の選択

画像表示エリアに表示される像の種類は表示選択部で選択しますが、「データ表示」もしくは「I0表示」が選択している場合、画像表示エリアに表示されるのは「I1」もしくは「I0」として選択して読み込んだ画像です。撮影されたエネルギー点の数分ある「I1」もしくは「I0」の画像のうち、どの画像が表示されているかは図8-(4)に表示されている「画像No.」を見るとわかります。「I1」もしくは「I0」の画像を読み込んだ直後は、表示されているのは最後の一枚の画像なので「画像No.」も最後の一枚を示す数字になっています。

図8-(3)にあるスライダの□を掴んで左右に動かすと表示する画像の番号を変えることができます。また、図8-(4)に直接数字を入力することでも画像を選ぶことができます。

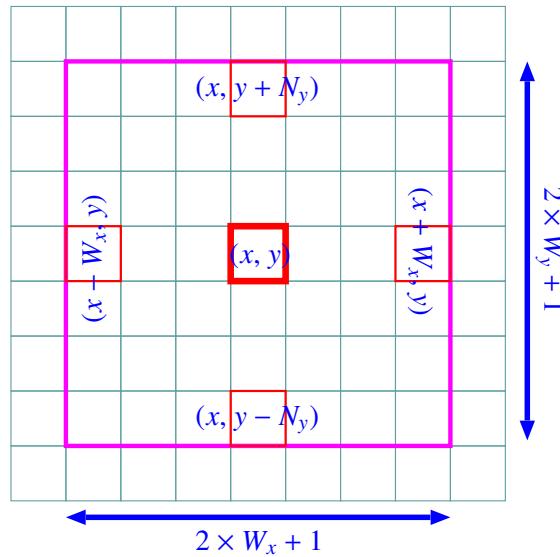


図 9: 積分範囲として入力した数字が (W_x, W_y) だった場合、積分される領域の大きさは $(2 \times W_x + 1) \times (2 \times W_y + 1)$ です。例えば、 $(W_x, W_y) = (10, 10)$ なら 21×21 、 $(W_x, W_y) = (1, 1)$ では 3×3 、 $(W_x, W_y) = (0, 0)$ とすると一点のみが範囲になります。

3.2.2 積分範囲

画像表示エリアでマウスを移動すると、マウス位置が交点になるように黄色のヘアラインが十字に表示され、交点には赤いボックスが表示されます(図 2-B. 画像表示部)。この時表示される赤いボックスは、各点のスペクトルを計算する時の積分範囲を示しています。詳しくは後述しますが、積分して得られたスペクトル(エネルギー方向)は、メインウインドウとは独立したウインドウとして表示される「XAFS スペクトル表示」ウインドウ並びに「解析スペクトル表示」ウインドウに表示されます。

積分範囲の大きさは図 8-(1) で設定できます。ここで入力する値 (W_x, W_y) は、マウスカーソルの位置 (x, y) を中心に、縦横方向に片側何ピクセル分の範囲をとるかです(図 9)。仮に $W_x = 10$ 、 $W_y = 10$ と入力すると、積分範囲は $(x - W_x, y - W_y) - (x + W_x, y + W_y)$ ので、その大きさは $(W_x \times 2 + 1, W_y \times 2 + 1) = (21, 21)$ になります。

1 点のみにしたい場合には $W_x = 0$ 、 $W_y = 0$ とします。但し、2D 測定のデータの質はあまり高くないことが多い、1 点のみにするとノイズが大きくなります。

3.2.3 マウス操作

図 8-(2) の「分析刻み」については後述しますが、この数字は 2 次元の解析を行う際に使われます。

画像表示エリアでは次のような操作が行なえます(図 10)。

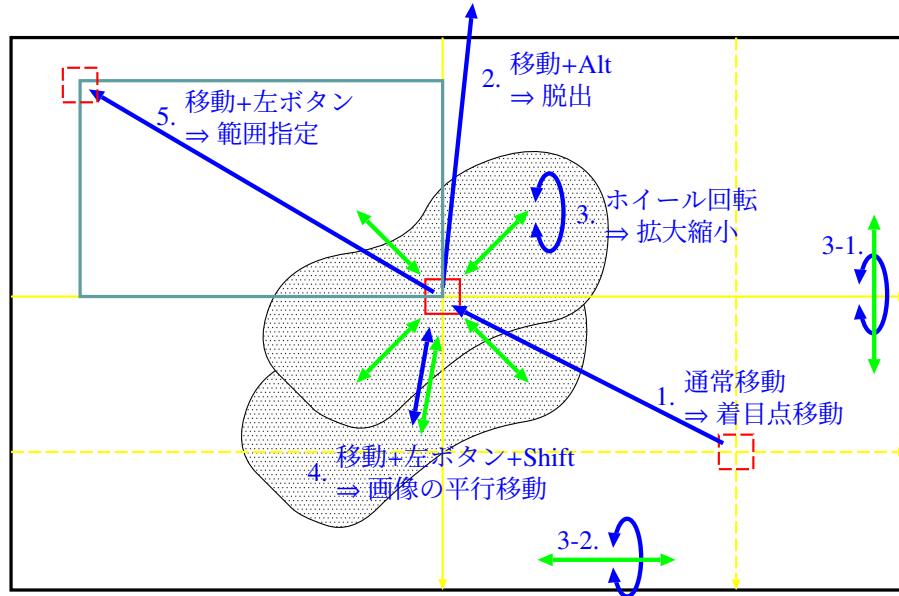


図 10: 画像表示エリアで行える様々な操作。

1. 着目点移動: 通常の移動

ボタンやキーを押さずにマウスを移動すると着目点(積分範囲)が移動します。

2. 着目点を動かさない移動: 移動+Alt

Alt キーを押しながら移動すると、着目点を動かさずに移動できます。ある場所に着目して、そのスペクトルを表示したままでなにか他の操作を行いたい時に使って下さい。

3. 画像拡大縮小: ホイール回転

マウスホイールを回すと、着目点を中心に像の拡大縮小ができます。この時、

1. 画面左右端に近い時には上下方向のみ

2. 上下端に近い時には左右方向のみ、拡大縮小されます(画像の縦横比が変わる)。

4. 範囲指定: 左ボタン+移動

マウスの左ボタンを押しながら移動すると、範囲指定の四角が現れます。この範囲は、後述する解析等の対象範囲になります。

5. 画像平行移動: 移動+左ボタン+Shift

左ボタンと Shift キーを押しながら移動すると、表示されている画像全体が平行移動します。

3.2.4 選択範囲を最大表示

画像表示エリアで範囲選択を行っているときには、図 8-(5) の「Zoom in」ボタンを押すと選択されている範囲が画像表示エリア全面に表示されるように拡大されます。

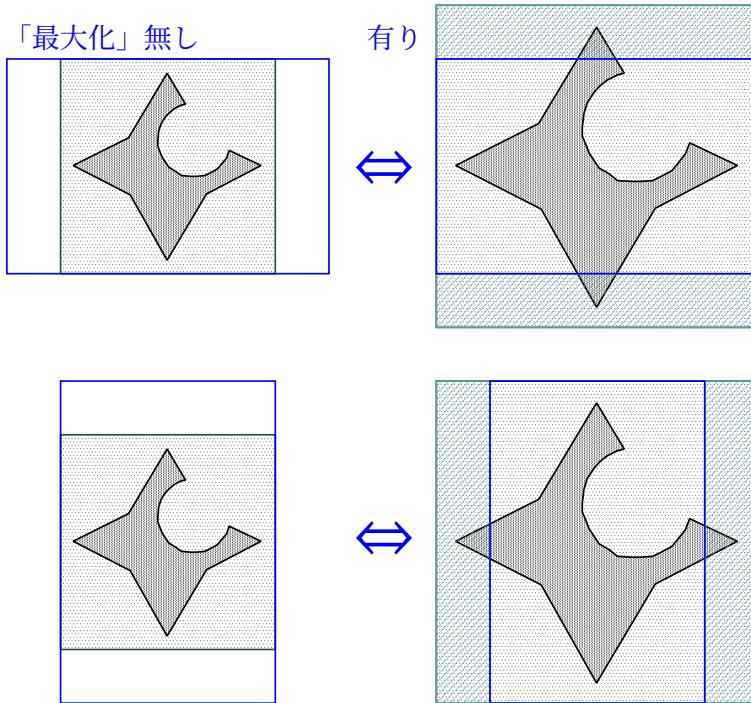


図 11: 青枠は画像表示エリアを、網掛けした部分は撮影された像を表す。

「最大化」がチェックされていない場合、「スケールリセット」を押すと、左上もしくは左下の様に、画像が全て画像表示エリア内に収まるように最大化されます。一方で、「最大化」がチェックされていると、右上または右下の様に、画像表示エリア内に空白が残らない用に最大化されます。

3.2.5 表示位置、大きさのリセット

何かの操作を行って画像表示エリアに表示される画像の倍率や表示位置が変わったとき、これを元に戻したい場合には図 8-(6) の「スケールリセット」ボタンを押して下さい。像の倍率や表示位置が初期状態に戻ります。像の初期状態は図 8-(7) の「最大」がチェックされているかどうかで変わります。「最大」がチェックされて「いない」場合、図 11 の左の図のように画像表示エリア内に画像が全て収まるようなスケールにリセットされます。一方で、「最大」がチェックされて「いる」場合、図 11 の右の図のように画像表示エリア内に画像が表示されない空白領域が残らないようなスケールにリセットされます。

撮影された 2 次元の画像全域に意味のある像が写っている場合、初期状態では像の全体を見たいはずなので、「最大」をチェックしない方が良い設定になるかもしれません。一方で、あいち SR の BL11S2 で等倍で撮影した像のように、画像の一部に帯状にしか像が写っていない場合、初期状態では、上下が見えなくても不都合が無いので、(ディスプレイ上で画像表示エリアが横長なら) 「最大」をチェックする方が良い設定になるかもしれません。

3.2.6 表示色(明るさ)スケールの設定

2dXafsView は、デフォルトでは、表示される画像の最も明るい部分(マップ表示の場合最も値の大きい部分)をグレイスケールの「白」(255)で、表示される画像の最も暗い部分(マップ表示の場合最も値の小さい)をグレイスケールの「黒」(0)で表示するように、「値」と「色」を対応させます。



図 12: 画像表示エリア右端に表示される画像の色スケール(グレイスケール)を決めるカラーバー。画面上には縦長に表示されているものを 90 度回転して示す。

画像表示部右端にはその対応関係を示すカラーバーが図 12 の様に表示されています。この図の例では、画像の最も明るい部分は値としては 1.10475×10^6 の値で、最も暗い部分は 2178 の値を持ち、2dXafsView はこの 2 つの値の間を線形に白から黒に変化する 256 階調のグレースケールで表示していることを示しています。

このカラーバーの上端/下端(図では左端と右端)には、マウスで掴むことができる境界線が一本ずつあります。マウスでこの境界線を掴んで動かすと、画像の中の「値」と表示される「色」(グレースケール)の関係を変えることができます。例えば、画像の全体は小さい値の部分が多いのに、ごく一部に値の大きい部分があるために「白」に対応する値がそれに応じて大きな値に設定されてしまい、全体がほとんど真っ黒に見えてしまうような場合には、上端(図では左端)の境界線を掴んで下に(図では右に)動かすと、暗い領域を明るく表示することができるので像が見えるようになります。

カラースケールの変更はその時表示されている画像だけに対して行います。I1 や I0 の画像の一つに対してカラースケールを選択した場合、同様の変更を他の全ての I1 や I0 に対しても行いたいと思うことが多いはずです。その様なときには、カラーバーの下の(図では右の)「全体」ボタンを押すと残りの I1 や I0 の画像全てに対して同じ変更を行います。

注意: カラースケールの変更は対応する画像の再生成を行う比較的「重い」操作です。境界線を掴んだままで細かく動かすような動作を行うと、多数の画像生成を連続的に何度も繰り返すために動作が非常に重くなります。ときには 2dXafsView が動作を停止することもありますので注意が必要です。

3.3 表示選択部

図 2 に示す C. 表示選択部の左側に並んだラジオボタン(「表示画像選択」ボタン)を使うと、B. 画像表示部に何を表示するかを選択できます。また、左側に並んだボタンを押すとメインウインドウ以外のウインドウを表示することができます。

3.3.1 画像表示部に表示するものの選択

表示画像選択ボタン(図13)で選ばれるものは次のようにになっています。

- データ表示: I1としてロードした画像ファイル
- I0表示: I0としてロードした画像ファイル
- 入射E分布: 画面上の各点でのエネルギー補正値の大きさに応じたグレースケールのマップ
- 解析結果: 画像解析ウインドウを操作して得られた解析結果のマップ

3.3.2 メインウインドウ以外のウインドウ表示

図14にあるボタンを押すことで、それぞれ次の様なウインドウが表示されます。

- 統計表示: 解析結果に関する統計情報を表示するウインドウ
- XAFS表示: XAFSスペクトルを表示するウインドウ(メインウインドウ付属)
- 画像解析: 表示されている画像を「画像解析」的に扱うためのウインドウ
- 校正W表示: エネルギー校正の操作を行うウインドウ
- 解析W表示: 2次元的なデータ解析を行うためのウインドウ

表示されるそれぞれのウインドウについては、後述します。

3.4 候補元素選択部

2dXafsViewは2D-XAFS測定結果を扱い、2次元の各点でのXAFSスペクトルについて様々な操作を行います。対象となる点の数は膨大で、一つ一つの点のスペクトルを確認して、最適な解析条件を指示することは困難です。そこで2dXafsViewは吸収端の判別や、プリエッジ、ポストエッジラインの決定等多くのことを自動で行おうとします。この時候補元素選択部でヒントになる情報として、「対象となる元素はなにか」を伝えるとこの様な動作の難易度が下がります。

図15に示した候補元素選択部の各要素は次のような役割/意味が有ります。

1. 候補元素の情報を使うかどうかの指定。

このチェックを外しているときでも候補元素の情報を使うことがあります。

2. 候補元素の元素名の指定。

3. 対象吸収端名の指定。



図13: 画像表示部に何を表示するかを選択するラジオボタン。



図 14: メインウインドウ以外のウインドウを表示するためのボタン。

4. 吸収端エネルギー。元素名と吸収端を選ぶと自動的に設定。変更も可能。
5. プリエッジラインを決定時に(4)の吸収端位置から何 eV 離れた位置までのデータを使うかの指定。負の数字が吸収端より前を意味する。ここで指定したエネルギーより前の測定点が何点かは確実にあるように注意。
6. ポストエッジラインを決定時に(4)の吸収端位置から何 eV 離れた位置からのデータを使うかの指定。
7. エッジジャンプ有無の判定基準。ここで入力した数字を α とし、プリエッジ部、ポストエッジ部のデータの分散を σ とするとき、 $\Delta\mu t < \alpha\sigma$ ならば、「そこには吸収端がない=対象元素がない」と判断する(内部的には、強制的に $\Delta\mu t = 0$ とする)。この条件を使うかどうかはまだ不確定で、2dXafsView のバージョン依存。

3.5 情報表示部

図 16 に示す メインウインドウの最下部にある情報表示部には、マウス操作で選択された画像上の点に関する情報が表示されます。また、解析範囲に関する設定が行なえます。

- (1) に示す「積分範囲」の指定は、既に画像表示エリアの「積分範囲」で説明した様に、マウスで指定された位置のスペクトルを表示する際の積分範囲です(図 9)。後で述べる解析ウインドウで 2 次元の解析を行い、その結果のマップを作る際に、1 点に対応してどのぐらいの範囲を積分してスペクトルを作るかも、この積分範囲で決まります。
- (2) に示す「分析刻み」の指定は、後で述べる解析ウインドウで 2 次元の解析を行う際に意味を持ちます。
- (3) に示す部分には、マウスが指す位置の I_0 の値と x, y 座標が表示されます。解析ウインドウで 2 次元の解析を行うと座標値の後(図 16-(3) で「0」が表示されている部分)に、その解析の結果の値が表示されます。表示される値は解析ウインドウの中でも確認できるので、ここでの表示はそれほど重要ではないかも知れません。



図 15: 候補元素選択部



図 16: 情報表示部

- (4) に示す部分には、2次元の画像の上の点を記録し、後にその場所の値を確認するための機能がまとめられています（「着目点記録と再生」）。
- (5) に示す部分には、マウスで指定された位置の「ダーク」の値（「ダーク読み込」で読み込んだ画像のその点での値）が表示されます。
- (6) に示す部分には、マウスで指定された位置のスペクトルの吸収端の「標準」として与えられた値（較正ウインドウで設定）に対するシフトと、較正ウインドウで決めた、その点のエネルギー補正值が表示されます。
- (7) の「二次面フィット」は現在機能していません。
- マウス操作-4 によって範囲指定を行った場合、(8) に示す部分には指定した範囲の始点、終点の座標が表示されます。

3.5.1 積分範囲と分析刻み

図 9-(1) の「積分範囲」と「分析刻み」の関係には注意が必要です。この 2 つの数字は解析ウインドウで 2 次元の解析を行う際、3 つのこととに影響します。

- 2 次元解析の結果得られるマップの画像としての解像度（分析刻みが小さいと高解像度）
- 2 次元解析の結果の結果の質/信頼度（積分範囲が大きいと質が上がる/信頼性が上がる）
- 2 次元解析に必要な時間（積分範囲が大きいと長時間、分析刻みが小さいと長時間）

図 17 に「積分範囲」と「分析刻み」を変えた時にどのようなことが起こるか幾つかの例を示しました。

図 17-(a)、(b) は積分範囲と分析刻みの大きさが一致している例です。この場合には、(a) の様に「積分範囲が広い：刻みが粗い」と「スペクトルの質が高い=解析結果のノイズが少ない：得られる画像の画素は大きい」となり、逆に(b) の様に「積分範囲が狭く：刻みが細かい」と「スペクトルの質が低い=解析結果にノイズが多い：得られる画像の画素は小さい」となります。(c) の様に、積分範囲と分析刻みを一致させず、分析刻みを細かくしても積分範囲を大きく取ると、解析結果のノイズを押さえつつ得られる画像の画素を小さくし、見かけの解像度を上げることができます。ただし、「積分範囲」が大きい分画像がボケることに注意が必要です。

さらに解析にかかる時間のことを考えると、時間は積分範囲に比例して、また分析刻みに反比例して長くなります。図 17-(a) の解析にかかる時間を 1 とすると、図 17-(b) の場合には積分範囲は $(3 \times 3)/(5 \times 5) = 9/25$ に縮小したのに対して、分析刻みが小さくなつたことによる解析点の数は $(1/3 \times 3)/(1/5 \times 5) = (5 \times 5)/(3 \times 3) = 25/9$ と増え、結果的に $9/25 \times 25/9 = 1$ なので解析にかかる時間も 1 になります。

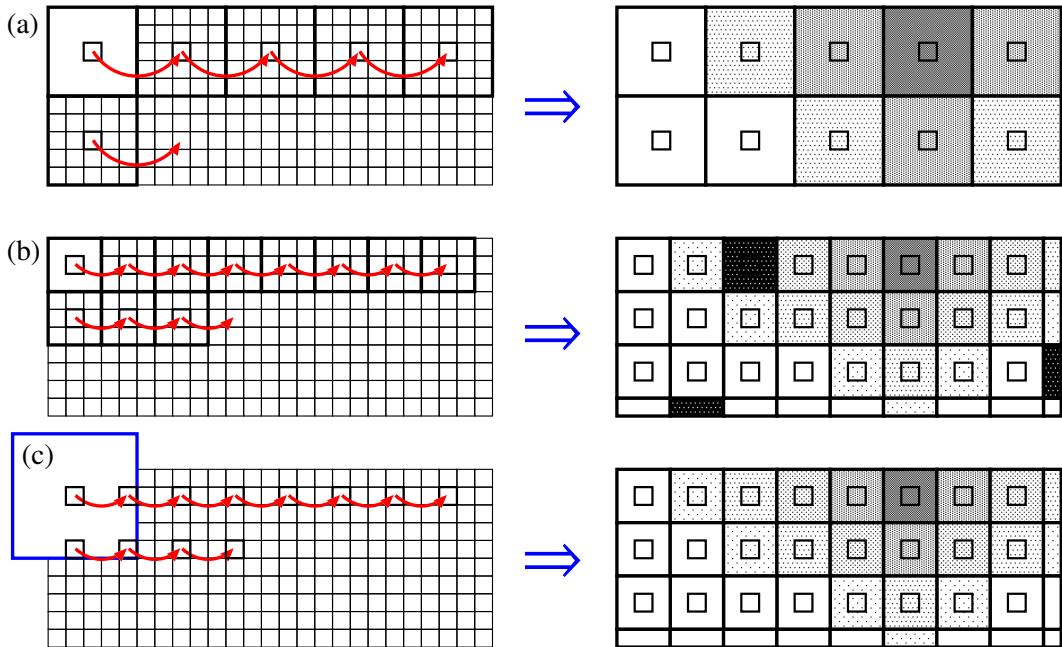


図 17: 積分範囲と分析刻みの関係。

る時間はほとんど変わりません。一方で、図 17-(c) の様に、積分範囲を広げて解析ステップを小さくした場合、(a) と比べると、積分範囲は $(7 \times 7)/(5 \times 5) = 49/25$ 倍、解析点の数は (b) と同じく $25/9$ 倍なので、解析にかかる時間は $(49/25) \times (25/9) = 49/9$ となって 5 倍近く長くなることになります。

この様なことから、まだ全体がどの様になっているかわからない解析の最初の段階では「積分範囲+分析刻み」を $(10,10)+(10,10)$ や $(5,5)+(5,5)$ などと粗めにとり、最終的に結果の画像を得ようとするときには、分析刻みを $(1,1)$ や $(0,0)$ に小さくするのが良いです。分析刻みは小さくすると解像度が上がる一方で、解析時間が長くなりますが、最終結果を画像を得ようというときには時間よりも解像度が優先になることが多いはずです。

積分範囲は大きくすると時間が伸びますが、解析結果の質に関して言うと、大きくなると「ボケ」の原因になり、小さくすると画像にノイズが増えるため、どちらに振るのが良いか一概には言えません。このため、例えば $(5,5)$, (3×3) , $(1,1)$ 等幾つかの値を試して、最終結果にするのにふさわしい数字を探す必要があります。

3.5.2 着目点の記録と再生

図 16-(4) の部分を操作すると、画像表示部の中でマウスカーソルの位置を記録し、後でその場所に戻ってくることができます。

- 位置の記録：図 16-(4) の「記録」ボタンを押す/画像表示部の中でマウスを右クリック
「記録」ボタンを押すには Alt キーを押しながらマウスを動かして画像表示部から脱出する
必要があるので、右クリックのほうが簡単です。

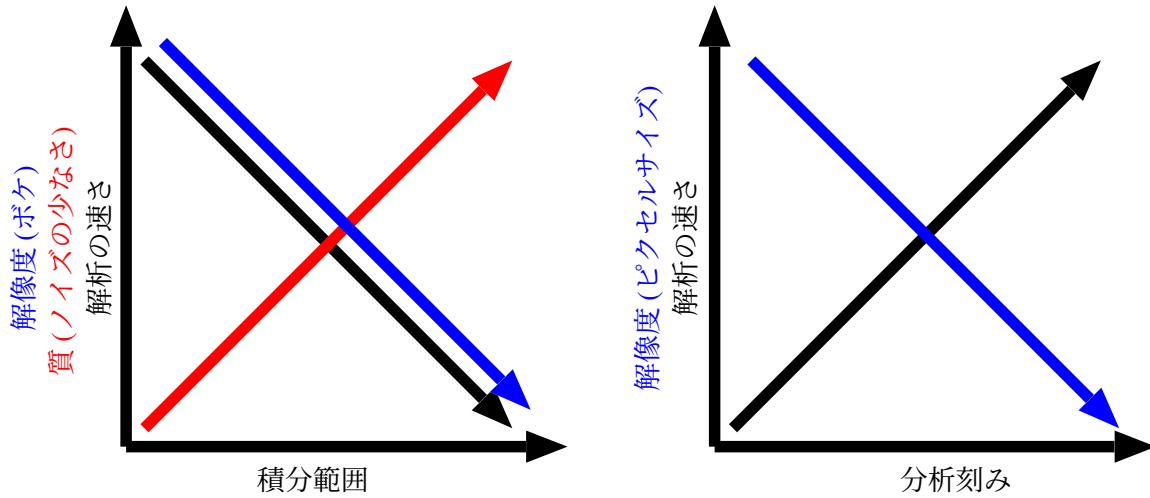


図 18: 積分範囲と分析刻みにの関係。図で上に行くほど「好ましい」状態になるように軸をとった。解析の初期、短時間で何度も結果を確認したいなら積分範囲は小さく、分析刻みは大きくするのが良い。最終結果をキレイに表示したい時(時間を気にしない時)、分析刻みは単純に小さくすればよいが、積分範囲は画像の質(ノイズの量)と解像度がトレードオフになるため適切な値を探す必要がある。

- ラベル付与: 図 16-(4) で「A00」と表示されている位置に任意の文字列を入力記録された「位置」にここで決めた「ラベル」が名前として付与されます。「ラベル」末尾の数字は、自動的に繰り上がっていきますので、ラベルが「A00」の時に位置を記録すると、次のラベルは自動的に「A01」になります。任意に名前を付けた場合でも末尾を数字にしておけば同様の動作をします。
- 記録された位置の選択: 図 16-(4) の「移動」ボタンの前の「選択ボックス」でラベルを選択位置を記録すると、その位置のラベルが選択ボックスに表示されます。表示された複数のラベルの一つを選ぶとそこに「移動」することや、その位置を「削除」することができるようになります。
- 記録された位置への移動: 図 16-(4) の「移動」ボタンを押すと、画像表示部内のクロスカーソルが選択された位置に移動します。
- 記録された位置の削除: 図 16-(4) の「削除」ボタンを押すと、記録された位置が削除されます。

3.6 データ保存部

3.6.1 画像/データ保存

図 19-(a) に示す、データ保存部の「画像/データ保存」にある「画像セーブ」または「データセーブ」ボタンを押すことで表示されている画像や2次元のデータを保存できます。

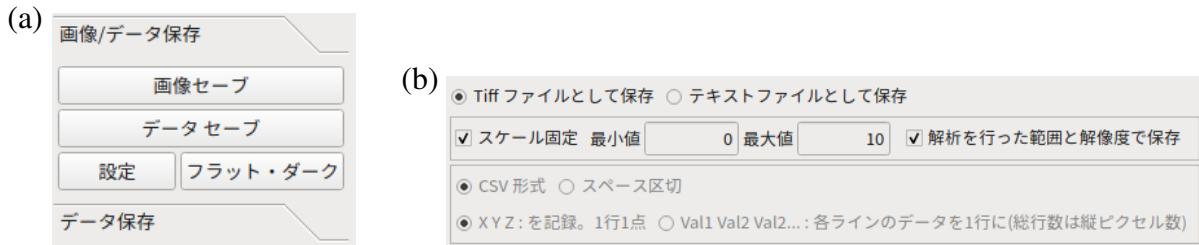


図 19: データ保存部 (a) とその「設定」ダイアログ (b)。

保存されるのは、「画像表示部」に表示されている像です。表示されているのが I1 の画像なら I1 の画像が、解析結果のマップならそのマップが保存されます。図 19-(a) の「設定」ボタンを押すと、(b) のダイアログが現れ、「データセーブ」する際の条件が設定できます。2dXafsView のウインドウサイズによっては、図 19-(a) の部分が小さくなつて「設定」ボタンが隠れているかもしれません。その様な場合には、2dXafsView 全体のウインドウサイズを大きくして下さい。

保存される範囲や保存される画像の形式は次のようになります。

	範囲	形式	データ精度
画像セーブ	その時表示されている範囲	png/jpg 形式	8bit グレイスケール
データセーブ	全範囲 or 選択範囲	tiff 形式	16bit グレイスケール
	選択範囲	テキスト形式	内部データの精度のまま

画像セーブを行う時の注意点:

- 保存されるのは通常のグレイスケールの画像としてなので、データとしてみた時にはピクセルあたり 8bit 分の情報しか持ちません。
- 図 8-(4) の「Zoom in」を押してからセーブすると、選択範囲のみの画像が保存されます。選択範囲によっては、画面上では縦横のピクセルサイズ比が 1:1 でなくなりますが、保存される画像では 1:1 になります。
- 保存される画像の形式は拡張子で決まります。拡張子を付けずに保存すると自動的に .png が付加されます。
- 画像を “a.png” という名前で保存したとすると、自動的に “a-cBar.png”, “a.info” というファイルも作成されます。“a-cBar.png” は保存した時の「表示色スケール」を画像として保存したもので。“a.info” は保存した画像に関する情報が書かれたテキストファイルです。現時点では保存した領域の左上、右下の x, y 座標 (Xs, Ys)-(Xe, Ye) が保存されます。

データセーブを行う時の注意点:

- どの様なデータ形式でセーブを行うかは、図19-(a)の「設定」ボタンを推すと現れる図19-(b)の設定ダイアログで決めます。デフォルトはTiff形式です。
- 「tiffファイルとして保存」を選んだ場合
 - 16bitのグレイスケール画像として保存されるので、画像セーブの場合より多くの情報が残りますがそれでも内部では実数で保持しているデータを16bit整数に変換するので精度は落ちます。
 - 「スケール固定」にすると、16bit整数に変換する際、ダイアログで設定する「最小値」が0に、「最大値」が16ビット整数の最大値(65,535)になるように変換されます²。
 - 「スケール固定」を外すと内部データの最大値が65,535、最小値が0になるように変換します³。
- 「テキストファイルとして保存」を選んだ場合
 - まだ何も「解析」していない時「テキストデータとして保存」しようとすると2dXafsViewが落ちる可能性があります。
 - 整数化しない内部データのそのままの数値が書き出されるので精度が落ちません。
 - 1行に複数の数値が書かれる時、数値の区切りをカンマ(,)にする(CSV形式)か、スペースにするかを選択できます。
 - 「XYZを記録」を選ぶと、1行に、「ピクセルのX座標、ピクセルのY座標、ピクセルの値」が書かれ、この様な行がピクセル数分並んだファイルになります。
 - 「Val1, Val2, Val3...」を選ぶと、1行に、画像の1ライン分のピクセルの数値が並べて書かれた非常に長い行が、画像のライン数分書かれます⁴。

「フラット・ダーク」ボタン:

データ保存部の「画像/データ保存」には、「フラット・ダーク」というボタンも有ります。このボタンを押すと“flat.dat”という名前のtiffファイルと、“dark.dat”という名前のtiffファイルができます(拡張子は“.dat”ですが、どちらもtiffファイルです)。“flat.dat”は、全データが1のファイルで、“dark.dat”は全データが0のファイルです。プログラムのチェックのときなどに使用するデータ生成のための機能で、通常使用する必要はないと思われます。

²内部データの値を v 、ダイアログで設定する「最小値」を V_{\min} 、「最大値」を V_{\max} とすると、

$$[\text{保存される色値}] = 65,535 \times \frac{v - V_{\min}}{V_{\max} - V_{\min}}$$

になります。但し、 $v \leq V_{\min}$ の時には0、 $v \geq V_{\max}$ の時には65,535。

³内部データの最小値 v_{\min} を V_{\min} に、最大値 v_{\max} を V_{\max} に設定したのと同じことになります。

⁴画像のサイズを $W \times H$ とすると、 W 個の数字が並んだ行が H 行できます。

3.6.2 データ保存

データ保存部の「データ保存」にある「各点スペクトル保存」ボタンを押すことで各ピクセルに対応する XAFS スペクトルを保存することができます。データ形式としては、各行の先頭に、ピクセルの X 座標、ピクセルの Y 座標、その点のエネルギー補正值、の 3 つの数字が書かれた後、エネルギー(E_i)とそのエネルギーに対応する吸光度($M(E_i)$)の値がエネルギー点の数(N)分繰り返します。具体的には次のようにになります(実際にはカンマは入らない)。

$$X, Y, \Delta E, E_1, M(E_1), E_2, M(E_2), \dots E_i, M(E_i), \dots E_N, M(E_N)$$

データファイル全体としては、この様な行がピクセル数分並びます。

選択肢としてある「規格化 XAFS」「非規格化 XAFS」「未加工」を選ぶと記録される M の値が次のように変わります。

- 規格化 XAFS : μt からプリエッジラインを差し引いた後、ポストエッジラインが 1 になるよう規格化したものになる。
式で書くと $M(E) = (\mu t(E) - \text{pre}(E)) / (\text{post}(E) - \text{pre}(E))$ です。
- 非規格化 XAFS : μt からプリエッジラインを差し引いただけで規格化していないものになる。
式で書くと $M(E) = \mu t(E) - \text{pre}(E)$ です。
- 未加工 : 何も操作していない $\mu t(E)$ そのものになる。
式で書くと $M(E) = \mu t(E) = \log(I_0/I_1)$ です。

3.7 スペクトル表示ウインドウ(メインウインドウ附属/解析ウインドウ付属)

2dXafsView には、マウスで指示した位置の XAFS スペクトルを表示する 2 つの独立したウインドウが有ります。一つはメインウインドウに付属のもので、その内容はシンプルに指示位置のスペクトルだけが表示されます。もう一つは、解析ウインドウに付属のもので、指示位置のスペクトルに加えて、標準試料として選択したデータのスペクトル等も重ねて表示されます。図 20 に示すように、両者はこの一点の違いを除いてほとんど同じものです。ここでは前者を「XAFS スペクトル表示ウインドウ(メインウインドウ附属)」と呼び、後者を「XAFS スペクトル表示ウインドウ(解析ウインドウ附属)」と呼ぶことにします

2dXafsView 起動時には「XAFS スペクトル表示ウインドウ(解析ウインドウ附属)」が最初から表示されますが、「XAFS スペクトル表示ウインドウ(メインウインドウ附属)」は表示されません。

これらが表示されていないとき、「XAFS スペクトル表示ウインドウ(解析ウインドウ附属)」は表示選択部にある「XAFS 表示」ボタン(図 14)を押すと表示されます。「XAFS スペクトル表示ウインドウ(メインウインドウ附属)」同じく表示選択部にある「解析 W 表示」ボタンを押すと、「解析ウインドウ」が現れるのと同時に表示されます。

3.7.1 スペクトル表示ウインドウの機能(共通)

スペクトル表示ウインドウには、画像表示部の中でマウスで指定した位置のスペクトルが表示されます。表示されるのは「積分範囲」の中のデータを使って平均化したスペクトルです。

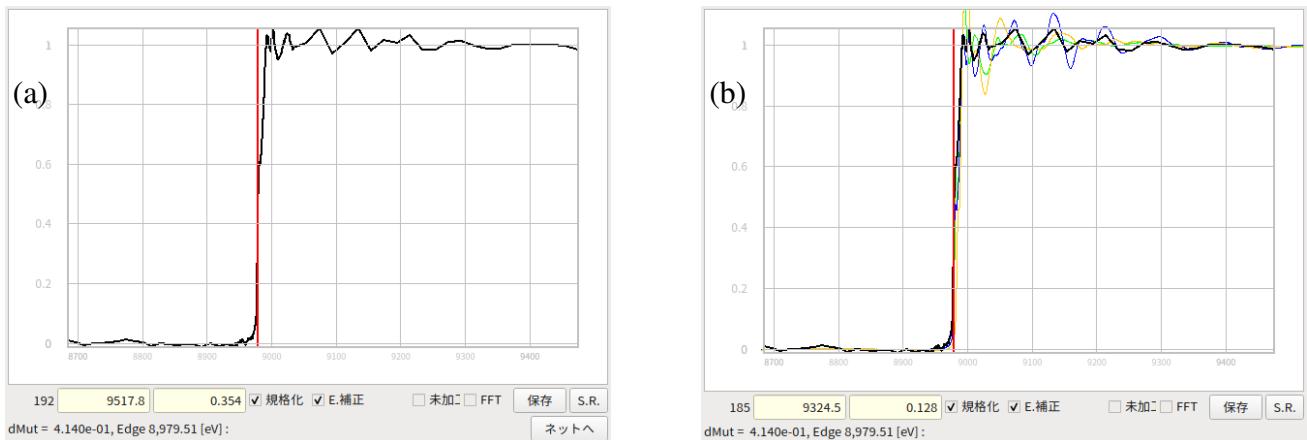


図 20: メインウインドウ附属 (a) および解析ウインドウ附属 (b) スペクトル表示ウインドウ
ウインドウの下部にあるものを

4 解析ウインドウ

5 較正ウインドウ

6 統計表示ウインドウ

7 画像解析ウインドウ

8 バッチ処理

9 設定ファイル

10 他のソフトウェアとの連携

10.0.1 STARS 経由での連携

10.0.2 直接の TCP/IP コネクションでの連携

11 不具合等

11.1 不具合

作者側がはっきり認識している不具合を列挙します。これらは可能なら対策したいと思っていますが、多くの場合、不具合はそれがあることは分かっているけれど対策できずに残ったのもでるので、

- I0画像を読み込むと、表示選択部で「データ表示」等、「I0表示」以外を選択していても「I0」の画像が表示され、読み込み終了後もそのままになります。一度、他の何かを選択すると正しい表示に戻ります。
- 画像表示部右端の表示色(明るさ)設定のカラーバーで、スケール変更を行うと2dXafsViewが落ちることがあります。
- まだ何も「解析」していない時「テキストデータとして保存」しようとすると2dXafsViewが落ちる可能性があります。