

プログラム FLOUNDER 1.0.36 マニュアル

2023 年 9月7日

高エネルギー加速器研究機構

物質構造科学研究所

放射光実験施設/構造生物学研究センター

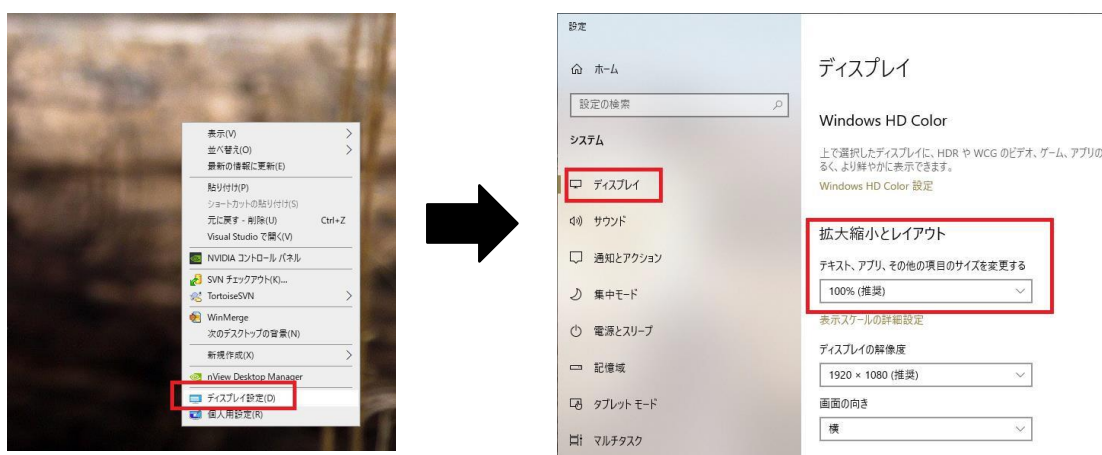
清水伸隆、谷田部景子、米澤健人

目次

1. はじめに.....	3
2. 使用する前に.....	4
3. 使用方法	6
① ソフトウェアの動作基本設定の確認.....	6
② ConfigSetting の設定	9
③ Detector の設定	13
④ Mask ファイルの作成.....	14
⑤ Uniformity 補正機能.....	20
⑥ ビームセンターとカメラ長の校正 (Calibration)	24
(1) テンプレートファイルを用いた校正手順	24
(2) 任意の設定パラメータによる校正	28
⑦ 円周平均 (Average)	29
(1) 測定したデータを順番に指定して処理する場合	29
(2) フォルダを監視し、更新されたイメージデータを自動で円周平均する場合 (Autorun)	38
⑧ PointPickViewer	42
⑨ 円周平均後の dat ファイルの平均 (DatAverage)	51
⑩ Background の差引き 1 (Sub_1)	53
⑪ Background の差引き 2 (Sub_2)	57
⑫ Background の差引き 3 (Sub_3)	64
⑬ 解析 (Analysis)	72
(1) LogY プロット	73
⑭ Cormap Maker	77
5. Reference	80
6. 補足	80

1. はじめに

- ① FLOUNDER は、Photon Factory の小角散乱ビームラインにおける広角散乱 (Wide-Angle X-ray Scattering = WAXS) データ処理のために開発された WAXS データ専用のソフトウェアです。同じく小角散乱用に開発された SAngler の姉妹ソフトウェアのため、SAngler を使用した経験のある方なら、比較的簡単に利用することが可能です。
- ② このマニュアルは、2023年9月7日現在のバージョン 1.0.36 に対応したものです。バージョンが上がると操作が変わる可能性がありますので、ご了承下さい。最新のマニュアルにてご確認下さい。
- ③ FLOUNDER の表示が崩れて、ボタンなどが隠れてクリックできないような場合は、ディスプレイ設定を変更すれば直る可能性があります。Windows 10, 11 の場合はデスクトップで右クリックし、「ディスプレイ設定」から「拡大と縮小とレイアウト (テキスト、アプリ、その他の項目サイズを変更する)」において、表示のスケールを「100%」に変更して下さい。多くの場合は、(推奨) とされている設定で問題ありません。Windows 8.1 の場合も同様の設定を確認して下さい。



- ④ このマニュアルは SAngler 2.1 のマニュアルを基に作成されています。SAngler と動作の異なる部分のみ改変されており、操作方法に変更がない部分はそのままになっております。画像が FLOUNDER と多少異なる部分があります。ご了承ください。

2. 使用する前に

- ① プログラムは Windows にのみ対応しています。現在の推奨動作環境は Windows 8.1, 10, 11 の 64bit です。Mac の仮想環境でも動作します。
- ② プログラムは 1 つの圧縮ファイルとして公開しております。ダウンロードして、HD 内のお好きな場所に解凍して下さい。
- ③ 圧縮ファイルを解凍すると、以下のファイルが生成します。

フォルダ	[system]	システムログが出力される場所。ConfigSetting で変更可。
	[cal_template]	Calibration時に利用する、BL-6A, BL-10C, BL-15A2のtemplateファイルが格納されている。
	[emb-python]	embeddable python
	[py]	Pythonスクリプトファイルが入っているフォルダ。
EXE, DLL	clsImgAggrPrj.dll	各 EXE で使用している DLL。
	RemoteTrace.dll	リモート制御用DLL。
	Flounder.exe	FLOUNDER 本体。
	ConfigCustom.exe	設定ファイル管理・編集用EXE。
	AnalysisTool.exe	FLOUNDER解析 EXE。
	AzimuthalIntensityHistogram.exe	円周上データ強度ヒストグラム EXE。
	PointPickViewer.exe	PointPick グラフビューワーEXE。
設定 ファイル	system.xml	システムログの保存期間やパラレル処理の設定など、FOUNDER で使用する基本設定が保存されている。
	facility.xml	施設名や使用するカウンタファイルの情報など、FLOUNDER で使用する施設情報が設定されている。ConfigCustom.exe で設定可。
	detector.xml	検出器名、検出器が扱える画像の拡張子、イメージサイズ・画素数など、FLOUNDER で使用する検出器情報が設定されている。 ConfigCustom.exe で設定可。
	calibrant.xml	【Calibration】タブで使用する標準試料の名称、面間隔、次数など、FLOUNDER で使用する標準試料情報が設定されている。 ConfigCustom.exe で設定可。
	config.xml	前回の条件が一部保存されている。

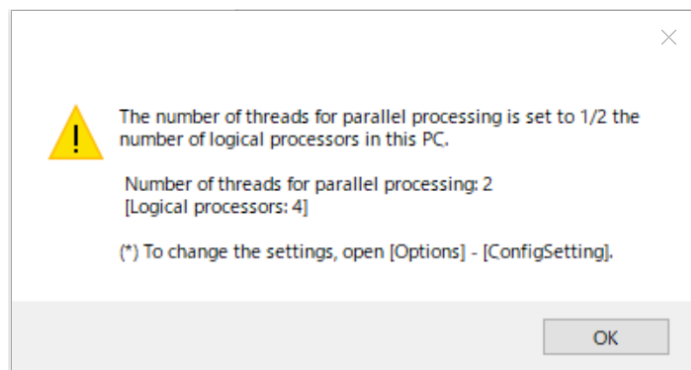
	az_config.xml	AzimuthalIntensityHistogram.exe で起動時に読み込まれる設定ファイル。このファイルがないとAzimuthalIntensityHistogram.exeは起動できません。
その他	LICENSE.txt	Python.NET ライセンスファイル

3. 使用方法

① ソフトウェアの動作基本設定の確認

- i. 「Flounder(.exe)」をダブルクリックして起動します。

※起動時に以下のようなメッセージボックスが表示されます。



The number of threads for parallel processing is set to 1/2 the number of logical processors in this PC.

Number of threads for parallel processing: ... ここに自動設定される数値が表示されます。

[Logical processors: ...] ここにはPCの総論理プロセッサ数が表示されます。

画像データを1次元のデータに円周平均する際、多数のファイルを高速で解析するために、PCのマルチスレッド環境に対応した処理を実行できます。マルチスレッド数は初期起動時、インストールしたPCの総論理プロセッサ数の1/2の数に自動設定されます。変更したい場合は[Options] - [ConfigSetting]にて設定して下さい。（詳しくは「② ConfigSetting の設定」を参照してください）。

- ii. ConfigSetting の設定

「② ConfigSetting の設定」をご覧ください。

- iii. 次に、[Option] - [ConfigCustom]を実行します。ここでは、計測した散乱強度を入射（積分）強度で規格化するために必要なカウンタファイルの仕様を登録する【Facility】タブ、利用可能な検出器の情報を設定する【Detector】タブ、校正用のベヘン酸銀などの情報を登録する【Calibrant】タブがあります。まず、【Calibrant】タブで新たな標準試料を登録する方法を説明します。

- iv. 【Calibrant】のタブに移動すると、初期設定では「Ag behenate（ベヘン酸銀）(n5-12)」、「CeO₂ (SRM674b)（酸化セリウム、セリア）」、「Si(SRM640d)」の3種が登録されています。ベヘン酸銀のn5-12とは、5次～12次の回折パターンを意味しています。

SRM(Standard Reference Materials)は、NIST(アメリカ国立標準技術研究所)から供給(販売)されている校正用の標準物質です。

試しにAg behenate (n5-12)をクリックすると、右側の表に面間隔 d : 58.38Å に基づき、5～12 次の値が記されています。ステアリン酸鉛等の別の試料のデータを Calibration に利用する場合は、新たに登録する必要があります。新たに追加する場合は、左下にある[Add](iv の図の赤枠)をクリックします。

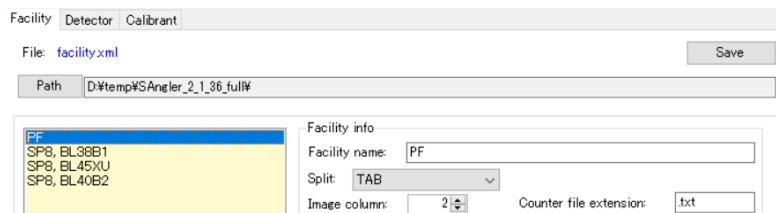
- v. 新たに「Calibrant1」という項目が追加されます。右側の[Calibrant]の欄で試料名[Name]を編集し、[d]に値を入力して[Add]をクリックすると、右側の表に値が入ります。引き続き解析に必要な次数の値を順次入力して校正テーブルを完成させます。値を消したい場合は、その値を選択して[Delete]、値を修正する場合は、その値を選択して、[d]に表示された値を変更してから[Mod]をクリックします。

- vi. 校正テーブルの入力が終了したら、右下の[Entry]をクリックします。すると、今入力した校正試料が新たに追加されます。

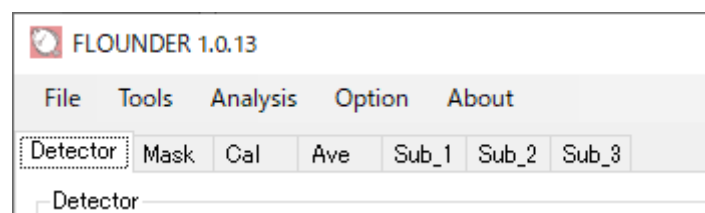
- vii. 追加の作業が完了したら右上の[Save]をクリックします。保存ファイルは同じフォルダ内にある「calibrant.xml」に上書きします。完了したら、右上の[x]でウィンドウを閉じます。ここで新たに登

録した情報は、【Calibration】のタブ内で[Load]すると有効になります。

- viii. 【Facility】タブでは、PF のビームラインと SPring-8 の BL38B1、BL45XU (2018 年 12 月で SAXS は利用停止)、BL40B2 に関して、入射 X 線強度等で散乱強度を規格化する際に必要なカウンタファイルの仕様が設定されています。



- ix. 【Detector】のタブでは、対応している検出器に関して設定されています。現在、FLOUNDERではPILATUS シリーズ (tif, cbf ファイル) のファイルフォーマットに対応しています。同じタイプの検出器であれば、ここに新たに設定することで対応することが出来ます。

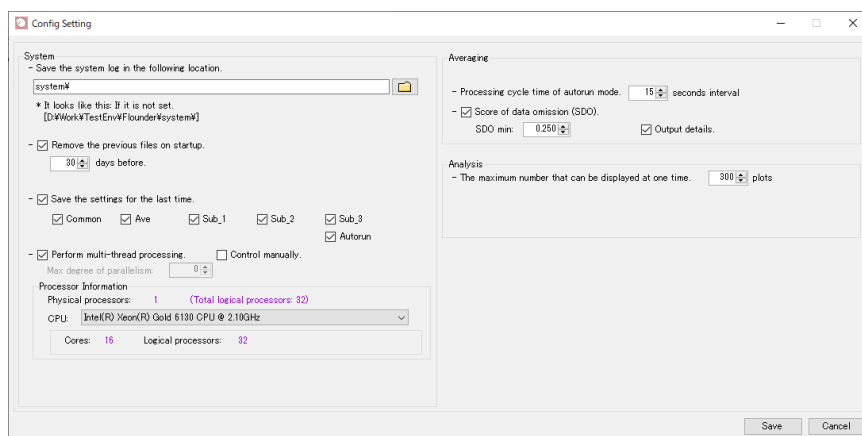


- x. FLOUNDER のメインウィンドウには 7つのタブがあります。【Detector】→【Mask】→【Cal】→【Ave】→【Sub_1】 or 【Sub_2】 or 【Sub_3】の順に進めて行くことで、順番にデータを処理することができます。また、FLOUNDER バージョン 1.0.14 以降は、ログプロットを作成可能な【Analysis】タブが別プログラムとして独立しました。([Analysis] - [AnalysisTool]から起動します。)

入射 X 線の(積分)強度(I0)や試料を透過した X 線の(積分)強度(I1)などを利用して透過率を求めるメニューは【Sub_2】、【Sub_3】タブにあります。また、入射X 線の積分強度の値には、必ずDark レベルがあります。従って、それらの値を使って散乱強度を規格化する場合は、必ずDark レベルを引く必要があります。そういった機能も【Ave】、【Sub_2】、【Sub_3】タブに実装されています。

② ConfigSetting の設定

ConfigSetting では、FLOUNDER の起動・終了時の設定、他の EXE との連動、解析時の設定など、FLOUNDER の挙動に関する設定を行うことができます。



System	- Save the system log in the following location.	システムログが出力される場所。 初期値は「system¥」
	- Remove the previous files on startup.	システムログ自動削除期間。初期値は 30 日。それ以前のシステムログは削除されます。
	- Save the settings for the last time.	前回の解析条件を保存する際に、どの情報を保存するか設定する。 保存したい項目のチェックボックスにチェックする。
	- Perform multi-thread processing.	パラレル処理をする際はチェックボックスにチェックを入れる。処理スレッド制御を手動で設定する場合は[Control manually.]にチェックを入れ、スレッド数を入力します。総論理プロセッサ数より大きい数値を設定すると警告文が表示されます。 ※大きい数値でも設定することはできます。 下の項目に現在の PC の情報が表示されますので、設定の参考にしてください。 Physical processors: 物理プロセッサ数 Total logical processors: 総論理プロセッサ数 Cores: コア数 Logical processors: 論理プロセッサ数
	- Processing cycle time of autorun mode.	Autorun 処理時の解析周期

Averaging	- Score of data omission (SDO).	WAXS の計測では、検出器の面積の都合などから、同じ円周上(ビームセンターから等距離にある円周上、つまり同じ2θもしくはQ 値)のデータとして積分可能な計測点が数点になってしまう場合があります。さらに、Mask処理などによって、解析に使用できない無効点が多数発生する場合があります。そのような状況では、例えばデータとして使える点数が激減して、その結果周辺のデータと整合性が取れない状況になるなど、問題が生じる可能性があります。そこで、以下の式に基づき、不正なデータ点をあらかじめ除外することができます。この自動判定の設定を有効にする場合は、チェックボックスにチェックを入れ、SDO_{min}に自動判定するための最小値を設定します。デフォルトは0.25です。 $SDO = \frac{(\text{全計測点数} - \text{無効点数})}{\text{全計測点数}}$ $SDO \geq SDO_{min}$: 採用 $SDO < SDO_{min}$: 除外 なお、無効点数(無効とされた点数)は、以下の2つの条件のどちらかに該当します。 ➤ Mask点数:「④Maskファイルの作成」で作成されたMask領域に含まれた点数。 ➤ Threshold点数:「⑤Uniformity補正機能」や「⑦円周平均の(1)xvii. Use Threshold」で説明されている異常なPixel値を判定する機能によって除外された点数。 以下の詳細情報を追加で出力する際は「Output details.」にもチェックを入れてください。 (出力される項目) 4 列目: 円周上のトータル強度 5 列目: 円周上の全点数 6 列目: 円周上の無効点数(Mask点数+Threshold点数) 7 列目: SDO値
-----------	---------------------------------	--

- i. ウィンドウ左上部メニューから[Option] - [ConfigSetting]を実行します。
- ii. 【System】の欄では、system ログを保存するフォルダを指定します。FLOUNDERは起動時に日付を確認し、system ログファイルを作成しています。system ログファイルは日付単位で管理され

ます。日付を跨いで稼働している場合は最初に書き込んだ system ログファイルに記録されます。system ログファイルは初期値では、FLOUNDERのフォルダ内の「system」フォルダが設定されています。変更する場合は、をクリックして指定します。system ログファイルは日付ごとに増えていきます。[Remove the previous files on startup.] にチェックを入れると起動時に確認を行い、指定した日数を超えた system ログファイルを自動的に削除します。初期設定ではログファイルは 30 日経つと消去されるように設定されています。

- iii. [Save the setting for the last time.] では前回の設定を保存する際にどの設定を保存するか指定することができます。

Common: 共通情報。

- ・Facility 情報、カウンタファイル情報、検出器情報、Conversion Factor 情報、ファイルタイプ

Ave: 【Ave】タブの円周平均処理に関する情報。

- ・Mask 情報、波長、カメラ長、ビームセンター、傾き、イメージサイズ、出力情報、規格化情報

Sub_1: Sub_1 処理に関する情報。

- ・入力情報、出力情報、処理対象ファイル情報

Sub_2: Sub_2 処理に関する情報。

- ・出力情報、 ϕ 値、Psv値

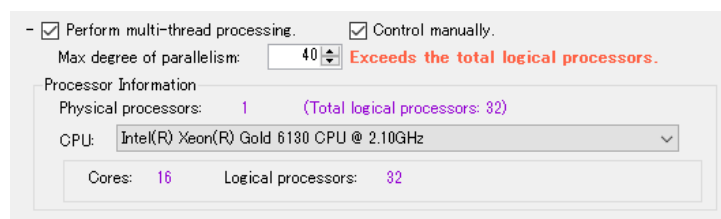
Sub_3: Sub_3 処理に関する情報。

- ・出力情報、カウンタファイル、処理対象ファイル情報

Autorun: 【Ave】タブで円周平均処理をAutorun モードで処理する際の情報。

- ・Autorun 処理モード、ピックアップ Q 値、出力情報、カウンタファイル、プリフィックス情報

- iv. [Perform multi-thread processing]ではパラレル処理をするかどうかの設定を行います。円周平均では多数のファイルを処理するため、高速化対応としてパラレル処理を実装しています。パラレル処理を行う場合はチェックボックスにチェックしてください。その際にパラレル処理時のスレッド上限をCPU が行うか、それとも手動で設定するか選択します。手動で設定する場合は、[Control manually] にチェックを入れ、スレッド上限数を設定してください。



スレッド上限数はその PC のスペックやFLOUNDER以外の他の作業等に依存します。下部に現在

のPC の情報を表示しています。その情報を参考に、スペック上限数を設定してください。

※ 論理プロセッサ数よりも大きい値を設定すると警告文が表示されますが、処理することは可能です。ですが PC に負荷をかけることになりますので、おススメはしません。

v. 【Averaging】では、

- ・ 円周平均でフォルダ自動監視機能(Autorun)を利用する場合、初期設定では 15 秒おきに処理が実行されることになっていますが、測定スピード、処理スピードに合わせて適切な時間に変更して下さい。

- ・ Score of data omission (SDO) : FLOUNDERは対象データが広角散乱のため、同一円周上(同一の 2θ 上)の一部のデータを計測して解析することになります。そのため計測される座標点が小角側より少ないため、各ピクセルで計測された強度1点の影響が相対的に大きくなります。

そのため、設定されたマスク領域の影響などから有効なデータ数が思うように計測できず、その円周上のデータの信頼性が低くなる場合があります。そうなった際に全体点数と無効点の割合でその円周のデータの有効/無効を判断する設定をすることができます。デフォルトのSDOminは0.250に設定されていますが、値を大きくするとデータを有効とする判定条件が厳しくなります。

vi. 設定が完了したら[Save]をクリックして閉じます。「The setting changes will take effect after you restart FLOUNDER.」とダイアログが出ますので、一度 FLOUNDER を再起動して設定を反映させて下さい。

③ Detector の設定

使用した検出器の種類とモデル、画像データの形式を選択します。【Mask】タブ以降の処理では、データの形式がここで設定したものに固定されます。

- i. [Name]で検出器の名前を選択し、[Model]でモデル(サイズ)を選択します。FLOUNDERではPilatusのみの選択で、PFでWAXS用として使っているモデルのみ選択できます。
- ii. [File type]で画像データの形式(拡張子)を選択します。Pilatus では tif(32bit Tiff)か cbf (crystallography binary format)になります。

Detector

Name: Pilatus (0.172 x 0.172 [mm/px]) File type: cbf

Model: 300K-W (1475x195) Width: 1475 Height: 195 [px]

Set

- iii. [Set]をクリックすると、処理の規定値として固定されます。以降の処理中に変更する場合は、【Detector】タブにて再度[Set]します。
- iv. これで完了です。【Mask】タブに移動します。

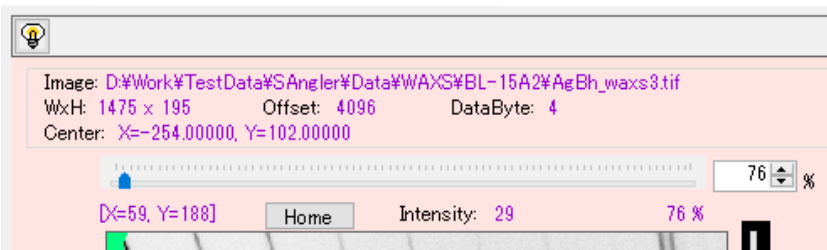
④ Mask ファイルの作成

PILATUS は、基本モジュールの100Kをモザイク状に並べて大面積化を達成しています。そのために、モジュール間には 3~5mmのGAP が存在しています。この GAP をマスクして処理することにより、継ぎ目の無いデータ同様の解析を行なうことができます。さらに、ピクセルの中には不良なものがあったり (Bad pixel)、フランジの影やデータでは無いアーティファクトな効果などもマスクする必要があります。FLOUNDERでは、マスクファイルは簡単に作成できます。

- i. まずMaskファイルを作成するために、露光したイメージを読み込みます。Maskファイル作成用に、試料無しで比較的長めに露光した空気散乱やGlassy Carbonのデータを取得することを推奨しますが、無くても構いません。無い場合は、適当なイメージを一枚読み込みます。[Image file:] で、 からイメージを選択します。ディレクトリ構成 (文字列) を直接入力 (コピーペースト) したり、ファイルを直接Drag&Dropしたりして指定することも可能です。



- ii. イメージを選択したら[Draw]をクリックします。
- iii. ウィンドウ右側にデータが表示されます。イメージの上部にはファイルの情報やピクセル数、現在設定されているビームセンターなどが表示されています。イメージの上にマウスカーソルを持ていくとイメージの左上にそのピクセルの座標と強度が明示されます (以下の状態では [X=59,Y=188]、Intensity: 29)。画像の拡大と縮小は、マウスのスクロールで操作できますが、画像上部のスライダーバー、もしくは倍率の値を直接編集することでも変更できます (最大 4000%まで)。イメージの右側と下部にその地点を中心としたラインプロファイルも表示されます。



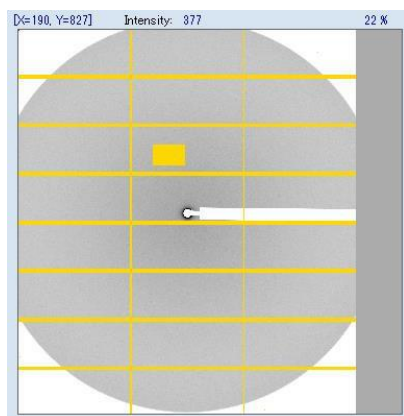
- iv.  マークをクリックすると、イメージのコントラストや明るさを調整する事ができます。[MAX]はそのイメージ内の最大カウント値、[MIN]は最小値 (ゼロ以上) を表しています。[AVE]は文字通り平均値を表していますが、この値を小さくすると表示が濃くなる、すなわち弱い散乱が見えるようになり大きくすると表示が薄くなります。[Bright]では表示の明るさを調整します。[Reversal]のチェックを外すと白黒反転します。数値を変更したら[Draw]をクリックすると表示が変更されます。

- v. 【Mask making】の欄でマスクの条件を選択します。[Less than 0]では、マイナスの値を自動的にマスクできます。PILATUS の GAP は-1、Bad pixel は-2 の値で出力されるように設定されていますので、これらをマスクしたい場合は、[Less than 0]にチェックを入れます。また、0 の値も含む場合は、(0 or less)にもチェックを入れます。マスク領域は黄色 ■ で表示されます。

※Bad pixel は、事前に設定されていれば「-2」で出力されますが、新たに生成した場合は、未設定の場合もあります。そのような pixel を見つけた場合は、0 or less にもチェックしておけば自動的にマスクできる可能性があります。

- vi. [Less than]とは逆に[Greater than]では設定した値より大きな値になっている pixel をマスクします。新たに生成したBad pixel の中には、Dead pixel (常に値がゼロになる)ではなく Hot pixel (常に非常に大きな値を出力する)になっているものもあります。そのような pixel をマスクするための機能です。発見した pixel のカウント値よりも少し小さな値を設定しておけば、その pixel を確実にマスクできます。

- vii. [Square mask]では、指定した四角形の範囲をマスクすることができます。画面の通り、四角形の左上(Start)と右下(Last)の pixel を指定します。1pixel だけを指定したい場合は、Start と Last に同じ座標を指定します。入力したら[Add]します。左側の欄に入力した内容が移ります。チェックを入れておくと適用されますが、チェックを外すと適用されません。[Set]をクリックすると入力した内容が確定し、Mask領域として設定されます。

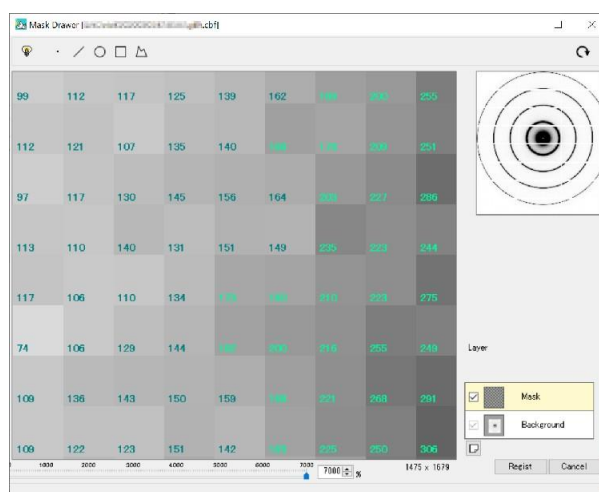


左図で、中央付近にある四角形のマスクは、(vi)で入力したテストの領域です。以下の(viii)の(5)で消去してみます。

※ここから先は、SAnalerを例に紹介していますが、FLOUNDERも基本的な機能は同じです。

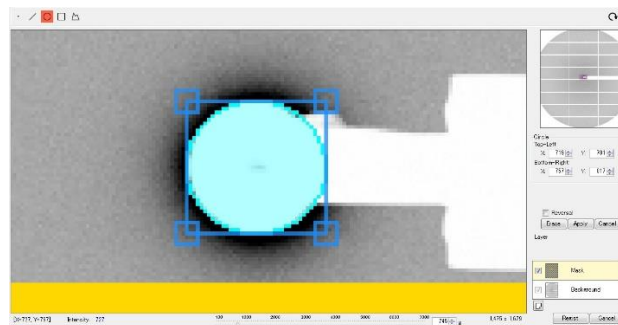
viii. 丸形や多角形(ポリゴン)のマスクを作成するためには、[Drawing]をクリックします。クリックするとMask drawer ウィンドウが新たに開きます。ウィンドウ内の画像データ上にマスクしたい領域を描画することで、色々な形状のマスクを作成することができます。画像は原寸で表示されていますが、マウスを左クリックしながらドラッグすることで表示領域を変更し、スクロールで拡大することができます。機能をまとめると、以下のようになります。

- ・ 点、線、円、四角形、多角形の範囲を描画して、その領域をマスクできます。
- ・ 円、四角形、多角形の範囲を描画して[Reversal]にチェックを入れると、マスク領域を反転させる(描画した領域以外をマスクする)ことができます。
- ・ 下部に表示されているスライダーバーを操作する、または直接数値を指定することで表示する倍率を変更することができます。(50～7000%まで)
最大倍率で表示すると、各セルの強度が表示されます。

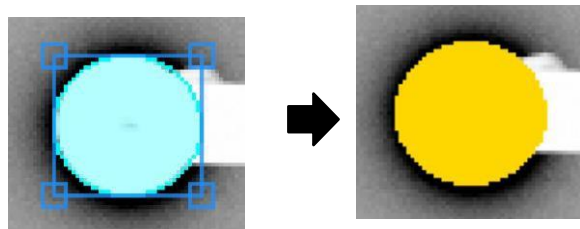


以下に、マスクの作成手順を説明します。GAP や Bad pixel などは別にマスクできますので、ここではビームストッパーの影をマスクするようにしてみます。

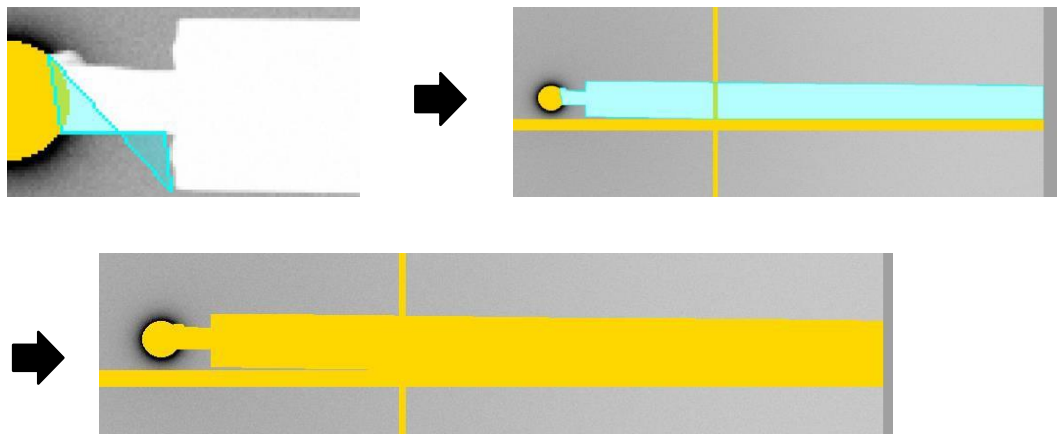
- (1) まず、ビーム中心付近をマウスのスクロールで拡大し、丸形の影をマスクします。ウィンドウ左上の○をクリックして、データの上で描画します。



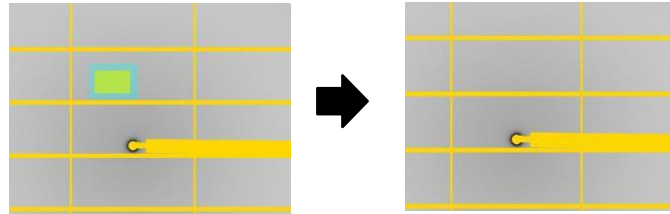
- (2) 円に外接する四角形の4つの角はクリックして移動させることができます。ここを動かしながら円のサイズや形を微調します。また、ウィンドウ右側にある[Circle]というメニューでも、Top - Left(左上)と Bottom - Right(右下)の座標を矢印キーで変更すれば同様に微調できます(値を直接入力した場合は、[Enter]を押すと適用されます)。完了したら[Apply]を押します。マスク領域が黄色になって適用されます。



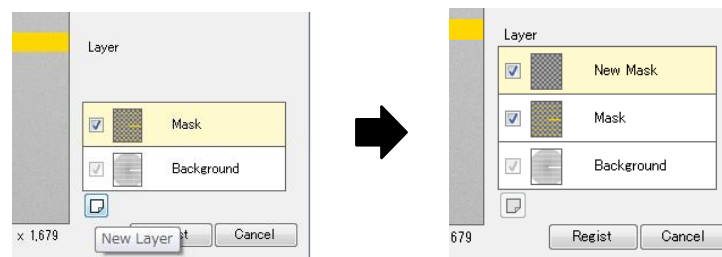
- (3) 完了したら、赤い背景になっている○のマークを再度クリックすると、描画モードが終了し、画像データを動かせるようになります。
- (4) 続いて、ビームストッパーの柄の部分が多角形でマスクしていきます。多角形のマークをクリックして、多角形の頂点に当るピクセルを順番にクリックしていきます。画像を拡大すると、ストッパーの柄の根本側が表示範囲に入っていない。ウィンドウ右上に画像データのサブウィンドウがありますが、表示範囲は紫色で表示されています。マスク描画中は、この紫色の表示範囲をドラッグして動かすことで、表示範囲を変更する事ができます。完了したら[Apply]をクリックして確定します。



- (5) 作成したマスクを消したい場合は、黄色で示されているマスク領域を、同じように描画して [Erase]します。例えば、(vii)の所でテスト的に作成した四角形のマスクを消すためには、ウィンドウ左上の口をクリックして、消したい領域を覆うように四角形を作成します。そこで、ウィンドウ右側の[Erase]をクリックすると、消すことができます。

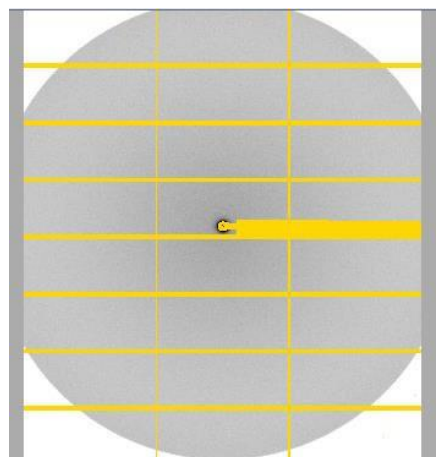


一方で、一度作成したマスク領域を消去する際に、消したくないマスク領域も一緒に消してしまうことがあります。例えば、上の図では、格子状に設定された GAP のマスク領域とビームストッパーのマスク領域が重なっているため、ビームストッパーの部分だけ消すのはかなり難しい作業となります。現在、この Mask Drawer では、Layer を 1 層追加することができますので、それまでの作業状態を変えないように、次に追加するマスク領域を別レイヤーで設定することができます。レイヤーの追加は、[New Layer 追加ボタン]をクリックします。[New Mask]が追加されますので、そこに新たにマスク領域を作成することができます。また、チェックを外すと、新たに作成したマスク領域を適用除外することもできます。

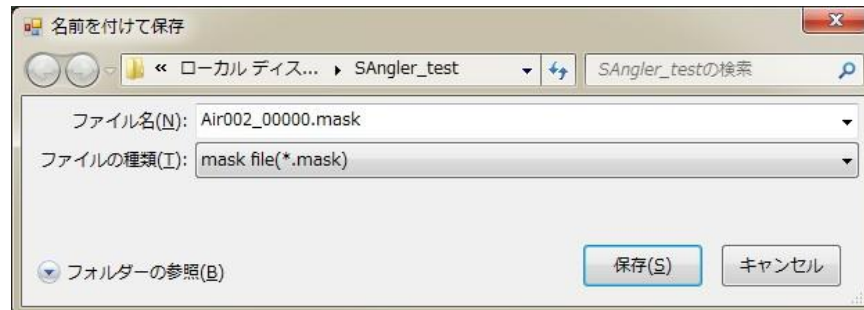


- (6) 全ての作業が完了したら、[Regist]をクリックします。Regist すると、先程作成した Layer 層も全て一体化されます。

- ix. 設定が終わったら[Set]をクリックするとイメージ上に適用され、黄色で表示されます



- x. 設定が完了したら、[Save]をクリックして Mask ファイルを保存します。ファイルの拡張子は自動的に「mask」となります。保存すると表示が黄色から緑色に変更され、保存した Mask ファイルは今後の処理で自動的に適用されます。ソフトをいったん終了させたり、別の PC で処理したりする場合でも、以前に保存した Mask ファイルを読み込めば、同じ条件で処理することが出来ます。



⑤ Uniformity 補正機能

※(注意)この機能を利用するためには、先に【Calibration】タブでカメラ長やビームセンター位置を校正し、「Cal ファイル」を保存しておく方を推奨します。従って、「④ Mask ファイルの作成」の作業で基本の Mask ファイルを保存し、先に「⑥ ビームセンターとカメラ長の校正 (Calibration)」を実行して cal ファイルを作成してから、再度【Mask】タブに戻って実行するようにして下さい。

また、この機能を利用するためには、事前に画像データの解析に使用しない領域に関して、適切にマスクされていることが必須です。例えば、PILATUS検出器の格子状のGAP、システム側で設定済みの Dead pixel、ビームストッパーの影、広角側に見られる真空フランジの外側(つまり計測圏外)といった領域は、適切にマスクをお願いします。

Dead Pixel や Hot Pixel は値の大小が明確なため、処理から除外するようにマスクするのは比較的容易ですが、「周りよりも常に少し大きい／小さい値を出力している」といったような異常な Pixel を発見するのは容易ではありません。この機能では、円周平均時にその様な Pixel を発見してマスクに追加することができます。円周平均では、ビームセンターから等距離にある多数の Pixel の値から平均値を求めますが、本来その値はいわゆる一定のノイズレベルの範囲に収まっているはずですが、仮に異常なピクセルがあった場合は、そのノイズレベルを超えて値が変動していると想定されます。そこで、平均値に対する Threshold(閾値)を設定し、変動が大きいピクセルを発見してマスクに追加します。その結果、円周平均時の値の変動を抑える(誤差を抑制する)効果があります。



※Pixel の正常 or 異常の判定は、同じ円周上の点の平均値を計算し、平均値と各点の差(偏差)を標準偏差で割った値A に対して設定した Threshold を基準に、以下の関係式で判断します。

$$A = \{ (\text{Pixel 値}) - (\text{平均値}) \} / \text{標準偏差}$$

$A \leq \text{Threshold}$: 正 常

$A > \text{Threshold}$: 異 常

- i. 空気散乱や Glassy Carbon 等の標準的な試料が読み込まれた状態で[Uniformity]ボタンをクリックすると、別プログラム「Azimuthal Intensity Histogram.exe」が起動します。
※起動時に設定ファイル「az_config.xml」を読み込みます。読み込みに失敗すると起動しません。
- ii. FLOUNDERでマスクファイルが指定されていた場合、[Mask:]初期値として自動入力されます。
- iii. [Image:]に画像データ(Glassy Carbon や空気散乱のデータ等)を指定します。同一条件で計測した同一試料(状態)の複数のファイルを一度に指定できます。複数のファイルを指定した場合は積

分データでの解析となります(合算データの方が異常判定が明確なため、同一条件での複数ファイルの読み込みを推奨します)。

- iv. [cal:]には Calibration ファイル(cal ファイル)を指定すると、解析条件(円周平均の条件)が自動で設定されます。cal ファイルがない場合は手動で入力してください。
- v. [Threshold]を入力し、[Start]ボタンをクリックします(初期値では 3.0になっています。[Options] - [Setting]より変更できます)。計算が終了すると、結果が表示されます。Threshold は、3.0 より小さくすると条件が厳しくなり異常判定される Pixel が増えます。

- vi. Threshold のみ変更する場合は、値を編集して[Set]ボタンをクリックします。

※[Start]と[Set]の違い

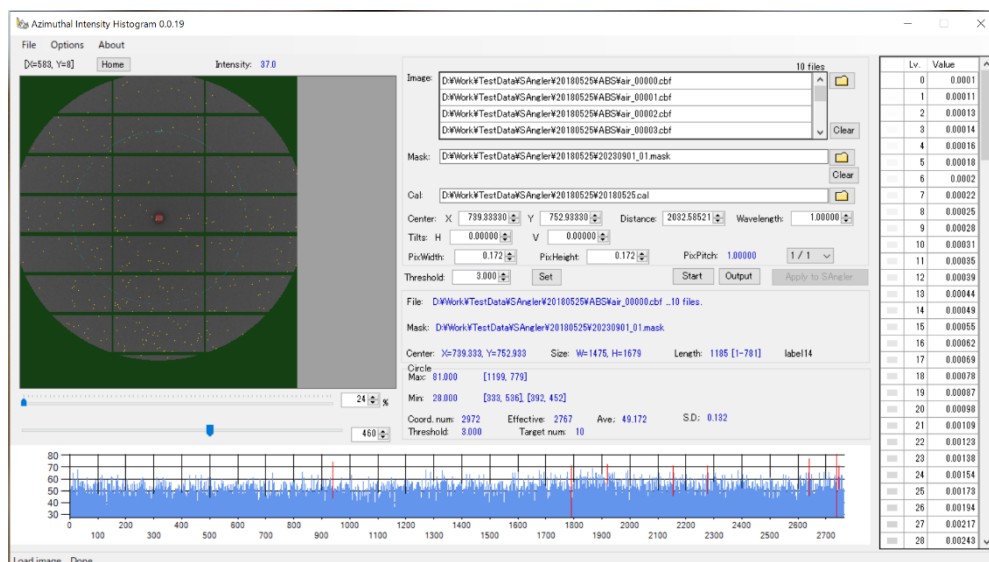
[Start]ボタンは入力された解析条件をもとに円周上の座標を計算し、その後ヒストグラムデータを作成、正常／異常の判断を行うため時間がかかります。

⇒使用する画像ファイルや解析条件、マスクファイルを変更して解析をやり直す場合は、[Start]をクリック。

[Set]ボタンは円周上の座標データ、ヒストグラムデータは直前に実行した結果を使用し、正常／異常の判断のみを行います。

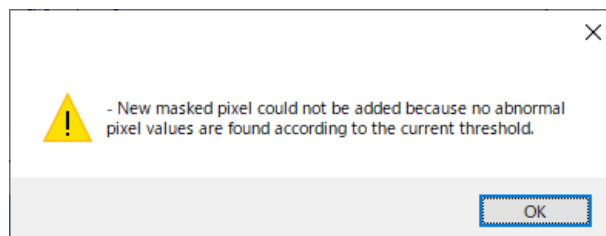
⇒Threshold 値だけを変更して正常/異常の判定だけをやり直す場合は、[Set]をクリック。

- vii. ウィンドウ左側には読み込まれた画像データ(複数ファイルの場合は積分後のデータ)が表示されています。濃い緑色 ■ の領域は、事前に読み込まれた Mask領域が示されています。画像データの拡大縮小は、マウスのスクロールか画像下のスライダー(%表示)で変更できます(最大 7000%、最小はシステムにより変動、全体が表示されるよう調整されています)。また、左ドラッグして画像を移動させることもできます。ビームセンターは赤十字で示されていますが、それに対して薄い緑色 ■ の円は、ビームセンターから等距離にある円周を示しています。円周の位置は、下段側のスライダーで変更することができます。右側に示されている数値は、要は何点目のデータであるかを表わしています。画像データ内に見える黄色 ■ の Pixel が、Threshold を基に異常と判定されたPixel です。
- viii. ウィンドウ下部のグラフは、各円周上にあるデータを 1 次元プロットとして表示したものです。円周を構成する点数の違いで、X 軸の点数は変動します。各 Pixel の値が棒グラフで表わされていますが、下図のように赤色で表示されているのが Threshold を超えた点で、左上の画像データ上では黄色で示された Pixel です。棒グラフの上の【Circle】欄には、この円周上のデータのまとめが表示されています。その中で、[Target num]は Threshold を超えたPixel 数を表わしています。
- ix. vii. viii. で示されるデータの状況を確認しながら、Threshold を変更して、Mask すべき領域を検討します。



Circle	円周上の情報。円周上の点の最大値・最小値、平均値、標準偏差値、Threshold 値、円周上の実際の点数、有効点数、しきい値にヒットした点数。
画面	右のカラーテーブルに則って色付けされている。しきい値にヒットした点は黄色で表示される。
上トラックバー	画像スケール
下トラックバー	円周
ヒストグラム	円周上のゼロ度に当たる点から反時計回りに強度をグラフ化。しきい値にヒットした場所は赤で表示。

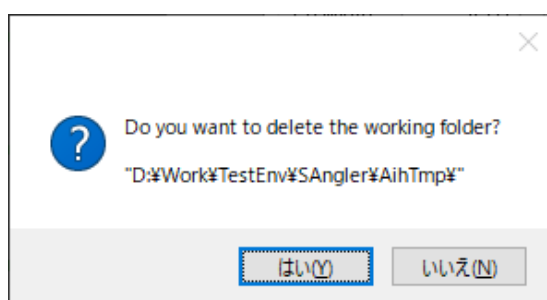
- x. 設定した Threshold によって正常/異常の判定が有効に実施できた場合は、異常ピクセルを新たにマスクデータとして出力することが出来ます。[Output]ボタンをクリックすると「Save mask data?」と聞かれるので、「はい」を選択します。新たにマスクされた座標が一点もない場合は警告文が表示されます。



- xi. 今までのマスクファイルに上書きする場合は、ファイル名を変更せずに[保存]をクリック。新たにマスクファイルを作成する場合は、新規にファイル名を入力して保存する。
- xii. 保存が完了すると、「Do you want to update to the latest Information?」とマスクを最新データにするか確認メッセージボックスが表示されます。更新する場合は[はい]を、そのまま処理を継続する場合は[いいえ]を選択します。

る場合は[いいえ]を選択してください。更新には多少時間が掛かります。

- xiii. マスクファイルを更新(上書き)や新規作成すると、[Output]ボタン横の[Apply to FLOUNDER]ボタンが有効になります。最新のマスクファイルを FLOUNDER にも読み込ませる場合は、[Apply to FLOUNDER] ボタンをクリックしてください。確認のダイアログが出ますので、[はい]をクリックします。
- xiv. これで処理は完了です。終了させるには、[File] - [Close]もしくは Window 右上の[x]をクリックして下さい。なお、新しい Mask 情報を保存せずに終了させようとした場合は、FLOUNDERに最新のマスク情報を反映させるかどうか確認のメッセージが表示されます。[はい]を選択すると保存画面に映ります。続いて、「Do you want to delete the working folder ?」と作業用フォルダを消すかどうか確認されます。基本的には削除して構いませんが、処理でエラーが出た場合等残しておいて頂き、ソフトウェア開発者に連絡頂ければと思います。Window が閉じると、FLOUNDERに最新のマスクファイルが読み込まれています。



- xv. 更新したマスクファイルをFLOUNDER に適用しない場合は、[Apply to FLOUNDER]を押さずに、Windowを終了させて下さい。更新するかどうかダイアログが表示されますが、[いいえ]を選択して下さい。

⑥ ビームセンターとカメラ長の校正 (Calibration)

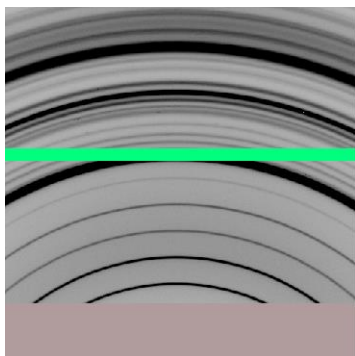
ベヘン酸銀などの粉末回折データなどを使用してビームセンターとカメラ長の校正を行ないます。WAXSの計測ではビームセンターが検出器のイメージ内にありません。また、PFのWAXSチャンバの場合は、試料から距離をおいて(カメラ長)、検出器が傾いて配置されています。そのため、SAnGlerでの処理とは異なり、各ビームラインのテンプレートとなるcalファイルを読み込んでから、校正を進める流れになります。

※重要

- WAXSのCalibrationには、十分な統計精度を持つ標準データが必要です。例えば、ベヘン酸銀をSAXSとWAXSで同時計測した場合、SAXS側では強い散乱強度が得られるため1～数秒の露光で十分ですが、WAXS側は全く不足しています。WAXS側では最低でも180秒程度の露光が必要です。十分なS/Nを持つデータを使用しないと、(1) xiv.で説明している一致度の判定結果(Match)が改善しません。Matchが80%を超えず自動校正がうまく行かない場合は、露光時間を変更して再度測定し直して下さい。
- 試料を封入したワッシャーのビームに対するポジションが悪く、WAXSデータの一部の領域が欠けていたりする様な場合もあります。校正に使用するWAXSデータに関しては、計測後にViewer上で必ず確認するようにして下さい。
- セリアなどを利用する場合でも、測定PC上のImage Viewerで1秒露光のLiveモードで観測された最大強度を基に、数万カウントレベルの最大強度が得られるような露光時間を見積もって測定します。

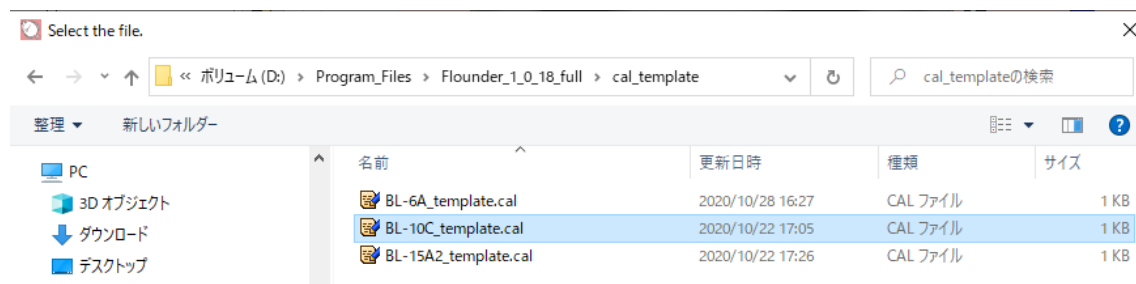
(1) テンプレートファイルを用いた校正手順

- i. [Setting]欄では、[Mask file:]に先程作成したファイルが設定されているか確認します。(以前に保存しておいたファイルを設定する場合は、 をクリックして読み込みます。直接Drag&Dropで指定することもできます。)

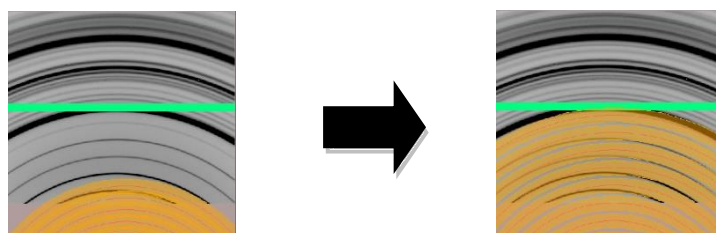


- ii. [Image file:]に Calibration に使用するイメージファイルを  から選択します。
- iii. 選択したら[Draw]をクリックして、そのファイルを表示させます。
- iv. 表示が薄くて見えない場合は  マークをクリックして、[AVE]を 500、[Bright]を 200 のように設定してリングパターンが見える様にします。
- v. [Calibration file] で、[File]をクリックし、テンプレートとなるファイルを読み込みます。クリックすると

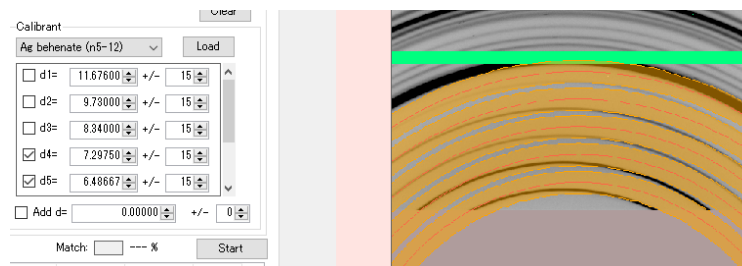
Windowsのファイル選択ウィンドウが開きますので、FLOUNDERの起動フォルダの中の「cal_template」フォルダに移動します。フォルダ内にはBL-6A, 10C, 15A2の3つのビームライン用のテンプレートとなるcalファイルがあるので、測定したビームラインのファイルを選択して開きます。上のデータは、BL-10CのPILATUS 200Kのデータのため、“BL-10C_template.cal”ファイルを選択します。なお、ファイルをこの欄にDrag&Dropして指定することもできます。



- vi. ファイルからビームセンター、測定波長、カメラ長、検出器の傾斜角度などの値が読み込まれます。ここで、[Calibrant]には自動的に「Ag behenate (n5-12)」のデータが読み込まれていますが、他の2つ、さらには自分で登録した校正試料がある場合はプルダウンメニューから変更します。もし、[Option] - [ConfigCustom]で新たに追加した試料が表示されない場合は、[Load]ボタンをクリックして情報を更新します。まず、[Display]にチェックを入れると、読み込まれた値で計算されたPredictionが表示されます。測定波長が異なる場合は、全く違う位置にPredictionが表示されるので、まず、Wavelengthの値を正しい値に変更し、[Redraw]ボタンをクリックします。すると、それなりに近い位置にPredictionが表示されます。

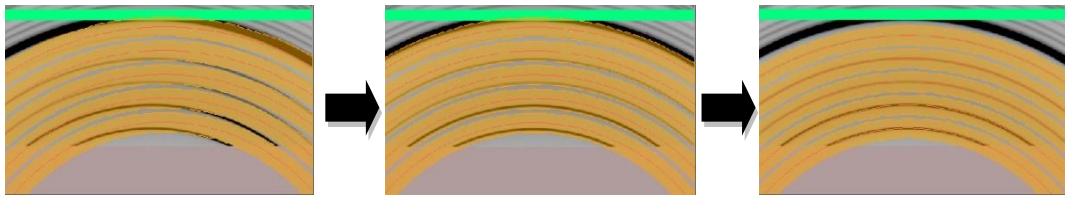


- vii. 上のデータはベヘン酸銀ですが、検出器の中央付近に計測されている高強度の回折パターン(2つの近接したパターンなので高強度に見える)の小角側にベヘン酸銀の面間隔dと次数に応じたパターンが計測されます。高強度の回折パターンのすぐ内側に計測されている、少し薄いリングパターンが12次の回折になります。上のデータでは、12次から8次までのパターンが記録されていますので、[Calibrant]では、d1~d3、すなわち5次~7次(n5~n7)のチェックを外します。再度[Redraw]ボタンをクリックすれば、5次~7次のPredictionが消えます。



- viii. Predictionと実測のリングパターンがまだずれている場合は、ビームセンターの座標(X, Y)やカメラ長を変更します。カメラ長はWAXSチャンバと試料ホルダーとの距離によって変わってしまいます。このBL-10CのPILATUS 200Kのデータでは、まず水平方向を合わせるためにビームセンターのX座標を調整します。さらに、鉛直方向にもずれているので、カメラ長を変えてみます。その結果、Predictionと実測のリングパターンがほとんど重なりました。事前調整としては、これで十分です。基本的には実

測のリングパターンが、Predictionリングの調整範囲(Predictionリングから ± 15 pixelの範囲。オレンジ色の帯で表示した範囲。)の中にいれば、後は自動校正によって合わせることができます。



- ix. [Refine BeamCenter] と[Refine Wavelength or Camera distance]にチェックを入れます。測定波長とカメラ長の校正は排他的に行ないますが、波長はビームラインで調整されているため、基本はCamera distanceにチェックを入れます。[Refine Tilts]では、ビームに対する検出器の傾きを補正しますが、まずはテンプレートから読込んだ角度で合わせることにして、チェックを外しておきます(あくまでお勧めの手順なので、最初からチェックしても問題はありません)。
- x. [Num sectors]では、Calibration を実行する際に、リングパターン全周360度分を何分割して一致度を評価するか指定します。FLOUNDERでは初期設定は360になっています。つまり、1度毎に実測値とPredictionリングの一致度を評価します。WAXSでは計測領域が検出器面積から制限されますので、SAngrerのデフォルトの60(つまり6度毎)より分割数が大きくなっています。

☒ Refine BeamCenter
X Y [px]

☒ Refine Wavelength or Camera distance
* Choose the value you want to refine.
☐ Wavelength [Å]
☒ Camera distance [mm]

☐ Refine Tilts
H V [degree]

☒ SurveyPoint ☒ Display

Calibrant

Ag behenate (n5-12)

☒ d1= +/-
☒ d2= +/-
☒ d3= +/-
☒ d4= +/-
☒ d5= +/-
☐ Add d= +/-

History Num sectors Match: %

- xi. 準備が出来たら、[Start]をクリックします。ダイアログが表示されますので実行する場合は[はい]をクリックします。計算は直ぐに終了し、校正された値が赤字で表示されます。

☒ Refine BeamCenter
X Y [px]

☒ Refine Wavelength or Camera distance
* Choose the value you want to refine.
☐ Wavelength [Å]
☒ Camera distance [mm]

☐ Refine Tilts
H V [degree]

☒ SurveyPoint ☒ Display

- xii. 計算結果の履歴が表に記録されます。また、各次数の実

History

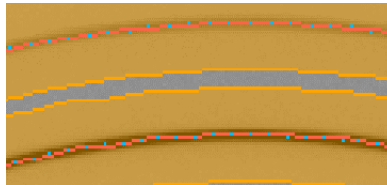
Num sectors

Match: %

No	CenterX	CenterY	Wavelength	Distance	Horizontal	Vertical	Match
01	236.90560	682.22800	1.50000	252.22988	0.00000	19.90000	77.2

測リングとキャリブレーションの結果得られた Prediction リングの一致度を[Match]で表しています。具体的には、(x.)の説明通り、それぞれのリングを[Num sectors]で指定した数に分割して、その位置での一致度を表しています。

- xiii. [Survey Point]にチェックを入れておくと、画像データ上の実測リング上に(FLOUNDERのデフォルト設定は360なので)1度単位で、以下の様に該当ピクセルが水色で表示されます(計算後であれば、チェックを入れて[Redraw]をクリックすると表示されます)。



- xiv. Matchは、80%以上一致すると緑色 ■ に、50～79%では黄色 ■ に、50%未満では赤色 ■ に表示されます。基本的には緑色に表示されるまで計算を繰り返し実施します。FLOUNDERでの校正では、値が上がったり下がったり多少変動することがあります。まずは、[Refine Tilts]のチェックを入れずに、最もMatchの値が良くなる場所を探してみます。一方で、計算を繰り返していくと、どんどん悪くなっていく場合もあります。その場合は、履歴の表の所で、戻したい値(行)を選択して[Set]をクリックするか、その行をマウスの左でダブルクリックすることで、その時の値に戻せます。[Clear]をクリックすると、履歴を全て削除できます。

History		Num sectors		360		Match: 88.4 %		Start	
No	CenterX	CenterY	Wavelength	Distance	Horizontal	Vertical	Match		
15	235.93750	682.18370	1.50000	252.17177	0.00000	19.90000	88.0		
16	235.90950	682.10180	1.50000	252.13223	0.00000	19.90000	87.0		
17	235.88600	682.14650	1.50000	252.18195	0.00000	19.90000	88.4		

Clear Set

- xv. これ以上は良くなないと判断したら、[Refine Tilts]にチェックを入れて、校正を続けます。カメラ長やビームセンターがテンプレートと変わってれば、当然検出器の設置角度も変動しますので、Tiltsの調整で最適化されます。繰り返し実行していると、良くなったり悪くなったり多少ふらつくと思いますが、その中で最も良かった時の結果をHistoryから選択して[Set]ボタンをクリックすれば、その値にセットされます。

☒ Refine BeamCenter
X 235.71890 Y 683.37760 [px]

☒ Refine Wavelength or Camera distance
* Choose the value you want to refine.
☐ Wavelength [A] 1.50000
☒ Camera distance [mm] 252.75770

☒ Refine Tilts
H -2.07133 V 20.57667 [degree]

☒ SurveyPoint ☒ Display

Calibrant

Ag behenate (n5-12)

☐ d1= 11.67600 +/- 15
☐ d2= 9.73000 +/- 15
☐ d3= 8.34000 +/- 15
☒ d4= 7.29750 +/- 15
☒ d5= 6.48667 +/- 15
☐ Add d= 0.00000 +/- 0

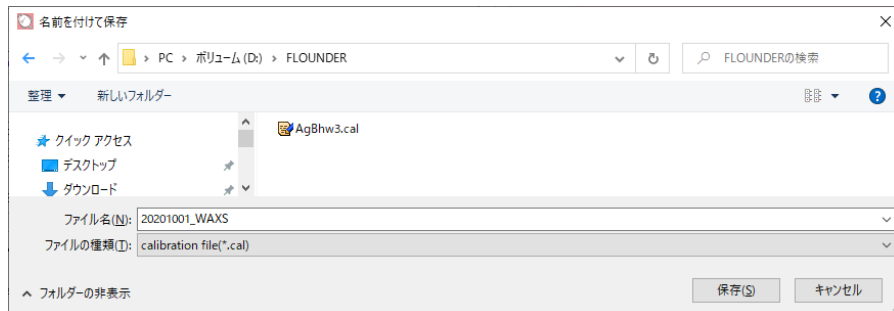
History		Num sectors		360		Match: --- %		Start	
No	CenterX	CenterY	Wavelength	Distance	Horizontal	Vertical	Match		
22	235.75260	683.20450	1.50000	252.65739	-2.36467	20.55733	91.0		
23	235.71890	683.37760	1.50000	252.75770	-2.07133	20.57667	91.3		
24	235.68130	683.44990	1.50000	252.78413	-2.97800	20.97000	90.7		

Clear Set

- xvi. 色々値を変えてやり直してみても、80%を超えない場合もあると思いますが、その原因は単純に

計測したリングパターンのS/Nが悪いことがほとんどです。つまり、「露光時間が不足している」ことが原因です。うまく行かない場合は、再度露光時間を延ばして再測定してみてください。

- xvii. Calibrationが終了したら、[Save]をクリックして結果を保存します。クリックするとダイアログが表示されるので、[はい]を選ぶと「名前を付けて保存」のウィンドウが開きます。保存するフォルダを指定して、名前付けて保存します。ファイルの拡張子は自動的に「cal」となります。ソフトをいったん終了させたり、別のPCで処理したりする場合でも、以前に保存したcalファイルを読み込めば、同じ条件で処理することが出来ます。



- xviii. これでCalibrationの処理は終了です。【Ave】タブに移動します。

(2) 任意の設定パラメータによる校正

- i. PFでは、(1)で説明したテンプレートファイルを使った校正を行なう方が簡単ですが、例えば他施設などでも、PFのような配置でWAXS測定した場合は、現状PILATUS検出器であればFLOUNDERで校正処理を行なうことが可能です。基本的には(1)と同じ手順で、ただし、ビームセンターのX、Y座標、波長、カメラ長、検出器の設置角度などをマニュアルで入力します。これらの値はその施設のスタッフに相談頂くか、御自身で見積もって頂き入力します。Predictionのリングと実測のリングの一致状況を見ながら、まずは手動で調整すると良いでしょう。(1)ix.以降の手順は基本同じです。[Use Mask data]にチェックが入っており、先程作成したMASKファイルが選択されているのを確認する。以前に処理したMASKファイルを読み込む場合は、 をクリックして指定します。直接編集や対象ファイルを Drag&Drop することも可能です。

⑦ 円周平均 (Average)

キャリブレーションの結果に基づいて、円周平均を実施します。円周平均では、基本的に2つのモードがあります。

(1) 測定したデータを順番に指定して処理する場合

- i. [Input]の箇所で[Data path]に、 をクリックして画像データが保存されているディレクトリを指定します。この欄は、直接編集することも可能です。
- ii. [Use Mask data]にチェックが入っており、先程作成したMASKファイルが選択されているのを確認する。以前に処理した MASKファイルを読み込む場合は、 をクリックして指定します。直接編集や対象ファイルを Drag&Drop することも可能です。



- iii. [Output]の項目を設定します。[Data Path:]に円周平均したファイルを出力するディレクトリを指定します。[Input]と同様に  を押して指定するか、直接編集、または Drag&Drop で設定します。
- iv. データの横軸 (1st Column)をどの単位で出力するか指定します。
 $Q (=4\pi\sin\theta/\lambda)$ [$\text{\AA}^{-1}$]、 Q [nm^{-1}]、 $S (=2\sin\theta/\lambda)$ [$\text{\AA}^{-1}$]、 S [nm^{-1}]、 d [$\text{\AA}$]、 d [nm]、 2θ [degree]、 r [mm] (ビームセンターからの距離)
- v. [Pixel pitch]では、横軸データの間隔を変更できます。PILATUSであればピクセルサイズは $0.172 \times 0.172 \text{ mm}$ のため、デフォルトの設定ではデータは 0.172mm 間隔で出力されます。ここではピクセルサイズを基準に分割し、もっと細かい間隔のデータを出力するように設定できます。「1/1」はデフォルトのままで、「1/2」、「1/4」、「1/5」を選択すれば、そのピッチでデータが出力されます。結果として測定点を増やすことができますが、細かくしすぎると S/N が悪化する可能性があります。出力されたデータを確認して、適切な分割数を選択して下さい。

Output

Data path: D:\temp2\test_data2\Ferritin_test\Cir Ave

1st Column: Q [A-1] Pixel pitch: 0.172 [mm/px] * 0.50000 1/2

☒ Normalize

☐ Use input factor: $I(\text{export}) = I(\text{ORG}) / 1.0000000$

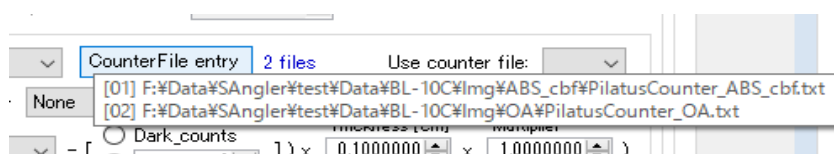
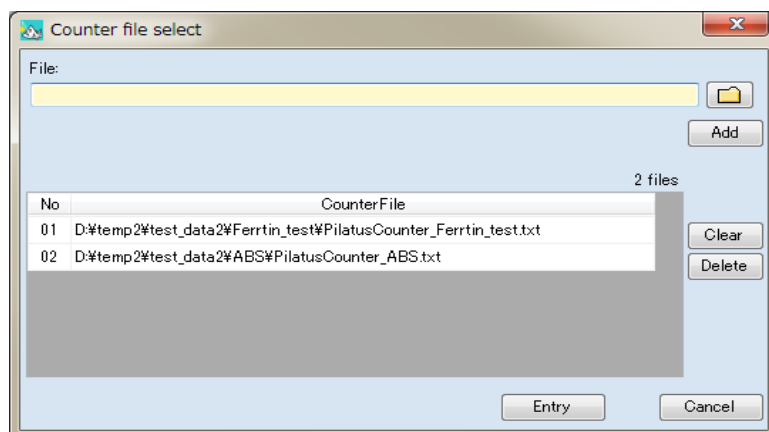
☒ Use file:

Facility: PF CounterFile entry 2 files Use counter file: 01

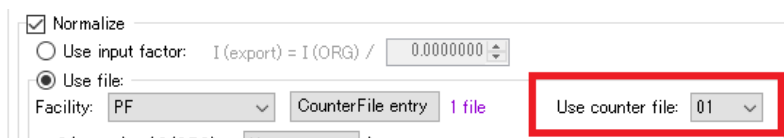
$I(\text{export}) = (I(\text{ORG}) - \text{None}) / ((\text{C2} - [\text{Dark_counts}]) \times 0.1000000 \times 1.0000000)$

Type	File	Num	CounterFile	Average
Dark	Entry	0		---

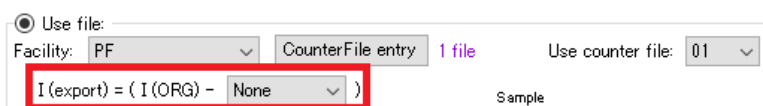
- vi. 散乱強度を入射X線強度等で規格化する場合は、[Normalize]にチェックを入れます。散乱強度を特定の値で規格化する場合は、[Use input factor]に値を入力します。
- vii. 入射X線の(積分)強度等の値を使って規格化する場合は、画像データとは別に強度の値が出力されているカウンタ値のログファイルを指定して読み込みます。まず、[Facility]を選択します。FLOUNDERは、PF と SPring-8 の BL38B1、BL45XU(2018 年 12 月で SAXS 終了)、40B2 のカウンタファイルの形式に対応していますが、WAXSは基本PFのみと考えます。
- viii. 次に、[Counter File entry]で、使用するカウンタファイルを設定します。クリックすると [Counter file select] ダイアログが開きます。📁 をクリックしてカウンタファイルを選択し、その後[Add]ボタンを押すと、ダイアログ下側のリスト欄に移ります。このリスト欄にファイルを直接 Drag&Drop することも可能です。一方で、1次元化を行ないたいデータに対応するカウンタファイルが複数存在する場合は、複数個のカウンタファイルを指定することができます。例えば、実際の処理をしたいデータに対応したカウンタファイルと、(xiv)で説明する実験前に計測しておいたダークレベルに対応するカウンタファイルが異なる場合は、そのファイルをそれぞれ読み込んでおくことになります。カウンタファイルは読み込んだ順番に番号が設定されますので、後の設定ではこの番号で指定します。このマニュアルでは「01」が実際のデータに対応するカウンタファイルで、「02」がダークレベルを計測した際のカウンタファイルになっています。なお、[Counter File entry]ボタンにマウスカーソルを合わせると、登録されているカウンタファイルの情報が 30 秒間ポップアップされます。設定が完了したら[Entry]をクリックして閉じます。



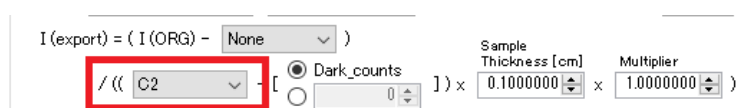
- ix. [Use counter file:]にて、1 次元化を行なうデータに対応したカウンタファイルを選択します。(viii)では複数のカウンタファイルを設定することが可能ですが、その中の何番なのか指定します。このマニュアルでは「01」が実際のデータに対応したカウンタファイルなので、プルダウンから「01」を選択します。



- x. 続いては実際に規格化しながら円周平均を行なうための式が記されています。その式の各欄を選択しながら入力していきます。まず式の上側(いわゆる分子側)は、散乱強度を円周平均する際に検出器のダークレベルを引くかどうかを設定します。PILATUS はダークレベルが無いため引く必要がありません。従って、[None]のままです。



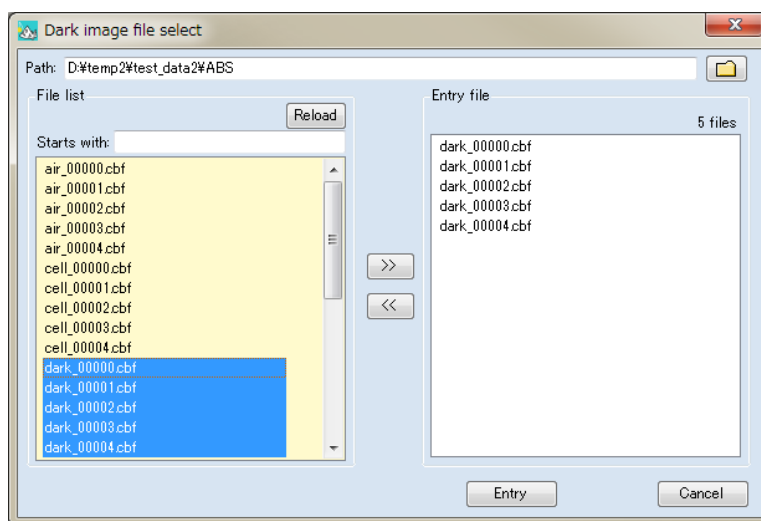
- xi. 次に式の下側(いわゆる分母側)を設定します。まず、カウンタファイルに記録されているどのチャンネルの値で規格化するか選択します。PFの場合は、C2が試料前のマイクロイオンチャンバで計測した値、C3が試料後にもマイクロイオンチャンバを設置して計測した値、C4がダイレクトビームストッパに埋め込まれている Si PIN フォトダイオードの値です。



- xii. PFでは、このカウンタの値にダークレベル(ダークカウント)が存在します。つまり、X線が無い状態でも計測すれば値はゼロではありません。これは低いカウント領域でもデータの直線性を担保するために、計測機器をそのように設定して使用しているためです(各施設、各ビームラインの状況は担当者に確認して下さい)。そのため(xi)で指定したチャンネルの値で規格化するためには、そのチャンネルのダークカウントを引く必要があります。そこで、「ビームラインのシャッターを閉じた状態で、実際のデータと同じ露光時間でダークイメージを計測し、その際のダークカウントの値を計算に使用する」ように設定します。そのためには[Dark_counts]を選択します。もし、特定の値をダークカウントとして引く場合は、ラジオボタンを切替えて、そこに値を入力します。

$$I(\text{export}) = (I(\text{ORG}) - \text{None}) / ((\text{C2} - [\text{Dark_counts}]) \times 0.1000000 \times 1.0000000)$$

- xiii. [Dark_counts]を設定した場合は、その下の表で実際のダークイメージと、それに対応するカウンタファイルの番号を指定します。[Entry]をクリックすると、計測したダークイメージを選択するダイアログが開きます。[Path:]にダークイメージのあるディレクトリを指定するために、 を押すか直接編集します。パス欄にディレクトリを入力した状態にして[Reload]をクリックすると、左側にそのディレクトリ内のイメージデータが全て表示されますので、ダークイメージを複数枚同時に選択します(1枚でも可)。例えば、[ctrl]キーを押しながら複数枚クリックして選択も出来ますし、単にマウスでクリックしながらドラッグすれば複数枚選択できます。[Starts with:]はフィルターの機能で、ファイル名の頭から他のファイルを排除できる文字列を入力すると、特定のデータセットだけを表示させる事ができます。その状態で[ctrl + A]を押せば全選択できます。 をクリックするとファイルが右側に移り確定します。なお、[Entry file]側のリストを選択し、[Enter]キーまたは[Delete]キーを押すか、 ボタンを押せば Entry 側から削除することができます。作業を完了したら、[Entry] をクリックしてダイアログを閉じます。



- xiv. このダークイメージに対応するカウンタファイルを指定します。(viii)ですすでに設定しているので、ここではプルダウンから「02」を選択します(未選択の状態ですとこの欄は「赤色」で表示されていま

す。)。表の Average の欄には、設定したダークイメージに対応したダークカウントの平均値が表示され、表の右側には選択したダークイメージのリストが表示されます。なお、ダークカウントも積分値のため、露光時間に比例して変わります。従って、実際の測定データと同じ露光時間で計測しておくのが無難です。また、検出器が PILATUS の場合は、短時間露光を繰り返して後で積分する（平均する）ような測定を実施すること多いと思いますので、試料の測定と同様に複数枚計測してその平均値を使う方が良いでしょう。

Type	File	Num	CounterFile	Average
Dark	Entry	5	02	22913

D:\temp2\test_data2\ABS\dark_00000.cbf
D:\temp2\test_data2\ABS\dark_00001.cbf
D:\temp2\test_data2\ABS\dark_00002.cbf
D:\temp2\test_data2\ABS\dark_00003.cbf
D:\temp2\test_data2\ABS\dark_00004.cbf

- xv. 最後に、試料の厚み[Sample Thickness(cm)]を入力します。単位は cm で、デフォルトは 0.1 cm (1 mm)としています。また、散乱強度を特定の値で割りたい場合は、[Multiplier]に値を入力します。必要なければ「1」のままで問題ありません。これで規格化のための条件設定が完了しました。

$$I(\text{export}) = (I(\text{ORG}) - \text{None}) / ((C2 - [\text{Dark_counts}]) \times \text{Sample Thickness [cm]} \times \text{Multiplier})$$

- xvi. 続いて、[Data processing]の箇所、処理するファイルの範囲を選択します。FLOUNDERでは複数のファイルを一度に処理することが可能ですが、その指定の仕方として、大きく分けて2 種類【All】と【Range selection】という分け方があります。

Data processing

All
All files in the input folder.

☒ Individual

☒ Average

Output name:
all_ave

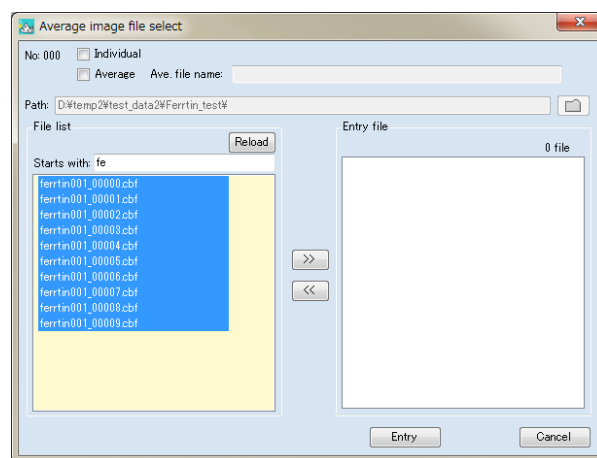
- 【All】の場合

先に指定した[Input Data Path]ディレクトリ内にある全ての画像データを一度に処理します。[Individual]は、フォルダ内にある全ての画像データを、1 枚ずつ個別に円周平均します。出力ファイル名は、画像ファイル名と同じで拡張子だけ「dat」になります。[Average]は、このフォルダ内にある全ての画像を平均化するため、ファイル名を指定します（拡張子の dat は自動でつきます）。Individual と Average を両方、もしくは選択した方だけ実行できます。

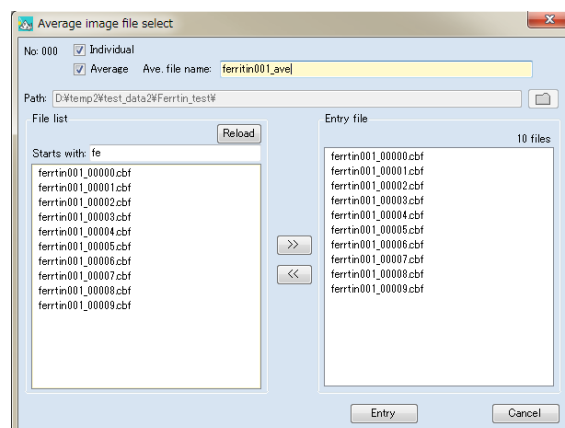
- 【Range selection】の場合

[Input Data Path]ディレクトリ内にあるデータに対して、処理する範囲を指定します。例えば、バックグラウンドのデータ、サンプルのデータの範囲をそれぞれ指定して個別に処理します。

- A) [Add]をクリックします。別ウィンドウが開きます。[File list]には、現在のディレクトリとディレクトリ内のファイルが表示されています。
- B) 読み込みたいファイルを複数枚同時に選択します(1枚でも可)。**[ctrl]**キーを押しながら複数枚クリックして選択して設定、またはマウスでクリックしながらドラッグすれば複数枚選択します。**[Starts with:]**はフィルターの機能で、ファイル名の頭から他のファイルを排除できる文字列を入力すると、特定のデータセットだけを表示させる事ができます。その状態で**[ctrl + A]**を押せば全選択できます。



- C) **>>** をクリックして選択したデータを確定します。そうすると右側にファイルが移ります。他のファイルも必要なら同じ操作を繰り返します。選択したファイルに対して、それぞれ個別に円周平均する (Individual) か、まとめて平均化する (Average) か、その両方を実行するのか選択します。**[Individual]**の方は、ファイル名はそのままに拡張子が **dat** のファイルを出力します。**[Average]**の方は、平均化後のファイル名を入力します (拡張子 **dat** は自動で追加されます)。完了したら**[Entry]**をクリックしてウィンドウを閉じます。



D) [Range selection]には、今設定した Job が入力されています。クリックすると、処理するファイル一覧が表示されます。他のデータセットも同時に処理したい場合は、(A)～(C)を繰り返します。各 Job は、それぞれ独立の処理を行いますので、同じイメージデータに対して異なる Job で異なる処理を指定すれば、干渉せずに命令を実行します。

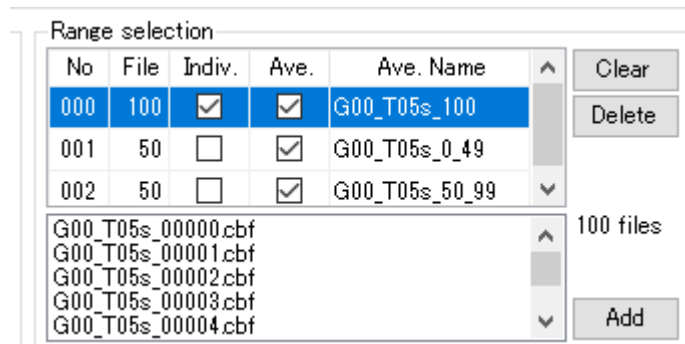
(例) G00_T05s_00000.cbf～G00_T05s_00099.cbf という100 枚のデータセットに対して

(Job1) 100 枚を Individual と Average で円周平均する。

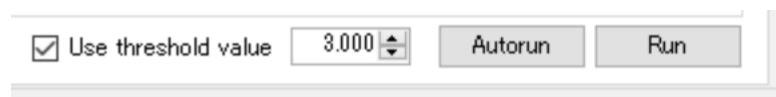
(Job2) 00000～00049 の前半の 50 枚に対して Average だけ実行する

(Job3) 00050～00099 の後半の 50 枚に対して Average だけ実行する

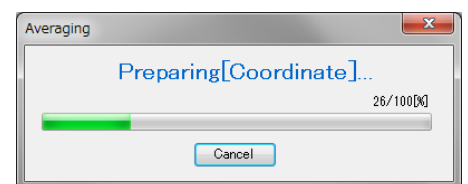
3 つの Job を実行しますので、dat ファイルは 103 個出力されます。



xvii. 【Mask】タブには円周平均時に見つけた異常なピクセルを事前にマスクするための機能「Uniformity」があります。しかし、この機能では、Zinger(計測中に宇宙線の検出等によって生じるスパイク状のピーク)が観測された場合等には対応出来ません。この【Ave】タブにはUniformity補正機能と同様に、実際のデータを円周平均する際に、Threshold値(閾値)に基づいて円周平均から除外するピクセル値を判定する機能があります。[Use threshold value]のチェックボックスにチェックしてThreshold値を設定すると、解析時に異常判定が随時行なわれ、それを反映した結果が出力されます。例えば、宇宙線などが検出されたピクセル(Zinger)など、突発的に発生した異常値を除外することが可能です。初期値は3.0になっています。[Mask]の Uniformity 補正機能を使った場合は、その時に設定した Threshold 値が自動で入っていますが、別の値に変更することも可能です。一方で、イメージデータごとに一度平均値データを作成してから異常判定処理を行なうため、円周平均に掛かる時間が長くなります。そのため、Ver. 2.1.34 以降は、円周平均時にマルチスレッド環境を活用したパラレル処理が実行できるようになっています。



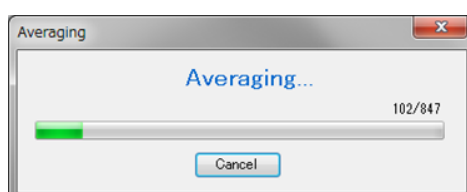
xviii. 入力が完了したら、[Run]ボタンをクリックして実行します。FLOUNDERを起動して初めて行う場合のみ、最初に「Preparing [Coordinate]...」のダイアログが表示されます。これは円周平均処理を高速化するために行う処理で、2回目以降は表示されません。ただし、Calibrationをやり直した場合は、再度実行されます。



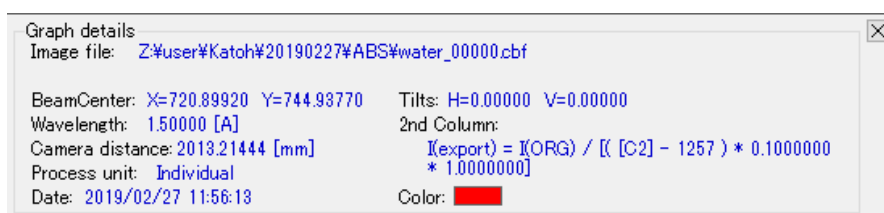
- xix. 「Preparering...」が完了すると円周平均を開始します(2回目からは、すぐに円周平均が開始します)。PILATUS3 2M でマルチスレッド処理 OFF の場合は、Pixel pitch がデフォルトのままなら 1 枚 1 秒程度です(細くなれば、より時間が掛かります。)。複数枚を平均する場合は、枚数により変化します。マルチスレッド環境を適用している場合は(3. ②Config Setting の設定)、処理スピードは環境に応じて変化します。また、入力した複数の Job に対して、「Individual 処理」が優先的に行なわれ、その後に「Average 処理」が進行します。例えば、(xvi.) (2)D) の図で表示されている 000、001、002 の 3 つの Job に対しては、まず最初に全ての Individual 処理が実行され、終了後に続いて各 Job の Average 処理が行なわれます。

(例) (xvi.) (2)D) の図の場合、以下の順で処理されます。

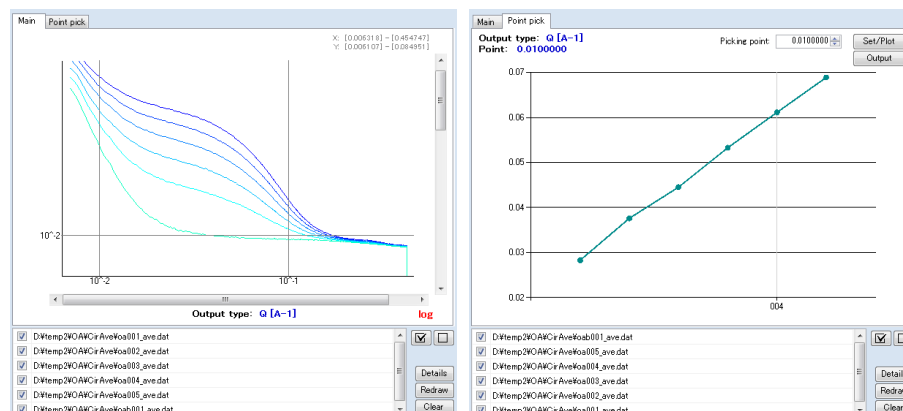
1. 00000~00099 の Individual
2. 00000~00099 の Average
3. 00000~00049 の Average
4. 00050~00099 の Average



- xx. 全ての処理が完了すると、グラフが両対数プロットで表示されます。グラフは、マウスのスクロールで拡大縮小するか、左クリックで拡大したい範囲をドラッグして指定すれば拡大します。下のチェック BOX で、チェックを入れたり外したりし、[Redraw]をクリックすれば表示するグラフを選択できます。[Clear]で全消去します。この表の欄に dat ファイルを Drag&Drop してもグラフを表示できます。[Details]をクリックすると FLOUNDER ウィンドウ上部にデータのヘッダー情報が示されます。

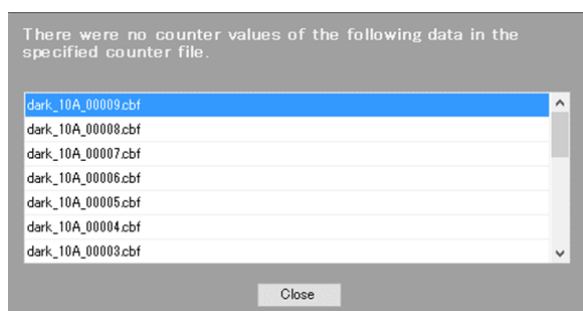


- xxi. グラフウィンドウには 2 つの表示があります。一つは【Main】タブで散乱曲線全体を表示しています。もう一つの【Point pick】タブでは、読み込まれているデータの特定の横軸の値に対する縦軸



の値(散乱強度)をプロットすることが可能です。例えば、 $Q [\text{\AA}^{-1}] = 0.01$ に対する散乱強度のプロットを表示したい場合は、[Picking point:]に 0.01 と入力し、[Set/Plot]をクリックします。小角付近の散乱強度変化をプロットすることで、放射線損傷による効果の有無を確認することができます。なお、このプロットのデータを出力することも可能です。[Output]をクリックすると、テキストデータとしてデータを保存できます。

- xxii. 散乱強度の規格化を行うために指定したカウンタファイルが間違っている場合は、円周平均処理がすぐに終わることがあります。具体的には、viii、ixで指定したカウンタファイルの番号が間違っている、そもそも処理する画像データのカウンタ値がそのファイル内に存在しない、データを保存しているディレクトリを変更した際にカウンタファイルを変更し忘れた場合等にそのようになります。その場合は、正しいファイルや番号を指定し直して下さい。



※標準誤差の導出

- I. ビームセンターから距離 r にある N 個のピクセルのデータを円周平均する。
- II. N 個のデータ $x_1, x_2, \dots, x_N$ の平均値 x_m は、以下の様になる。

$$x_m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i$$

- III. 平均値 x_m に対する分散 V は、以下の様になる。

$$V = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - x_m)^2$$

- IV. 分散 V の平方根が標準偏差 SD (Standard Deviation) なので、

$$SD = \sqrt{V}$$

- V. 標準誤差 SE (Standard Error) は誤差伝搬則により、以下の関係式となる。
この値を出力している。

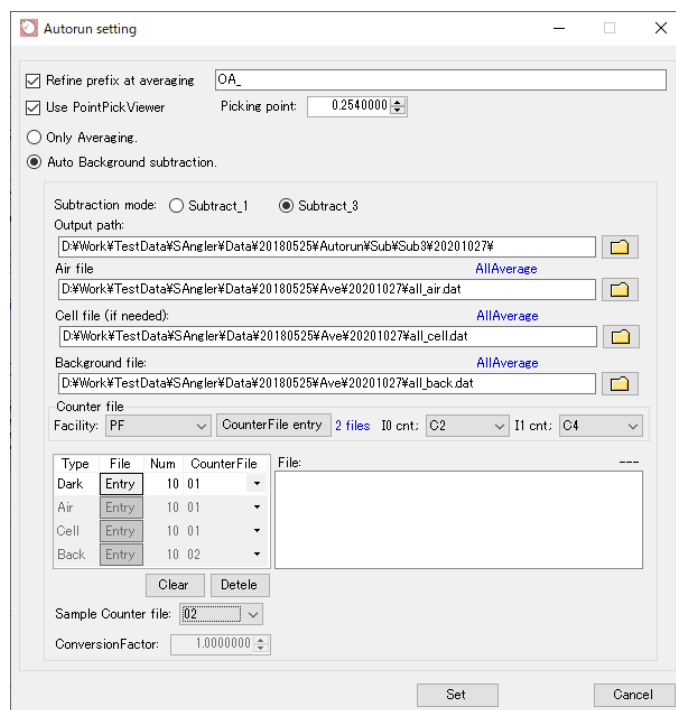
$$SE = \frac{SD}{\sqrt{N}}$$

※なお、複数枚を平均化して円周平均を行なう場合、まず、平均化するイメージを全て積分してから、円周平均処理を行なっています。

(2) フォルダを監視し、更新されたイメージデータを自動で円周平均する場合 (Autorun)

イメージデータが作成されるフォルダを監視し、円周平均[Average]やバックグラウンドの引き算 [Sub_1 or Sub_3]処理を自動で行うことができます。また、その結果を 3 次元的に行列データとしてプロットしたり、指定した X 座標の値の変化を 1 次元プロットとして表示・作成したりできます (PointPickViewer.exe)。

- i. まずは事前準備として、(1)の(i)～(xv)までの手順を行い、設定します。
- ii. Autorun 処理は、基本的に個別のファイル単位の処理になります。[Data processing] - [All]の箇所、[Individual]にチェックを入れて、[Autorun]をクリックします。Autorun setting の Window が開きます。



- iii. (i)で、監視するデータ保存フォルダを指定していますが、フォルダ内に複数のデータセットがある際に、ファイル名に特定の文字列を含むファイルだけを解析する場合は、[Refine prefix at averaging]にチェックを入れ、対象の文字列を入力します。

- iv. Autorun 中に処理結果を自動表示したい場合は、[Use Point Pick Viewer]にチェックします。また、特定の X 座標の値をピックアップしたい場合は、Picking Point にその X 座標の値を入力する。例えば、Q(Å-1)であれば、通常は 0.02 等の値を入れる。
- v. 処理方法を選択します。
 - 円周平均のみ実行 … [Only Averaging]を選択する。
 - 円周平均後に Background の引き算も自動実行する場合は、[Auto Background subtraction]を選択する。
- vi. Auto Background subtraction にチェックした場合は、Subtraction mode を選択する。
 - 円周平均後にSub_1 処理を実行 … [Subtract_1]を選択。
 - 円周平均後にSub_3 処理を実行 … [Subtract_3]を選択。

※ Subtraction mode の詳細は、後段の⑩～⑫(Background の差し引き 1～3)を参照のこと。
- vii. [Subtract_1]を選択した場合。
 - A. [Output path]に、Background を引いた後のデータを出力するディレクトリを指定する。
 をクリックして指定するか、ブランク Box 内を直接編集します。
 - B. 使用する Background ファイル(dat ファイル)を指定します。 をクリックしてファイルを指定するか、ブランク Box 内を直接編集する、さらには dat ファイルをブランク Box にドラッグアンドドロップしても指定できます。Background ファイルは事前に円周平均して 1 次元化しておく必要があります。
- viii. [Subtract_3]を選択した場合。
 - A. [Output path]に、Background を引いた後のデータを出力するディレクトリを指定する。
 をクリックして指定するか、ブランク Box 内を直接編集します。
 - B. 空気散乱のデータ(Air file)と試料無しのセルのみのデータ(Cell file)を指定します(ともに dat ファイル)。 をクリックしてファイルを指定するか、ブランク Box 内を直接編集する、さらには dat ファイルをブランク Box にドラッグアンドドロップしても指定できます。dat ファイルなので、事前に円周平均して 1 次元化しておく必要があります。
 - C. 使用する Background ファイル(dat ファイル)を指定します。 をクリックしてファイルを指定するか、ブランク Box 内を直接編集する、さらには dat ファイルをブランク Box にドラッグアンドドロップしても指定できます。Background ファイルは事前に円周平均して 1 次元化しておく必要があります。

- ix. [Counter file]には、先に【Ave】タブで設定したカウンタファイルの情報が読み込まれています。I₀ cnt は試料前のビームの積分強度のチャンネル、I₁ cnt は試料を透過後のビームの積分強度のチャンネルを指定します。PF の場合は、C2 が試料前のマイクロイオンチャンバで計測した値、C3 が試料後にもマイクロイオンチャンバを設置して計測した値、C4 がダイレクトビームストッパに埋め込まれている Si PIN フォトダイオードの値です。
- x. 各 Air、Cell、Background のファイルに関して、そのファイルが Individual 処理されている場合は、欄上に「Individual」と表示され、複数枚のデータを平均化したファイルの場合は、「All Average」と表示されます。一方で、Ver. 2.0.7 以前のバージョンで処理された場合は、ファイルのヘッダーに露光中のビームの積分強度(カウンタ値)が記録されていないため、dat ファイルとは別に使用するカウンタファイルを読み込み、また Air、Cell、Background に対応するデータを指定する必要があります。⑦円周平均(Average) (1)測定したデータを順番に指定して処理する場合の(xiii.)の項目で説明しているDark ファイルの指定方法を参考にして、Air、Cell、Background の該当ファイルとカウンタファイルを設定します。

Type	File	Num	CounterFile
Dark	Entry	5	02
Air	Entry	5	
Cell	Entry	5	
Back	Entry	15	

- Ver. 2.1.0 以降で処理されたファイルを使用する場合は、円周平均処理で使用したカウンタ値の情報が dat ファイルのヘッダーに記録されているため、Air、Cell、Background の dat ファイルを読み込むと、カウンタ情報の表は灰色に網掛け入力不要となる。

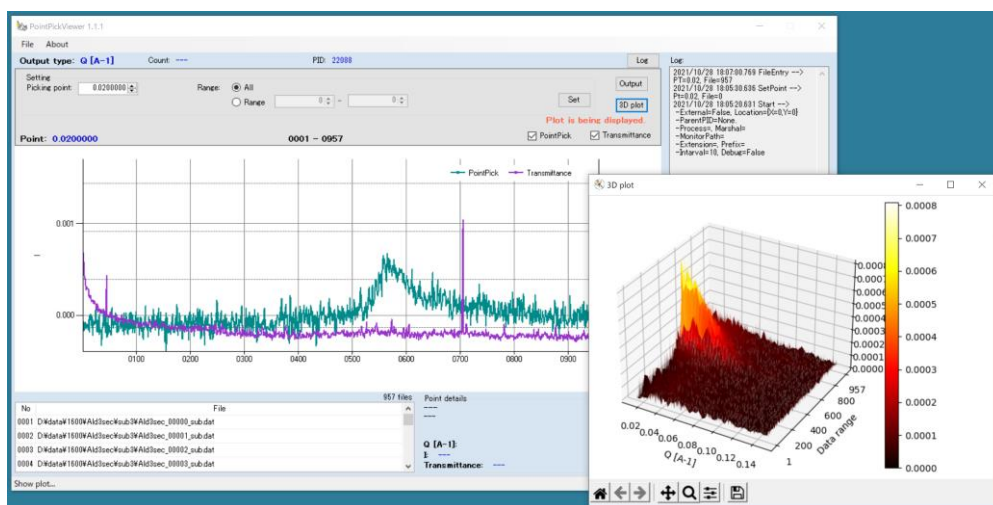
Type	File	Num	CounterFile
Dark	Entry	5	02
Air	Entry	5	02
Cell	Entry	5	02
Back	Entry	15	03

- Ver. 2.0.7 以前のファイルを使用する場合は、Dark 同様に使用するカウンタ値の情報をそれぞれあらためて指定する必要がある。

- xi. [Sample Counter file]には、[Counter File entry]で指定したサンプルのカウンタファイルの番号を設定します。
- xii. [Set]をクリックすると、条件確認のためのダイアログが表示されますので、問題無ければ「はい」をクリックし、処理をスタートさせます。

[Use Point Pick Viewer]にチェックした場合は、Point Pick Viewer が起動し、②**Config Setting** の設定の(vii.)で設定した時間間隔で、自動処理が進みます。

⑧ PointPickViewer



連続した散乱曲線データ(dat)セットを読み込み、ピックアップしたいX座標を指定することにより散乱強度の変化やその試料によるX線の透過率の変化(※)を1次元で同時にプロットします。

また、[3D Plot]ボタンを押して読み込んだ散乱曲線データセット全体を、別ウィンドウで3Dプロット表示します。

※ 読み込んだdatファイルによっては透過率の変化がプロットされない場合があります。

【Point Pickプロット】

datファイルを読み込み、ピックアップしたいX座標を[Pickking point]欄に設定するとグラフが表示されます。

[PickkingPoint]: ピックアップしたいX座標値を入力します。

[Range]: 表示するデータの範囲を指定することができます。読み込んだdatデータ全てを表示する場合は[All]を、範囲を指定したい場合は[Range]を選択し、数値を入力します。

開始位置のみ設定し、終了位置を0と入力すると、開始位置から最後まで表示します。

[Set]: ボタンを押すと設定されたPickkingPointや表示範囲をもとにPointPickグラフを描画します。

[PointPick][Transmittance]:

読み込んだファイルがAverageDatファイルの場合はPointPickのみのグラフが、SubtractDatファイルの場合はPointPickとTransmittanceのグラフが表示されます。このチェックボックスにより表示/非表示の切り替えが可能です。

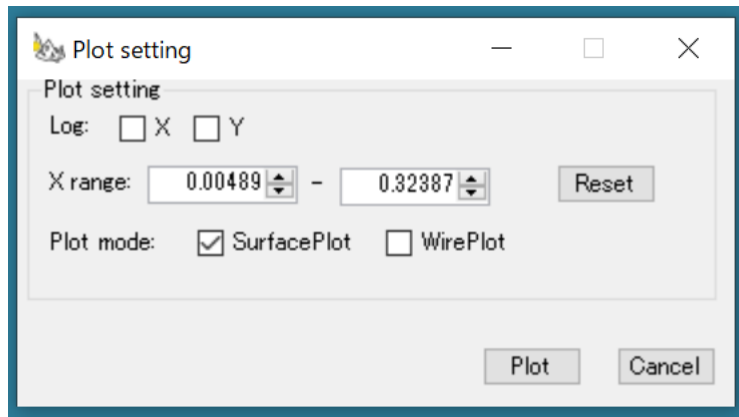
PointPickとTransmittanceのグラフが表示される際はY軸の左側(散乱強度:I)と右側(試料によるX線透過率(Transmittance))ではスケールが異なることに注意して下さい。

[Point details]:

プロット中の各点をクリックすると、その点を選択できます。プロット右下の[Point details:]に選択した点の詳細情報が表示されます。

【3Dプロット】

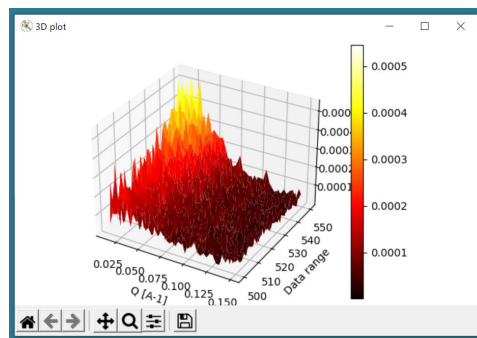
datファイルを読み込んだ状態で[3D Plot]ボタンを押すと設定ダイアログが表示されます。それらを設定し[Plot]ボタンを押すと、3Dプロットウィンドウが表示されます。



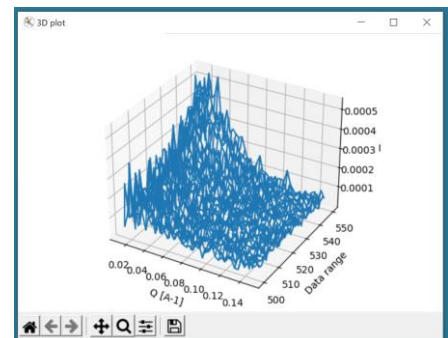
[Log]: X軸、Y軸を対数表示したい場合はチェックします。

[X range]: X軸の表示域を指定することができます。一度入力した後に全範囲に戻したい場合は[Reset]ボタンを押してください。

[Plot mode]: 3D Plotでは「Surfaceプロット」と「Wireプロット」の2種類のグラフを表示することができます。表示したいグラフのチェックボックスにチェックしてください。

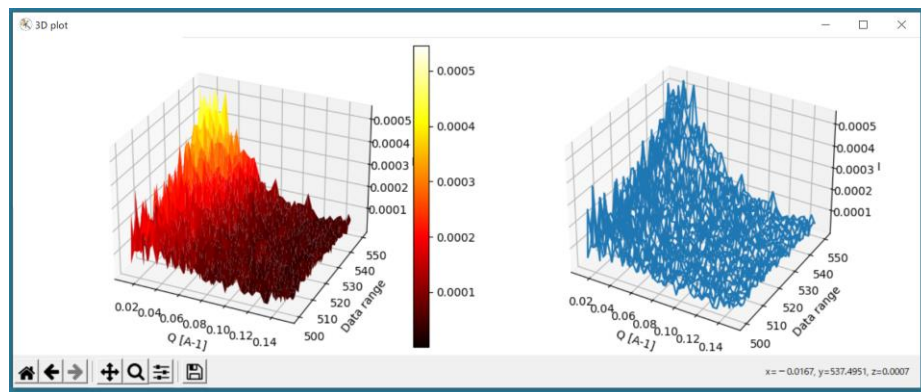


Surfaceプロット



Wireプロット

両方にチェックを入れると同時に表示することができます。

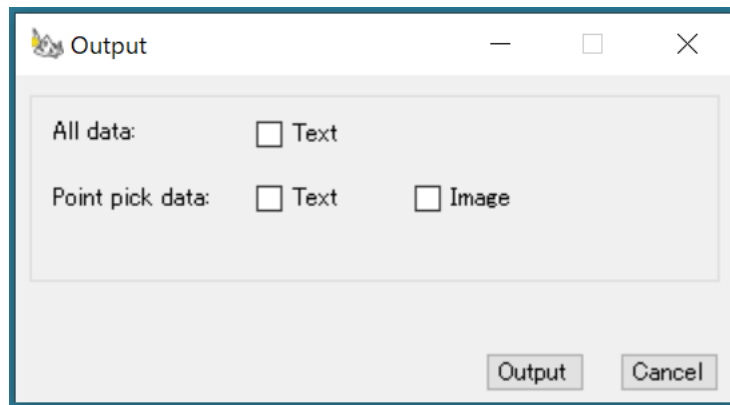


プロットウィンドウは、**データを読み込んだ時点での状態**をプロットします。datデータを読み直したり、フォルダ監視中などでデータが更新されたりした場合は3Dプロットウィンドウを閉じ、再度[3D Plot]ボタンを押して3Dプロットウィンドウを表示しなおしてください。

【Output】

全データやPointPickグラフのテキストデータ(dat)、PointPickグラフのイメージを出力することができます。

[Output]ボタンを押す、またはメニュー[File]－[Output]を選択すると出力ダイアログボックスが表示されます。



[All data]: 読み込んだ全てのデータを一つのファイルとして出力する場合は[All data]の[Text]にチェックを入れてください。

[Point pick data]: PointPickグラフを出力する場合はテキスト出力の際は[Text]にチェックを、イメージ出力の際は[Image]にチェックを入れてください。

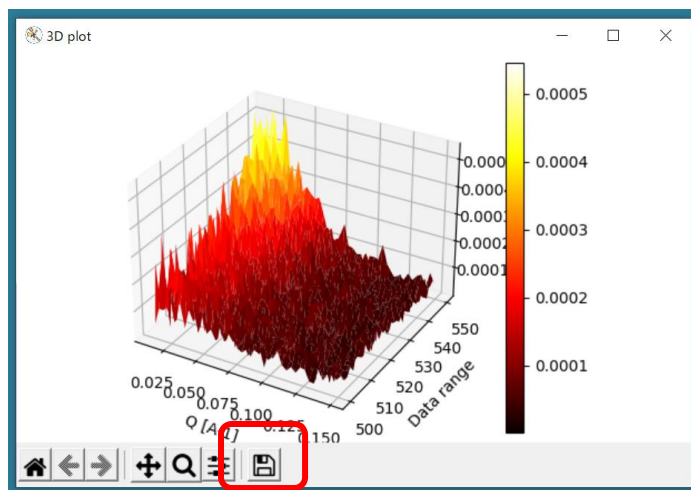
[Output]: 出力条件を設定したら[Output]ボタンを押してください。

※datデータ読み込み後、PickkingPointを指定していない場合はAll dataのみ出力することができます。

※3Dプロットのイメージを出力する場合は、3Dプロットウィンドウの保存ボタン
てください。



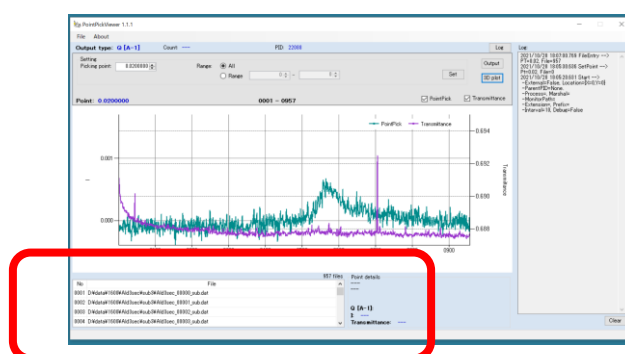
を押して出力し



●Point Pick Viewerは、FLOUNDERとは別に単独起動もできます。

【通常起動時】

- i. FLOUNDER のメニュー[Tools] - [PointPickViewer]を選択して起動する。
(PointPickViewer.exeを直接ダブルクリックすることでも起動できます。)
- ii. 表示したい dat ファイルを、ウィンドウ左下の表の部分に Drag&Drop するか、またはメニュー[File]—[Open]で表示されたダイアログボックスで dat ファイルを選択すると、dat データが読み込まれます。
下部のリストに読み込まれたファイル一覧が表示されます。



- iii. [Picking Point]に表示したい X 座標の値を入力、また必要に応じて[Range]を設定して[Set]ボタンをクリックすると、下にグラフが表示されます。複数の AverageDat ファイルの場合は PointPick のみ、SubtractDat ファイルの場合は PointPick と Transmittance のグラフが表示されます。(切り替えも可能です。)

- iv. dat データを読み込んだ時点で 3D プロットの描画ができるようになります。[3D Plot]ボタンを押し、表示されたダイアログボックスの X 軸・Y 軸の Log 表示の有無、X 軸の表示範囲、表示するプロットの種類を設定し[Plot]ボタンを押すと 3D プロットが表示されます。
- v. 読み込んだ全てのデータをテキストデータとして出力したり、PickkingPoint を設定していれば PointPick グラフのイメージ、テキストデータを出力したりできます。[Output]ボタン、またはメニュー [File]－[Output]で出力できます。
3Dプロットのイメージを出力する場合は3Dプロットウィンドウの保存ボタンで出力します。
- vi. 終了する場合はフォームの×ボタン、またはメニュー[File]－[Close]で終了します。終了時出力確認メッセージが表示されます。以前に出力した場合はそのファイル名と一緒に表示されます。
(終了する際3Dプロットウィンドウが開いていると終了することができません。3Dプロットウィンドウを閉じてからPointPickViewerを終了してください。)

【フォルダ監視時】

- i. 【Ave】タブ内[Autorun]処理で「PickingPoint」を指定し Autorun 処理を開始すると、フォルダ監視モードで PointPickViewer が起動します。
- ii. 指定時間経過すると自動でフォルダ内の dat ファイルを解析し、結果を表示します。(指定時間は FLOUNDER の[Option] - [ConfigSetting]で設定することができます。初期値は 15 秒です。)
- iii. dat ファイル読み込み時は PickkingPoint の設定等、データ読み込みに支障のない操作が可能です。画面描画中は他の操作をすることができません。
- iv. 読み込み時以外では[PickingPoint]のみ変更することができます。
- v. FLOUNDER で監視モードが終了すると PointPickViewer でも監視が終了します。FLOUNDER で再度監視が開始されれば PointPickViewer も監視を再開します。
※ 一度FLOUNDERとの連動が切断された場合は通常起動と同じ動作をします。もう一度 FLOUNDERと連動させる場合は、一度PointPickViewerを終了し、FLOUNDERから起動してください。

※出力ファイル(円周平均のみ)のヘッダー

(1) Individual処理の場合

```
# Date: 2020/05/20 15:21:41
# FLOUNDER Version: 1.0.29
# Type: ImgAverage
# BeamCenter X: 720.89920/ Y: 744.93770
# Wavelength: 1.50000
# Camera distance: 2013.21444
# PixPitch: 0.172 * 0.50000
# Tilts H: 0.00000/ V: 0.00000
# Image: D:\data\sample\sample_00000.cbf
# SDO min: None.
# Unit: Individual
# Counter file: D:\data\sample\PilatusCounter_sample.txt
# Ch: [C1]6548045.000    [C2]271137.000    [C3]0.000    [C4]326187.000
      [C5]0.000    [C6]0.000    [C7]0.000    [C8]0.000
##
# 1st. Column: Q [A-1]
# 2nd. Column: I(export) = I(ORG) / [( [C2] - 1257 ) * 0.1000000 * 1.0000000]
# 3rd. Column: SE I(export) = SE I(ORG) / [( [C2] - 1257 ) * 0.1000000 * 1.0000000]
# SE = Standard error.
# Dark File: 5 files
# - D:\data\ABS\dark_00000.cbf
# - D:\data\ABS\dark_00001.cbf
# - D:\data\ABS\dark_00002.cbf
# - D:\data\ABS\dark_00003.cbf
# - D:\data\ABS\dark_00004.cbf
# DarkCh: [C1]7711436.000 [C2]1257.000 [C3]0.000    [C4]1056.800 [C5]0.000
          [C6]0.000    [C7]0.000    [C8]0.000
# DarkCounts(Average): 1257.000
# SampleThickness[cm]: 0.1000000
# Multiplier: 1.0000000
# Threshold: None.
##
## Version: VERSION 1.5, CBFLib v0.7.8 - PILATUS detectors
## Detector: PILATUS3 2M, S/N 24-0116
## Measurement Date: 2019-02-27T22:38:38.005
## PixelSize: 172e-6 m x 172e-6 m
## Silicon sensor, thickness 0.000320 m
## Exposure Time: 20.0000000 s
## Exposure Period: 20.0100000 s
```

```

## Tau: 0 s
## Count CutOff: 1061219
## Threshold Setting: 4132 eV
## Gain Setting: autog (vrf = 1.000)
## N Excluded Pixels: 207
## Excluded Pixels: badpix_mask.tif
## Flat Field: FF_p24-0116_E8265_T4132_vrf_m0p100.tif
## Trim File: p24-0116_E8265_T4132.bin
## Ratecorr Lut Directory: ContinuousStandard_v1.1
##
# Number of DATA: 1545
0.00483126178742133      0.00471187718391302      5.81627082733806E-05
0.00501019722061095      0.00436550658493805      0.000123891946896222
0.00518913263322968      0.00398326188821211      0.000125698913737578
      :                      :                      :

```

(2) Average処理(複数ファイルの平均処理)の場合

```

# Date: 2020/05/20 16:49:32
# FLOUNDER Version: 1.0.29
# Type: ImgAverage
# BeamCenter X: 720.89920/ Y: 744.93770
# Wavelength: 1.50000
# Camera distance: 2013.21444
# PixPitch: 0.172 * 0.50000
# Tilts H: 0.00000/ V: 0.00000
# Image: D:\data\sample\sample_00000.cbf
# Image: D:\data\sample\sample_00001.cbf
# Image: D:\data\sample\sample_00002.cbf
# Image: D:\data\sample\sample_00003.cbf
# Image: D:\data\sample\sample_00004.cbf
# Image: D:\data\sample\sample_00005.cbf
# Image: D:\data\sample\sample_00006.cbf
# Image: D:\data\sample\sample_00007.cbf
# Image: D:\data\sample\sample_00008.cbf
# Image: D:\data\sample\sample_00009.cbf
# SDO min: None.
# Unit: AllAverage
# Counter file: D:\data\sample\PilatusCounter_sample.txt
# Ch: [C1]6541457.500      [C2]270717.900      [C3]0.000      [C4]325850.600
      [C5]0.000      [C6]0.000      [C7]0.000      [C8]0.000
##
# 1st. Column: Q [A-1]

```

```

# 2nd. Column: I(export) = I(ORG) / [( [C2] - 1257 ) * 0.1000000 * 1.0000000]
# 3rd. Column: SE I(export) = SE I(ORG) / [( [C2] - 1257 ) * 0.1000000 * 1.0000000]
# SE = Standard error.
# Dark File: 5 files
# - D:\data\ABS\dark_00000.cbf
# - D:\data\ABS\dark_00001.cbf
# - D:\data\ABS\dark_00002.cbf
# - D:\data\ABS\dark_00003.cbf
# - D:\data\ABS\dark_00004.cbf
# DarkCh: [C1]7711436.000 [C2]1257.000 [C3]0.000 [C4]1056.800 [C5]0.000
          [C6]0.000 [C7]0.000 [C8]0.000
# DarkCounts(Average): 1257.000
# SampleThickness[cm]: 0.1000000
# Multiplier: 1.0000000
# Threshold: 0.400
##
## Version: VERSION 1.5, CBFLib v0.7.8 - PILATUS detectors
## Detector: PILATUS3 2M, S/N 24-0116
## Measurement Date: 2019-02-27T22:38:38.005
## PixelSize: 172e-6 m x 172e-6 m
## Silicon sensor, thickness 0.000320 m
## Exposure Time: 20.0000000 s
## Exposure Period: 20.0100000 s
## Tau: 0 s
## Count CutOff: 1061219
## Threshold Setting: 4132 eV
## Gain Setting: autog (vrf = 1.000)
## N Excluded Pixels: 207
## Excluded Pixels: badpix_mask.tif
## Flat Field: FF_p24-0116_E8265_T4132_vrf_m0p100.tif
## Trim File: p24-0116_E8265_T4132.bin
## Ratecorr Lut Directory: ContinuousStandard_v1.1
##
# Number of DATA: 1545
0.00735588299689442      0.0192514741809156 0.00209853198579806
0.00776454270765224      0.0180931033805649 0.000952245234077713
0.00817320234450698      0.0138984048003198 0.000594581681742784
      :                  :

```

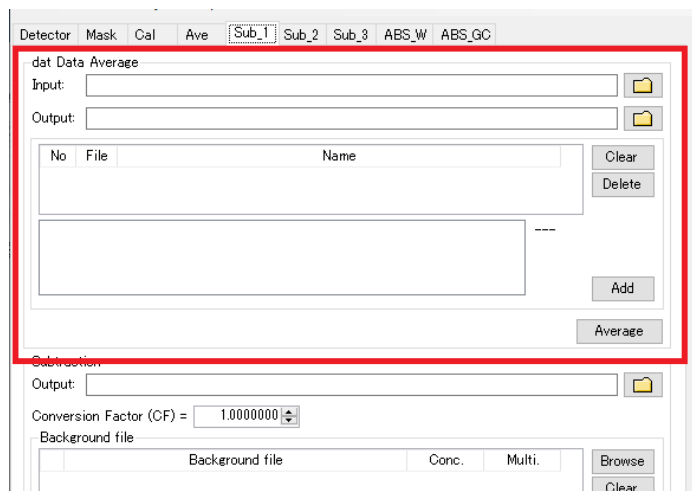
Date	データ出力日時
SAnger Version	SAnger バージョン

Type	出力データタイプ
BeamCenter	ビームセンター
Wavelength	波長
Camera distance	カメラ長
PixPitch	ピクセルピッチ
Tilts H: / V:	傾き
Image	イメージファイル
SDO min:	Score of data omission (SDO). 不正データ自動判定ありの場合、設定した数値が出力されます。
Unit	単体解析/合算解析
Counter file	カウンタファイル
Ch	カウンタ値[Ch 別](個別:単体値/ 合算:平均値)
1st. Column	1 列目データ
2nd. Column	2 列目データ
3rd. Column	3 列目データ
Dark File	ダークファイル
DarcCh	ダークカウンタ平均値[Ch 別]
DarkCounts(Average)	ダークカウンタ平均値
SampleThickness	サンプルの厚さ
Multiplier	乗数
Threshold	しきい値
##	イメージデータのヘッダーデータ
Number of Data	データの行数

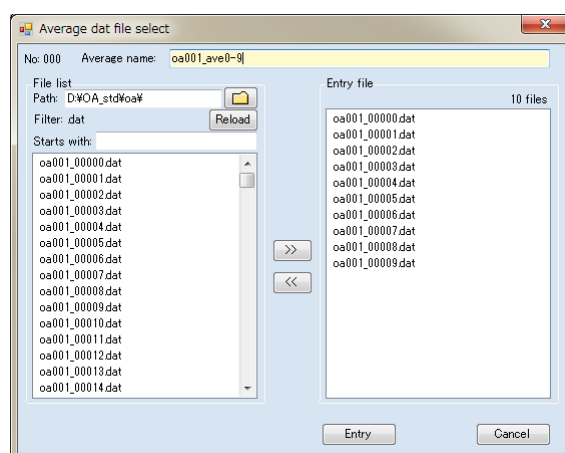
出力データには、3つのデータ列が出力されており、1列目は指定した横軸($Q(\text{\AA}^{-1})$ 等)、2列目は散乱強度 I 、3列目は散乱強度の標準誤差 σ が出力されています。散乱強度の規格化を指定した場合は、2、3列目の値は規格化後の値になっています。

⑨ 円周平均後の dat ファイルの平均 (DatAverage)

【Sub_1】のタブには、上段に「円周平均後の dat ファイルを平均化するツール」と下段に「バックグラウンドを差引くためのツール」が用意されています。まずは、dat ファイルの平均化に関して説明します。



- i. [Input:]には、Averaging で指定した[Output]ディレクトリが自動的に入力されている。ここから始めた場合は、をクリックして dat ファイルが保存されているディレクトリを指定します。この欄は、直接編集することも可能です。
- ii. [Output:]には、平均したファイルを出力するディレクトリを指定します。を押すか、直接編集します (Input と同じなら、コピーペーストする)。



- iii. [Add]をクリックして、先程の Averaging 同様に平均化するdat ファイルを指定します。出力する平均化後のファイル名を入力したら[Entry]をクリックして閉じます。
- iv. さらに別のデータセットを平均化したい場合は、[Add]をクリックして追加していきます。

- v. 入力が完了したら、[Average]をクリックします。平均化したファイルが出力され、グラフが表示されます。出力ファイル内には、どのファイルを使って平均化したのかヘッダーに明示され、Q などの横軸の値、散乱強度 I、散乱強度の標準誤差 σ_I が出力されます。標準誤差は誤差の伝播則に従って再計算されています。

※dat ファイル平均化後の誤差

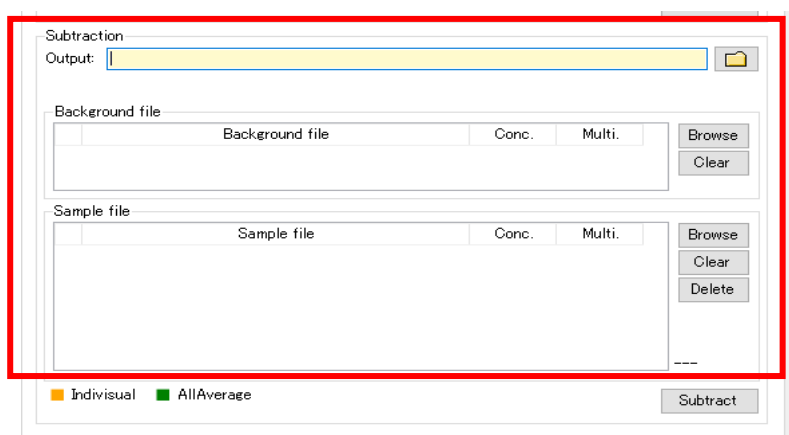
誤差 σ を持つ N 個のデータ $x_1 \pm \sigma_1, x_2 \pm \sigma_2, \dots, x_N \pm \sigma_N$ の平均値 $x_m \pm \sigma_m$ は、誤差伝搬則に従い、以下の式で求められる。

$$x_m \pm \sigma_m = \frac{\sum_{i=1}^N x_i}{N} \pm \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^N \sigma_i^2}}{N}$$

※【Ave】のタブでイメージを平均化する場合、まず全てのイメージを足し合せてから処理しています。従って、個別のイメージを円周平均してから平均化する方法とは、計算方法が異なるため出力結果が異なります。

⑩ Background の差引き 1 (Sub_1)

Sample のデータから Background のデータを差引く(Subtraction)処理を行ないます。【Sub_1】タブでは、単純に Sample の散乱強度から Background の散乱強度を引く機能になっています。【Sub_2】タブでは、散乱体の X 線透過率を基に、Sample から Background の散乱強度を空の試料セルの散乱強度を除いてから差引き、さらには試料濃度の排除体積効果も考慮した計算を行なうことができます。【Sub_3】タブでは、【Sub_2】に対して排除体積効果の項を 1 とした場合の計算を、多数のデータに対して一度に実施することが可能です(透過率のみを考慮して Background の差引きを実行する)。まずは、【Sub_1】の機能について説明します。



- i. 【Sub_1】タブ下段側の[Output:]に計算結果を出力するディレクトリを指定します。📁をクリックして選択するか、直接編集します。
- ii. [Background file]に、Background とするファイルを指定します。[Browse]をクリックしてファイルを指定することもできますし、この欄にファイルを Drag&Drop する事も可能です。入力する Background ファイルは 1 つです。
- iii. [Sample file]に Background を引きたいファイルを指定します。何個でも一度に入力できます(基本的に制限はありません)。[Browse]をクリックしてファイルを指定しますが、複数個指定する場合は、ctrl キーや shift キーを押しながらクリックして選択して下さい。この欄にファイルを Drag&Drop する事も可能です。一度に複数のファイルを選択して Drop して下さい。[Option] - [ConfigSetting]において、一度に処理できるファイル数が、デフォルトで 300 個に設定されています(変更できます)。

Subtraction

Output: D:\temp2\OA\Backsub

Background file

Background file	Conc.	Multi.
D:\temp2\OA\CirAve\oa001_ave.dat	---	1.000

Sample file

Sample file	Conc.	Multi.
D:\temp2\OA\CirAve\oa001_ave.dat	5.000	1.000
D:\temp2\OA\CirAve\oa002_ave.dat	4.000	1.000
D:\temp2\OA\CirAve\oa003_ave.dat	3.000	1.000
D:\temp2\OA\CirAve\oa004_ave.dat	2.000	1.000
D:\temp2\OA\CirAve\oa005_ave.dat	1.000	1.000

Subtract

- iv. Background、Sample ともに[Multi.]欄に値を入力すると、散乱強度にその値を掛けることができます。通常は 1.000 となっています。また、Sample の方では、「Conc.(試料の濃度)」を入力する事もできます。濃度の値は出力ファイルのヘッダーに記録され、後の解析時に自動的に読み込まれます。上図の様に複数のデータを読み込んでいる場合は、濃度の値を 1 行ずつ設定することもできますが、Excel 等から表データとしてコピーして、この欄にペーストすることもできます。

Sample file

Counter file: 01

10 files

Sample file	Conc.	Multi.	I1/I0	Transmittance
D:\data\sample\CirAve\s...	1.000	1.000	---	---
D:\data\sample\CirAve\s...	1.000	1.000	---	---
D:\data\sample\CirAve\s...	1.000	1.000	---	---

Sample file

Counter file: 01

10 files

Sample file	Conc.	Multi.	I1/I0	Transmittance
D:\data\sample\CirAve\s...	10.000	0.100	---	---
D:\data\sample\CirAve\s...	9.000	0.100	---	---
D:\data\sample\CirAve\s...	8.000	0.100	---	---

	conc	multi
1	10	0.1
2	9	0.1
3	8	0.1
4	7	0.1
5	6	0.1
6	5	0.1
7	4	0.1
8	3	0.1
9	2	0.1
10	1	0.1

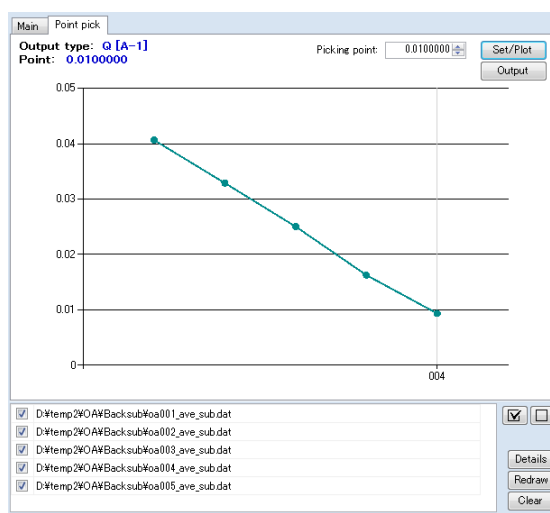
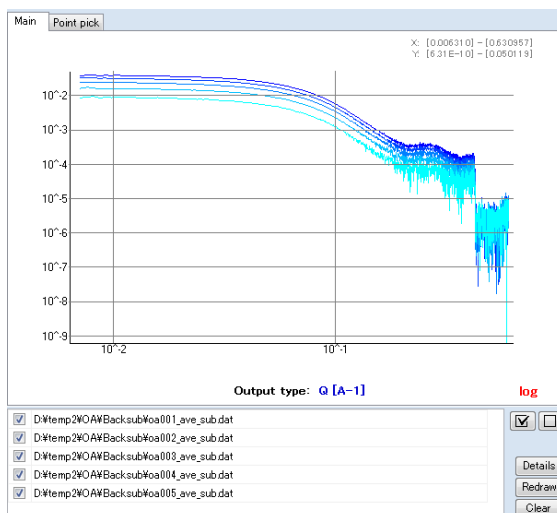
(例) 10 個のファイルを読み込んで各濃度を入力したい場合、Excel で濃度が 1 列に並んでいるデータを用意し、表データとして FLOUNDER の[Conc.]列にコピーペーストできます。データの個数が異なる場合はエラーメッセージが表示されます。

- v. なお、Sub_1 で使用する計算式がウィンドウの右上に明示されています。

Subtract_1

$$I(\text{export}) = [I(\text{Sample}) * \text{Multi}] - [I(\text{Background}) * \text{Multi}]$$

- vi. 準備ができれば、[Subtract]をクリックします。ファイルが出力されグラフが両対数プロットで表示されます。グラフは、マウスのスクロールで拡大縮小したり、左クリックで拡大したい範囲をドラッグして指定したりすれば拡大します。下のチェック BOX で、チェックを入れたり外したりし、[Redraw]をクリックすれば表示するグラフを選択できます。[Clear]で全消去します。[Details]をクリックすると FLOUNDER ウィンドウ上部にデータのヘッダー情報が示されます。この欄に dat ファイルを Drag&Drop してもグラフを表示できます。
- vii. グラフウィンドウには 2つの表示があります。一つは【Main】タブで散乱曲線全体を表示しています。もう一つの【Point pick】タブでは、読み込まれているデータの特定の横軸の値に対する縦軸の値（散乱強度）をプロットすることが可能です。例えば、 $Q[A^{-1}] = 0.01$ に対する散乱強度のプロットを表示したい場合は、[Picking point:]に 0.01 と入力し、[Set/Plot]をクリックします。小角付近の散乱強度変化をプロットすることで、放射線損傷による効果の有無を確認することができます。なお、このプロットのデータを出力することも可能です。[Output]をクリックすると、テキストデータとしてデータを保存できます。



※Sub_1 での誤差の導出

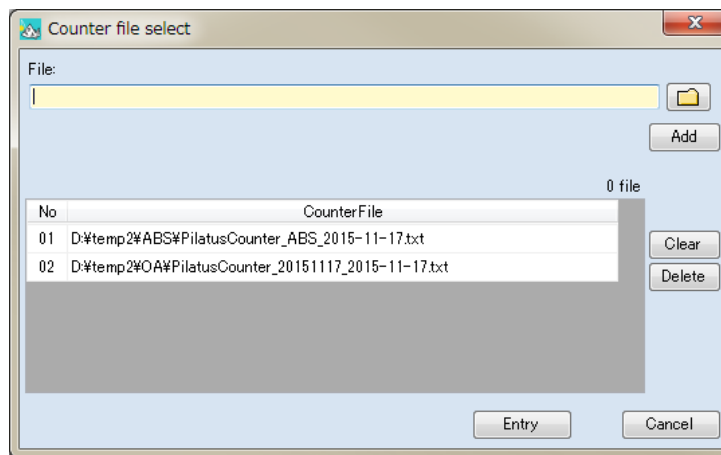
Sample 側の誤差を σ_A 、Background 側の誤差を σ_B とすると、Sub_1 式に従って引いた場合の誤差 σ_m は、誤差伝搬則に従い、以下の式で求められる。

$$\sigma_m = \sqrt{(\sigma_A \times multi.sample)^2 + (\sigma_B \times multi.Background)^2}$$

⑪ Background の差引き 2 (Sub_2)

【Sub_2】タブでは、空の試料セルの散乱強度、空のセル – Background - Sample 測定での X 線透過率、さらには試料濃度に依存する排除体積効果も考慮した計算を行なうことができます。

- i. [Output:]に計算結果を出力するディレクトリを指定します。📁をクリックして選択するか、直接編集します。
- ii. 続いて、透過率の計算のために必要なカウンタファイルを設定するために、カウンタファイルの仕様を指定する「Facility」を選択します(基本的には【Ave】タブでの設定をそのまま引継いでいるので、同じ設定で処理を進める場合は変更する必要はありません)。PF と SPring-8 BL38B1、BL45XU(2018 年 12 月まで)、40B2 のカウンタファイルの形式に対応しています。
- iii. 次に、[CounterFile entry]で、使用するカウンタファイルを設定します(基本的には【Ave】タブでの設定をそのまま引継いでいるので、同じ設定で処理を進める場合は変更する必要はありません)。クリックすると[Counter file select]ダイアログが開きます。📁をクリックしてカウンタファイルを選択し、その後[Add]ボタンを押すと、ダイアログ下側のリスト欄に移ります。これで選択完了です。この欄にファイルを Drag&Drop する事も可能で、その場合は直ぐに選択完了になります。一方で、使用するカウンタファイルが複数存在する場合は、複数個のカウンタファイルを指定することができます。例えば、Dark、Air、Cell に対応したカウンタファイルと、Background、Sample に対応するカウンタファイルが異なる場合は、そのファイルをそれぞれ読み込んでおくことになります。カウンタファイルは読み込んだ順番に番号が設定されますので、(ix)の設定ではこの番号をそれぞれ指定します。設定が完了したら[Entry]をクリックして閉じます。



- iv. [I0 cnt:]に試料前の入射 X 線強度のチャンネル、[I1 cnt:]に試料後の透過 X 線強度のチャンネルを指定します。PF では、入射 X 線強度は C2、透過 X 線強度は C4(ビームストッパーに仕込まれたフォトダイオード)になっているのが一般的です。SPring-8 の BL38B1 では、C2 が試料前のマイクロイオンチャンバ、C3 が試料後のフォトダイオード(ビームストッパー埋め込み)となっています。BL45XU(2018 年 12 月まで)では、MIC up が試料前、MIC down が試料後、40B2 では、C3 が試料前、C4 が試料後となっています(念のため担当者に確認して下さい)。

Facility: PF CounterFile entry 2 files I0 cnt: C2 I1 cnt: C4

- v. 次に、処理に使用する Dark、Air、Cell、Background、Sample の計測データと、透過率の計算に必要なカウンタファイルを設定しますが、Ver. 1.0.8以前と 1.0.8 以降で処理の手順が異なります。

● FLOUNDER Ver 1.0.8 以降に処理されたファイルを使用する場合

- A. 表の部分では、Dark のみ【Ave】タブで設定した内容が反映されています。Air 以下は使用しません。その下の Air、Cell、Background、Sample のデータを指定する欄に移ります。Air、Cell の箇所には空気散乱のデータ(Air file)と試料セルのデータ(試料無しのセルのみのデータ、Cell file)を指定します(ともに dat ファイル)。
[Browse]をクリックしてファイルを指定するか、dat ファイルをブランク Box に Drag&Drop します。dat ファイルなので、事前に円周平均して 1 次元化しておく必要があります。
- B. 使用する Background と Sample のファイル(dat ファイル)を指定します。
[Browse]をクリックしてファイルを指定するか、dat ファイルをブランク Box に Drag&Drop します。どちらも、事

Type	File	Num	CounterFile	I0	I1	I1/I0	Transmittance
Dark	Entry	5	02	1257	1057	---	---
Air	Entry	5		---	---	---	---
Cell	Entry	5		---	---	---	---
Back	Entry	0		---	---	---	---
Samp	Entry	0		---	---	---	---

File:

	Air file	Conc.	Multi.	
☒	D:\data\ABS\air_ave.dat	---	1.000	Browse
				Clear
	Cell file	Conc.	Multi.	
☒	D:\data\ABS\cell5_ave.dat	---	1.000	Browse
				Clear
	Background file	Conc.	Multi.	
				Browse
				Clear
	Sample file	Conc.	Multi.	
				Browse
				Clear

☒ Individual ☒ AllAverage

前に円周平均して 1 次元化した dat ファイルを一つ指定します。Background、Sample ともに「Multi.」欄に値を入力すると、散乱強度にその値を掛けることができます。通常は 1.000 となっています。また、Sample の方では、[Conc.(試料の濃度)]を入力する事もできます。濃度の値は出力ファイルのヘッダーに記録され、後の解析時に自動的に読み込まれます。4つ

のファイルが適切に読み込まれると、上の表で Air から Samp までの部分は無効を示す灰色の表示になります。また、この欄では、これらの dat ファイルが 1 枚の画像データを個別処理したファイルなのか (Individual: 黄色)、複数の画像データを平均化したファイルなのか (All Average: 緑色)なのかを判別しています。

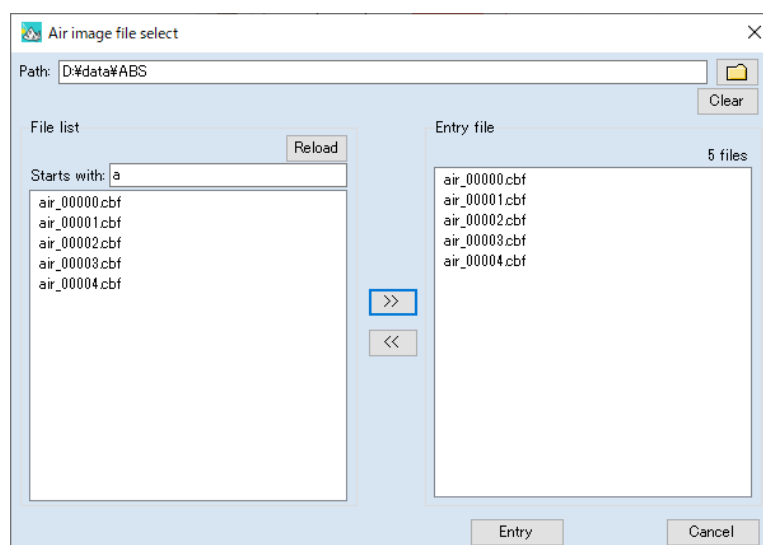
	Air file	Conc.	Multi.	
☒	D:\data\ABS\air_ave.dat	---	1.000	Browse Clear
	Cell file	Conc.	Multi.	Browse Clear
☒	D:\data\ABS\cell5_ave.dat	---	1.000	Browse Clear
	Background file	Conc.	Multi.	Browse Clear
☒	D:\data\buffer\CirAve\buffer_ave.dat	---	1.000	Browse Clear
	Sample file	Conc.	Multi.	Browse Clear
☒	D:\data\sample\CirAve\sample_00000.dat	1.000	1.000	Browse Clear

☒ Individual ☒ AllAverage

C. vi に移ります。

● FLOUNDER Ver 1.0.8 以前に円周平均処理したファイルを使用する場合

- A. 透過率の計算を行なうために、次の表に Dark、Air、Cell、Background、Sample を計測したそれぞれのデータを指定してきます。Dark は、【Ave】タブで設定した内容になっていますが、変更する場合は、以下と同様に編修します。各項目で [Entry] をクリックすると、イメージデータのファイルを選択するダイアログが開きます。[Path:] にデータのあるディレクトリを指定します。 を押すか、直接編集 (コピーペーストも可) します。 をクリックすると、ディレクトリ内のイメージデータが一覧で表示されますので、該当するファイルを複数枚同時に選択します (1 枚でも可)。OS の機能が使えますので、例えば [ctrl] キーを押しながら複数枚クリックして選択も出来ますし、単にマウスでクリックしながらドラッグすれば複数枚選択できます。[Starts with:] はフィルターの機能で、ファイル名の頭から他のファイルを排除できる文字列を入力すると、特定のデータセットだけを表示させる事ができます。その状態で [ctrl + A] を押せば全選択できます。



The dialog box titled "Air image file select" has a "Path:" field set to "D:\data\ABS" with a folder icon and a "Clear" button. Below is a "File list" section with a "Starts with:" filter set to "a" and a "Reload" button. The file list contains: air_00000.cbf, air_00001.cbf, air_00002.cbf, air_00003.cbf, and air_00004.cbf. To the right is an "Entry file" section showing the same five files. Navigation buttons ">>" and "<<" are between the lists. At the bottom are "Entry" and "Cancel" buttons.

- B. イメージデータの選択が完了したら、[CounterFile]の欄で、(iii)で設定したカウンタファイルの中から、それぞれ何番のファイルを使用するのか選択します。[CounterFile entry]のボタンにマウスカーソルを合わせると、登録されているカウンタファイルがポップアップで表示されます。この欄は設定前では赤色に表示されていますが、番号を選択すると白色に戻ります。各項目で複数のイメージデータを設定していれば、カウンタの値も平均値が表示されますが、Dark とその他では計算内容が異なります。Dark に関しては、単純に[I0]と[I1]のダークカウントの平均値が表示されます。一方で、Air～Sample に関しては、[I1/I0]の平均値のみ表示されます。式の詳細は、この項目(⑪ **Background の差引き 2(Sub_2)**)の最後の項で確認して下さい。[Clear]ボタンをクリックすると、この表の全ての設定をクリアできます。

Type	File	Num	CounterFile	I0	I1	I1/I0	Transmittance
Dark	Entry	5 02	▼	1257	1057	---	---
Air	Entry	5 02	▼	---	---	---	---
Cell	Entry	5 02	▼	---	---	---	---
Back	Entry	15 03	▼	---	---	---	---
Samp	Entry	1 01	▼	---	---	---	---

5 files

File: D:\data\ABS\air_00000.cbf
D:\data\ABS\air_00001.cbf
D:\data\ABS\air_00002.cbf
D:\data\ABS\air_00003.cbf
D:\data\ABS\air_00004.cbf

Clear

- C. 使用するAir、Cell、Background、Sample のファイル(dat ファイル)を指定します。[Browse]をクリックしてファイルを指定するか、dat ファイルをブランクBox に Drag&Drop します。いずれのファイルも、事前に円周平均して 1 次元化した dat ファイルを一つ指定します。複数のファイルを平均化して得られた dat ファイルの場合は、B の表において、その平均化に使用した複数のデータを指定すれば、透過率はその平均値が使用されます。[Multi.]欄に値を入力すると、それぞれの散乱強度にその値を掛けることができます。通常は 1.000 となっています。また、Sample の方では、[Conc.(試料の濃度)]を入力する事もできます。濃度の値は出力ファイルのヘッダーに記録され、後の解析時に自動的に読み込まれます。Ver. 1.0.8以前に処理されたファイルを使用する場合は、Individual、All Average の判定は行なわれません。
- D. viに移ります。

- vi. 排除体積効果を考慮するための[Factor]（ここでは Φ としています）を設定します。偏比容(PSV=Partial Specific Volume)の値を入力すれば、[Sample file]欄で設定したConc.(濃度)の値を使用して式に従い Φ 値が計算されます。PSV 値は、タンパク質溶液試料の解析でよく使用される0.734 という値をデフォルトとしていますが、自由に変更可能です。また、1.000 で良い場合や、別途求めた値を使用する場合は、ラジオボタンを[Use Factor]に切り替えて、値を入

力して下さい。

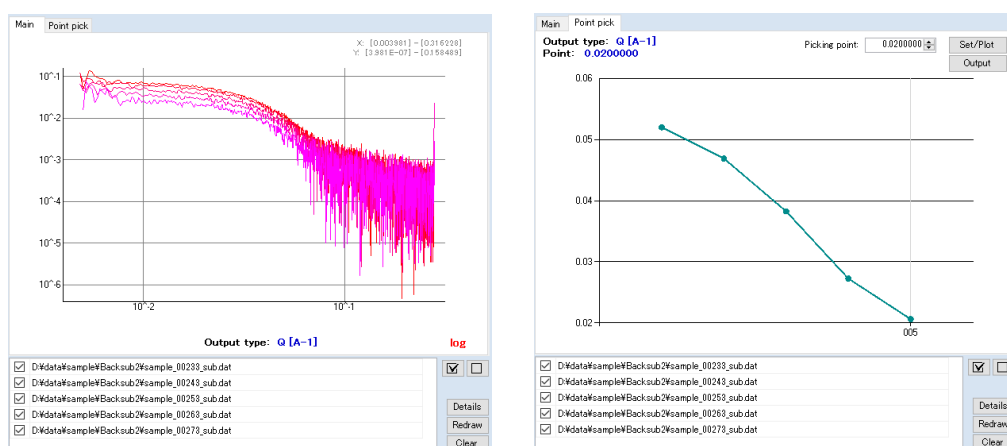
Φ: ☒ Use PSV $1 - (\text{Conc.} * \text{PSV} / 1000)$ Conc: 2.400 PSV: 0.99824
☐ Use Factor

- vii. なお、Sub_2 で使用する計算式がウィンドウの右上に明示されています。

$$\Delta I = \left[\left(\frac{I_{\text{Samp\&Cell}} * \text{Multi}}{T_{\text{Samp\&Cell}}} \right) - \left(\frac{I_{\text{Cell}} * \text{Multi}}{T_{\text{Cell}}} \right) \right] - \phi \left[\left(\frac{I_{\text{Back\&Cell}} * \text{Multi}}{T_{\text{Back\&Cell}}} \right) - \left(\frac{I_{\text{Cell}} * \text{Multi}}{T_{\text{Cell}}} \right) \right] * T = \text{Transmittance}$$

- viii. 全ての準備ができたなら、[Subtract]をクリックします。ファイルが出力されグラフが両対数プロットで表示されます。グラフは、マウスのスクロールで拡大縮小したり、左クリックで拡大したい範囲をドラッグして指定したりすれば拡大します。下のチェック BOX で、チェックを入れたり外したりし、[Redraw] をクリックすれば表示するグラフを選択できます。[Clear]で全消去します。[Details]をクリックすると FLOUNDER ウィンドウ上部にデータのヘッダー情報が示されます。この欄に dat ファイルを Drag&Dropしてもグラフを表示できます。

- ix. グラフウィンドウには 2 つの表示があります。一つは【Main】タブで散乱曲線全体を表示しています。もう一つの【Point pick】タブでは、読み込まれているデータの特定の横軸の値に対する縦軸の値（散乱強度）をプロットすることが可能です。例えば、 $Q[\text{\AA}^{-1}] = 0.01$ に対する散乱強度のプロットを表示したい場合は、[Picking point:]に 0.01 と入力し、[Set/Plot]をクリックします。小角付近の散乱強度変化をプロットすることで、放射線損傷による効果の有無を確認することができます。なお、このプロットのデータを出力することも可能です。[Output]をクリックすると、テキストデータとしてデータを保存できます。



※X線透過率の計算方法(Sub 2, Sub 3共通)

	測定枚数	$I_{0_Darkave} = \frac{\sum_{i=1}^j (I_{0_Dark})_j}{j}, \quad I_{1_Darkave} = \frac{\sum_{i=1}^j (I_{1_Dark})_j}{j}$
<i>Dark</i>	<i>j</i>	
<i>Air</i>	<i>k</i>	
<i>Cell</i>	<i>l</i>	
<i>Back</i>	<i>m</i>	
<i>Samp</i>	<i>n</i>	

$$T_{Samp\&Cell} = \frac{\left\{ \frac{\sum_{i=1}^n \left[\frac{(I_{1_Samp} - I_{1_Darkave})}{(I_{0_Samp} - I_{0_Darkave})} \right]_n}{n} \right\}}{\left\{ \frac{\sum_{i=1}^k \left[\frac{(I_{1_Air} - I_{1_Darkave})}{(I_{0_Air} - I_{0_Darkave})} \right]_k}{k} \right\}}$$

$$T_{Cell} = \frac{\left\{ \frac{\sum_{i=1}^l \left[\frac{(I_{1_Cell} - I_{1_Darkave})}{(I_{0_Cell} - I_{0_Darkave})} \right]_l}{l} \right\}}{\left\{ \frac{\sum_{i=1}^k \left[\frac{(I_{1_Air} - I_{1_Darkave})}{(I_{0_Air} - I_{0_Darkave})} \right]_k}{k} \right\}}$$

$$T_{Back\&Cell} = \frac{\left\{ \frac{\sum_{i=1}^m \left[\frac{(I_{1_Back} - I_{1_Darkave})}{(I_{0_Back} - I_{0_Darkave})} \right]_m}{m} \right\}}{\left\{ \frac{\sum_{i=1}^k \left[\frac{(I_{1_Air} - I_{1_Darkave})}{(I_{0_Air} - I_{0_Darkave})} \right]_k}{k} \right\}}$$

各チャンネルにはダークカウントが存在するので、ダークの値を引きながら、データ1枚ずつ入射強度と透過強度の比を求めて平均化し、最終的にセル(試料)が何も無い状態(Air)に対する透過率を計算している。なお、セルが無い、つまりX線が裸の試料に当るような場合は、Air=Cell、もしくはAir=Cell=Backgroundとして計算することも可能。

※Sub 2での誤差の計算

* Multi=Mとしている

$$\Delta I = \underbrace{\left[\left(\frac{I_{Samp} \times M_{Samp}}{T_{Samp}} \right) - \left(\frac{I_{Cell} \times M_{Cell}}{T_{Cell}} \right) \right]}_A - \phi \underbrace{\left[\left(\frac{I_{Back} \times M_{Back}}{T_{Back}} \right) - \left(\frac{I_{Cell} \times M_{Cell}}{T_{Cell}} \right) \right]}_B = A - \phi B$$

に対して、A, Bの2つの項は、それぞれSub_1の誤差計算と同様に、

$$\sigma_A = \sqrt{\left(\frac{\sigma I_{Samp} \times M_{Samp}}{T_{Samp}} \right)^2 + \left(\frac{\sigma I_{Cell} \times M_{Cell}}{T_{Cell}} \right)^2} \quad \sigma_B = \sqrt{\left(\frac{\sigma I_{Back} \times M_{Back}}{T_{Back}} \right)^2 + \left(\frac{\sigma I_{Cell} \times M_{Cell}}{T_{Cell}} \right)^2}$$

と考えられる。従って、最終的に計算される誤差 σ_m は、

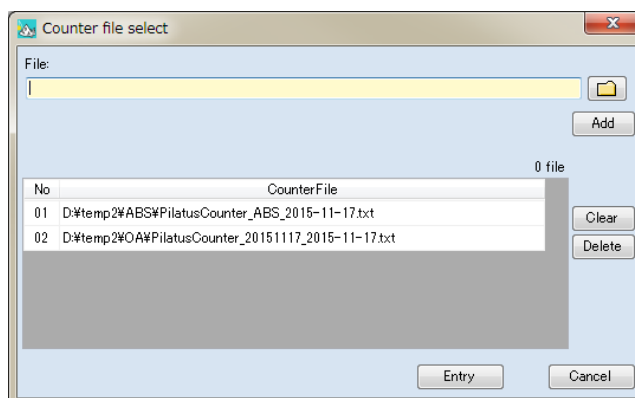
$$\begin{aligned} \Delta \sigma I &= \sqrt{(\sigma_A)^2 + (\phi \sigma_B)^2} \\ &= \sqrt{\left\{ \left[\left(\frac{\sigma I_{Samp} \times M_{Samp}}{T_{Samp}} \right)^2 + \left(\frac{\sigma I_{Cell} \times M_{Cell}}{T_{Cell}} \right)^2 \right]^{1/2} \right\}^2 + \left\{ \phi \times \left[\left(\frac{\sigma I_{Back} \times M_{Back}}{T_{Back}} \right)^2 + \left(\frac{\sigma I_{Cell} \times M_{Cell}}{T_{Cell}} \right)^2 \right]^{1/2} \right\}^2} \\ &= \sqrt{\left(\frac{\sigma I_{Samp} \times M_{Samp}}{T_{Samp}} \right)^2 + \left(\frac{\sigma I_{Cell} \times M_{Cell}}{T_{Cell}} \right)^2 + \phi^2 \times \left[\left(\frac{\sigma I_{Back} \times M_{Back}}{T_{Back}} \right)^2 + \left(\frac{\sigma I_{Cell} \times M_{Cell}}{T_{Cell}} \right)^2 \right]} \\ &= \left[\left(\frac{\sigma I_{Samp} \times M_{Samp}}{T_{Samp}} \right)^2 + \phi^2 \left(\frac{\sigma I_{Back} \times M_{Back}}{T_{Back}} \right)^2 + (1 + \phi^2) \left(\frac{\sigma I_{Cell} \times M_{Cell}}{T_{Cell}} \right)^2 \right]^{1/2} \end{aligned}$$

⑫ Background の差引き 3 (Sub_3)

Sub_3 では、空の試料セルの散乱強度を引きながら、空のセル・Background・Sample 測定でのX線透過率を考慮した計算を、多数のファイルに対して行うことができます(Sub_2 で試料濃度の排除体積効果を 1 とした計算になります。)。

※ 基本的な設定方法は Sub_2 と同じですが、排除体積効果の項中の設定が無く、また多数の Sample データを一度に読み込める点が異なります。

- i. [Output:]に計算結果を出力するディレクトリを指定します。  をクリックして選択するか、直接編集します。
- ii. 続いて、透過率の計算のために必要なカウンタファイルを設定するために、カウンタファイルの仕様を指定する「Facility」を選択します(基本的には【Ave】タブでの設定をそのまま引継いでいるので、同じ設定で処理を進める場合は変更する必要はありません)。PF と SPring-8 BL38B1、BL45XU(2018 年 12 月まで)、40B2 のカウンタファイルの形式に対応しています。
- iii. 次に、[CounterFile entry]で、使用するカウンタファイルを設定します(基本的には【Ave】タブでの設定をそのまま引継いでいるので、同じ設定で処理を進める場合は変更する必要はありません)。クリックすると[Counter file select]ダイアログが開きます。  をクリックしてカウンタファイルを選択し、その後[Add]ボタンを押すと、ダイアログ下側のリスト欄に移ります。これで選択完了です。この欄にファイルを Drag&Drop する事も可能で、その場合は直ぐに選択完了になります。一方で、使用するカウンタファイルが複数存在する場合は、複数個のカウンタファイルを指定することができます。例えば、Dark、Air、Cell に対応したカウンタファイルと、Background、Sample に対応するカウンタファイルが異なる場合は、そのファイルをそれぞれ読み込んでおくことになります。カウンタファイルは読み込んだ順番に番号が設定されますので、(ix)の設定ではこの番号をそれぞれ指定します。設定が完了したら[Entry]をクリックして閉じます。



- iv. [I0 cnt:]に試料前の入射 X 線強度のチャンネル、[I1 cnt:]に試料後の透過 X 線強度のチャンネルを指定します。PF では、入射X 線強度はC2、透過X 線強度はC4(ビームストッパーに仕込まれたフォトダイオード)になっているのが一般的です。SPring-8 の BL38B1 では、C2 が試料前

のマイクロイオンチャンバ、C3 が試料後のフォトダイオード(ビームストッパー埋め込み)となっています。BL45XU(2018 年 12 月まで)では、MIC up が試料前、MIC down が試料後、40B2 では、C3 が試料前、C4 が試料後となっています(念のため担当者に確認して下さい)。

Facility: PF CounterFile entry 2 files I0 cnt: C2 I1 cnt: C4

- v. 次に、処理に使用する Dark、Air、Cell、Background、Sample の計測データと、透過率の計算に必要なカウンタファイルを設定しますが、Ver. 1.0.8以前と1.0.8以降で処理の手順が異なります。

● FLOUNDER Ver 1.0.8 以降に処理されたファイルを使用する場合

- A. FLOUNDER Ver 1.0.8 以前に円周平均処理したファイルを使用する場合表の部分では、Dark のみ【Ave】タブで設定した内容が反映されています。Air 以下は使用しません。その下の Air、Cell、Background、Sample のデータを指定する欄に移ります。

Air、Cell の箇所には空気散乱のデータ(Air file)と試料セルのデータ(試料無しのセルのみのデータ、Cell file)を指定します(ともに dat ファイル)。
[Browse]をクリックしてファイルを指定するか、dat ファイルを空白 Box に Drag&Drop します。dat ファイルなので、事前に円周平均して 1 次元化しておく必要があります。

Type	File	Num	CounterFile	I0	I1	I1/I0	Transmittance	
Dark	Entry	5	02	1257	1057	---	---	Clear
Air	Entry	5		---	---	---	---	
Cell	Entry	5		---	---	---	---	
Back	Entry	15		---	---	---	---	

Air file		Conc.	Multi.	Browse
☒	D\data\ABS\air_ave.dat	---	1.000	Clear
Cell file		Conc.	Multi.	Browse
☒	D\data\ABS\cell5_ave.dat	---	1.000	Clear
Background file		Conc.	Multi.	Browse
				Clear

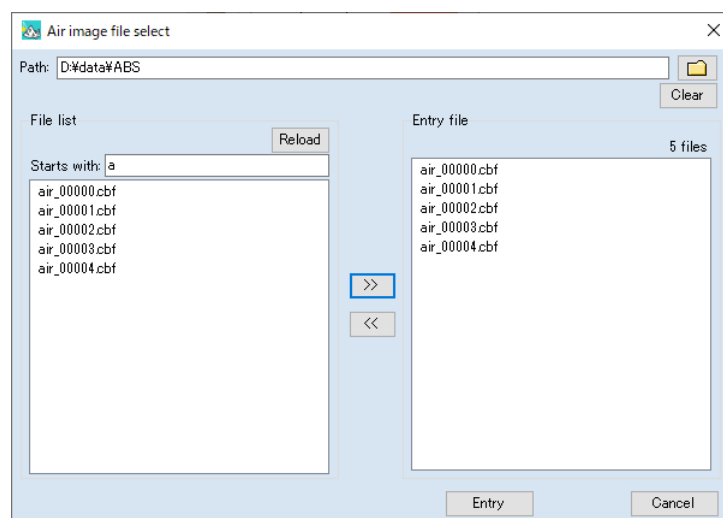
- B. 使用する Background のファイル(dat ファイル)を指定します。
[Browse]をクリックしてファイルを指定するか、dat ファイルを空白 Box に Drag&Drop します。事前に円周平均して 1 次元化した dat ファイルを一つ指定します。
[Multi.]欄に値を入力すると、散乱強度にその値を掛けることができます。通常は 1.000 となっています。

Type	File	Num	CounterFile	I0	I1	I1/I0	Transmittance
Dark	Entry	5	02	1257	1057	---	---
Air	Entry	5		---	---	---	---
Cell	Entry	5		---	---	---	---
Back	Entry	15		---	---	---	---

Air file		Conc.	Multi.	Browse
☒	D\data\ABS\air_ave.dat	---	1.000	Clear
Cell file		Conc.	Multi.	Browse
☒	D\data\ABS\cell5_ave.dat	---	1.000	Clear
Background file		Conc.	Multi.	Browse
☒	D\data\buffer\CirAve\buffer_ave.dat	---	1.000	Clear

☒ Individual ☒ AllAverage

- C. 4つのファイルが適切に読み込まれると、上の表で Air から Back までの部分は無効を示す灰色の表示になります。また、この欄では、これらの dat ファイルが1枚の画像データを個別処理したファイルなのか (Individual: 黄色)、複数の画像データを平均化したファイルなのか (All Average: 緑色) なのかを判別しています。
- D. vi に移ります。
- FLOUNDER Ver 1.0.8 以前に円周平均処理したファイルを使用する場合
 - A. 透過率の計算を行なうために、次の表に Dark、Air、Cell、Background を計測したそれぞれのデータを指定してきます。Dark は、【Ave】タブで設定した内容になっていますが、変更する場合は、以下と同様に編修します。各項目で [Entry] をクリックすると、イメージデータのファイルを選択するダイアログが開きます。[Path:] にデータのあるディレクトリを指定します。📁 を押すか、直接編集 (コピーペーストも可) します。Reload をクリックすると、ディレクトリ内のイメージデータが一覧で表示されますので、該当するファイルを複数枚同時に選択します (1 枚でも可)。OS の機能が使えますので、例えば [ctrl] キーを押しながら複数枚クリックして選択も出来ますし、単にマウスでクリックしながらドラッグすれば複数枚選択できます。[Starts with:] はフィルターの機能で、ファイル名の頭から他のファイルを排除できる文字列を入力すると、特定のデータセットだけを表示させる事ができます。その状態で [ctrl + A] を押せば全選択できます。>> をクリックするとファイルが右側に移り確定します。完了したら [Entry] をクリックしてダイアログを閉じます。この操作をそれぞれ繰り返していきます。



- B. イメージデータの選択が完了したら、[CounterFile] の欄で、(iii) で設定したカウンタファイルの中から、それぞれ何番のファイルを使用するのか選択します。[CounterFile entry] のボタンにマウスカーソルを合わせると、登録されているカウンタファイルがポップアップで表示されます。この欄は設定前では赤色に表示されていますが、番号を選択すると白色に戻ります。各項目で複数のイメージデータを設定していれば、カウンタの値も

平均値が示されますが、Dark とその他では計算内容が異なります。Dark に関しては、単純に[I0]と[I1]のダークカウントの平均値が示されます。一方で、Air～Sample に関しては、[I1/I0]の平均値のみ示されます。式の詳細は、この項目(⑫ **Background の差引き 3(Sub_3)**)の最後の項で確認して下さい。[Clear]ボタンをクリックすると、この表の全ての設定をクリアできます。

Type	File	Num	CounterFile	I0	I1	I1/I0	Transmittance
Dark	Entry	5 02	▼	1257	1057	---	---
Air	Entry	5 02	▼	---	---	---	---
Cell	Entry	5 02	▼	---	---	---	---
Back	Entry	15 03	▼	---	---	---	---

File: D:\data\buffer\buffer_00000.cbf
 D:\data\buffer\buffer_00001.cbf
 D:\data\buffer\buffer_00002.cbf
 D:\data\buffer\buffer_00003.cbf
 D:\data\buffer\buffer_00004.cbf

15 files

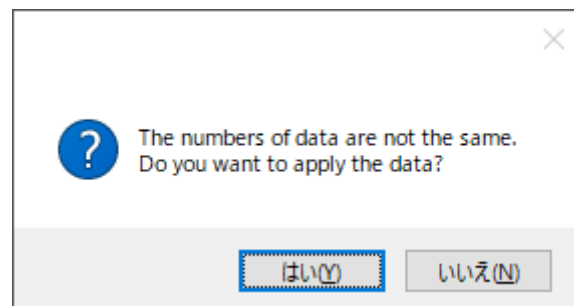
- C. 使用する Air、Cell、Background のファイル(dat ファイル)を指定します。[Browse]をクリックしてファイルを指定するか、dat ファイルをブランク Box に Drag&Drop します。いずれのファイルも、事前に円周平均して 1 次元化した dat ファイルを一つ指定します。複数のファイルを平均化して得られた dat ファイルの場合は、B の表において、その平均化に使用した複数のデータを指定すれば、透過率はその平均値が使用されます。[Multi.]欄に値を入力すると、それぞれの散乱強度にその値を掛けることができます。通常は 1.000 となっています。Ver. 1.0.8以前に処理されたファイルを使用する場合は、Individual、All Average の判定は行なわれません。
- D. viに移ります。
- vi. 続いて、Sample のファイルを読み込みます。[Sample file]欄に、何個でも一度に入力できます(基本的に制限はありません)。[Browse]をクリックしてファイルを指定しますが、複数個指定する場合は、ctrl キーや shift キーを押しながらクリックして選択して下さい。この欄にファイルを Drag&Drop することも可能です。一度に複数のファイルを選択して Drop して下さい。また、iii の [CounterFile entry]で設定したカウンタファイルの内、Sample の値を記録しているファイルの番号を [Counter file]で設定します。
- vii. [Multi.]欄に値を入力すると、散乱強度にその値を掛けることができます。通常は1.000 となっています。また、Sample の方では、[Conc.(試料の濃度)]を入力する事もできます。濃度の値は出力ファイルのヘッダーに記録され、後の解析時に自動的に読み込まれます。[Multi.]や[Conc.]の値は1行ずつ設定することもできますが、複数のデータを読み込んでいる場合は、Excel 等から表データとしてコピーして、この欄にペーストすることもできます。

The diagram illustrates the data transfer process between the FLOUNDER software and an Excel spreadsheet. The software interface (top left) shows a table with columns: Sample file, Conc., Multi., I1/I0, and Transmittance. The Excel spreadsheet (top right) shows columns A (multi) and B (conc). A blue arrow indicates data being copied from the Excel 'multi' column to the software's 'Multi' column. A black arrow indicates data being copied from the software's 'Conc' column to the Excel 'conc' column.

Sample file	Conc.	Multi.	I1/I0	Transmittance
D:\data\sample\CirAve\...	1.000	1.000	---	---
D:\data\sample\CirAve\...	1.000	1.000	---	---
D:\data\sample\CirAve\...	1.000	1.000	---	---

Sample file	Conc.	Multi.	I1/I0	Transmittance
D:\data\sample\CirAve\...	10.000	0.100	---	---
D:\data\sample\CirAve\...	9.000	0.100	---	---
D:\data\sample\CirAve\...	8.000	0.100	---	---

(例) 10 個のファイルを読み込んで、Conc や Multi を入力したい場合、Excel で Conc や Multi が 1 列に並んでいるデータを用意し、表データとして FLOUNDER の Conc や Multi 列にコピーペーストできます。ただし、1 列ずつしかコピーできません。コピーするデータの個数が一覧で表示されているデータ数より多い場合は確認メッセージが表示されます。



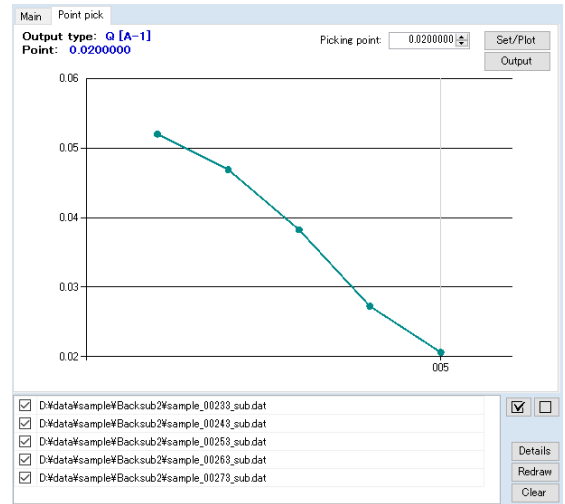
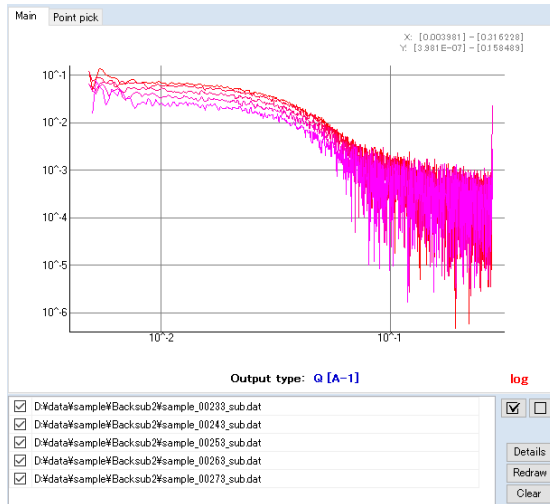
viii. Sub_3 で使用する計算式がウィンドウの右上に明示されています。

Subtract_3

$$\Delta I = \left[\left(\frac{I_{\text{Samp\&Cell}} * \text{Multi}}{T_{\text{Samp\&Cell}}} \right) - \left(\frac{I_{\text{Cell}} * \text{Multi}}{T_{\text{Cell}}} \right) \right] - \left[\left(\frac{I_{\text{Back\&Cell}} * \text{Multi}}{T_{\text{Back\&Cell}}} \right) - \left(\frac{I_{\text{Cell}} * \text{Multi}}{T_{\text{Cell}}} \right) \right] \quad *T = \text{Transmittance}$$

ix. 全ての準備ができたなら、[Subtract]をクリックします。ファイルが出力されグラフが両対数プロットで表示されます。グラフは、マウスのスクロールで拡大縮小したり、左クリックで拡大したい範囲をドラッグして指定したりすれば拡大します。下のチェック BOX で、チェックを入れたり外したりし、[Redraw] をクリックすれば表示するグラフを選択できます。[Clear]で全消去します。[Details]をクリックすると FLOUNDER ウィンドウ上部にデータのヘッダー情報が示されます。この欄に dat ファイルを Drag&Dropしてもグラフを表示できます。

- x. グラフウィンドウには 2 つの表示があります。一つは【Main】タブで散乱曲線全体を表示しています。もう一つの【Point pick】タブでは、読み込まれているデータの特定の横軸の値に対する縦軸の値（散乱強度）をプロットすることが可能です。例えば、 $Q[\text{\AA}^{-1}] = 0.01$ に対する散乱強度のプロットを表示したい場合は、[Picking point:]に 0.01 と入力し、[Set/Plot]をクリックします。小角付近の散乱強度変化をプロットすることで、放射線損傷による効果の有無を確認することができます。なお、このプロットのデータを出力することも可能です。[Output]をクリックすると、テキストデータとしてデータを保存できます。



※X線透過率の計算方法(Sub 2, Sub 3共通)

	測定枚数	$I_{0_Darkave} = \frac{\sum_{i=1}^j (I_{0_Dark})_j}{j}, \quad I_{1_Darkave} = \frac{\sum_{i=1}^j (I_{1_Dark})_j}{j}$
<i>Dark</i>	<i>j</i>	
<i>Air</i>	<i>k</i>	
<i>Cell</i>	<i>l</i>	
<i>Back</i>	<i>m</i>	
<i>Samp</i>	<i>n</i>	

$$T_{Samp\&Cell} = \frac{\left\{ \frac{\sum_{i=1}^n \left[\frac{(I_{1_Samp} - I_{1_Darkave})}{(I_{0_Samp} - I_{0_Darkave})} \right]_n}{n} \right\}}{\left\{ \frac{\sum_{i=1}^k \left[\frac{(I_{1_Air} - I_{1_Darkave})}{(I_{0_Air} - I_{0_Darkave})} \right]_k}{k} \right\}}$$

$$T_{Cell} = \frac{\left\{ \frac{\sum_{i=1}^l \left[\frac{(I_{1_Cell} - I_{1_Darkave})}{(I_{0_Cell} - I_{0_Darkave})} \right]_l}{l} \right\}}{\left\{ \frac{\sum_{i=1}^k \left[\frac{(I_{1_Air} - I_{1_Darkave})}{(I_{0_Air} - I_{0_Darkave})} \right]_k}{k} \right\}}$$

$$T_{Back\&Cell} = \frac{\left\{ \frac{\sum_{i=1}^m \left[\frac{(I_{1_Back} - I_{1_Darkave})}{(I_{0_Back} - I_{0_Darkave})} \right]_m}{m} \right\}}{\left\{ \frac{\sum_{i=1}^k \left[\frac{(I_{1_Air} - I_{1_Darkave})}{(I_{0_Air} - I_{0_Darkave})} \right]_k}{k} \right\}}$$

各チャンネルにはダークカウントが存在するので、ダークの値を引きながら、データ1枚ずつ入射強度と透過強度の比を求めて平均化し、最終的にセル(試料)が何も無い状態(Air)に対する透過率を計算している。なお、セルが無い、つまりX線が裸の試料に当たるような場合は、Air=Cell、もしくはAir=Cell=Backgroundとして計算することも可能。

※Sub 3での誤差の計算(Sub 2でΦ=1と考える)

* Multi=Mとしている。

$$\Delta I = \underbrace{\left[\left(\frac{I_{Samp} \times M_{Samp}}{T_{Samp}} \right) - \left(\frac{I_{Cell} \times M_{Cell}}{T_{Cell}} \right) \right]}_A - \underbrace{\left[\left(\frac{I_{Back} \times M_{Back}}{T_{Back}} \right) - \left(\frac{I_{Cell} \times M_{Cell}}{T_{Cell}} \right) \right]}_B = A - B$$

に対して、A, Bの2つの項は、それぞれSub_1の誤差計算と同様に、

$$\sigma_A = \sqrt{\left(\frac{\sigma I_{Samp} \times M_{Samp}}{T_{Samp}} \right)^2 + \left(\frac{\sigma I_{Cell} \times M_{Cell}}{T_{Cell}} \right)^2} \quad \sigma_B = \sqrt{\left(\frac{\sigma I_{Back} \times M_{Back}}{T_{Back}} \right)^2 + \left(\frac{\sigma I_{Cell} \times M_{Cell}}{T_{Cell}} \right)^2}$$

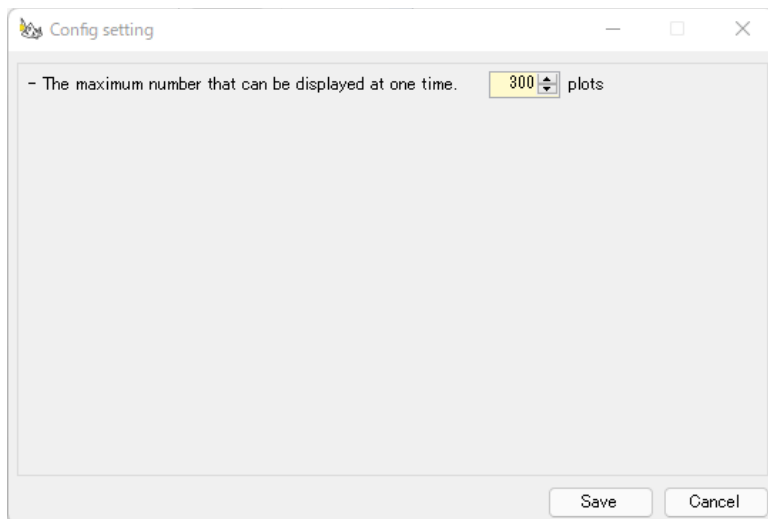
と考えられる。従って、最終的に計算される誤差σ_mは、

$$\begin{aligned} \sigma_m &= \sqrt{(\sigma_A)^2 + (\sigma_B)^2} \\ &= \sqrt{\left\{ \left[\left(\frac{\sigma I_{Samp} \times M_{Samp}}{T_{Samp}} \right)^2 + \left(\frac{\sigma I_{Cell} \times M_{Cell}}{T_{Cell}} \right)^2 \right]^{1/2} \right\}^2 + \left\{ \left[\left(\frac{\sigma I_{Back} \times M_{Back}}{T_{Back}} \right)^2 + \left(\frac{\sigma I_{Cell} \times M_{Cell}}{T_{Cell}} \right)^2 \right]^{1/2} \right\}^2} \\ &= \sqrt{\left(\frac{\sigma I_{Samp} \times M_{Samp}}{T_{Samp}} \right)^2 + \left(\frac{\sigma I_{Cell} \times M_{Cell}}{T_{Cell}} \right)^2 + \left(\frac{\sigma I_{Back} \times M_{Back}}{T_{Back}} \right)^2 + \left(\frac{\sigma I_{Cell} \times M_{Cell}}{T_{Cell}} \right)^2} \\ &= \left[\left(\frac{\sigma I_{Samp} \times M_{Samp}}{T_{Samp}} \right)^2 + \left(\frac{\sigma I_{Back} \times M_{Back}}{T_{Back}} \right)^2 + 2 \left(\frac{\sigma I_{Cell} \times M_{Cell}}{T_{Cell}} \right)^2 \right]^{1/2} \end{aligned}$$

⑬ 解析 (Analysis)

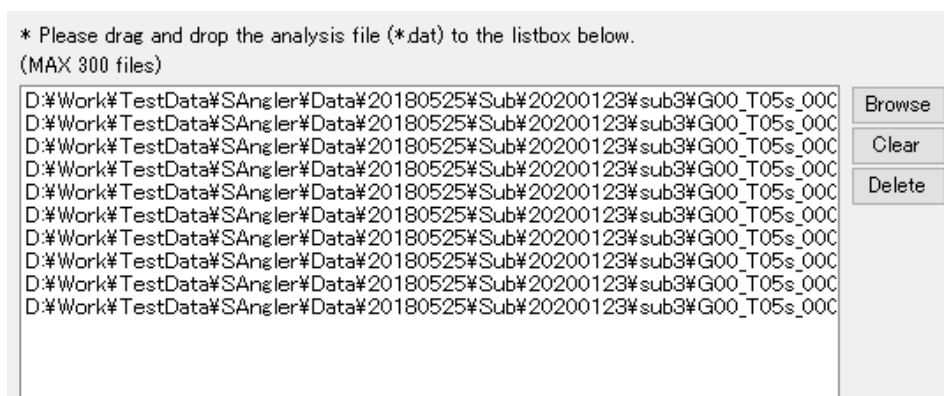
Average処理やSubtract処理で得られたデータからグラフを作成して解析を行います。
メニュー[Analysis] - [AnalysisTool]を選択するとAnalysisTool.exeが起動します。

- i. 初めて起動した場合は ConfigSetting で各種設定を行います。ウィンドウメニューから[Options] - [Config setting]を実行します。



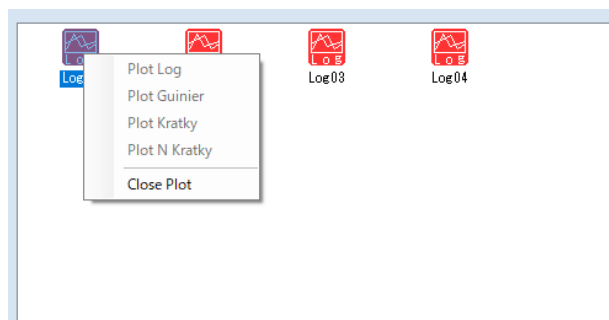
- The maximum number that can be display at one time.	同時に解析・表示できるデータ最大値。初期値は 300 です。動作が不安定な場合は数値を減らしてみてください。
---	--

- ii. まず、データを読み込みます。[Browse]をクリックするとファイルを選択するダイアログが表示されます。読み込みたいファイルを選択してください。複数個指定する場合は、[ctrl]キーや[shift]キーを使って選択して下さい。この欄に直接ファイルを Drag&Drop する事で設定することができます。複数ファイル設定する場合は複数のファイルを選択して Drop して下さい (最大 300 個、FLOUNDERのConfigSetting で変更可)。

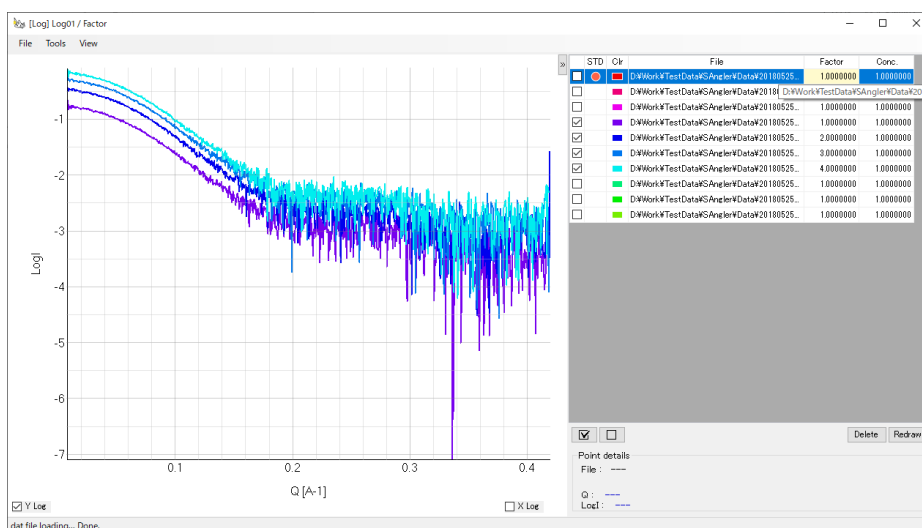


現在、AnalysisTool を FLOUNDER から起動すると、Y 軸となる散乱強度 I を常用対数表示した「Log プロット(LogY)」のプロットのみ作成することが可能です。[LogY]ボタンをクリックすることで指定したファイルの順番に、別ウィンドウにグラフが表示されます。リストを変更する場合は、[Clear]を押してリストを消去し、新しいファイルを読み込んで下さい。

- iii. グラフが表示されると、メインウィンドウ右側にグラフがアイコンで表示されます。FLOUNDER から起動の場合、ほかの種類のグラフを作成することはできません。LogY のグラフのみ複数作成することができます。



(1) LogY プロット



- A) 新たに開いたグラフウィンドウの左側にはグラフが、右側にファイルリストが表示されています。リストの一番左のチェックボックスでグラフを表示／非表示にすることができます。リスト内の[Conc.]には Subtraction 時に入力した濃度の値が読み込まれています。[Factor]に値を入力すると、Y 軸の値に掛けることができます。また、後で説明する規格化を行なった際には、自動的に規格化のFactor が表示されます。グラフでは、マウスのスクロールで拡大縮小します。また左クリックで表示範囲を Drag して指定すれば、その範囲を拡大します。右クリックすると、元に戻ります。グラフにデータを追加したい場合は、ファイルメニューの[File] - [Input]から読み込むか、ウィンドウ右側のファイルリストの欄にデータを Drag&Drop すれば追加できます。

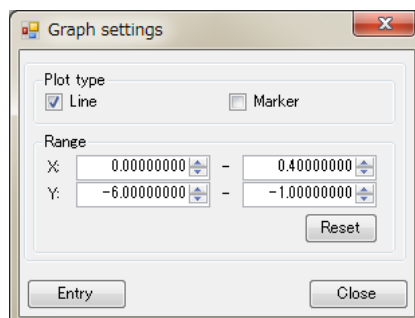
- B) 軸下部に Log 表示切替用のチェックボックスがあります。必要に応じてチェックを入れてください。

☒ Y Log

Q [A-1]

☐ X Log

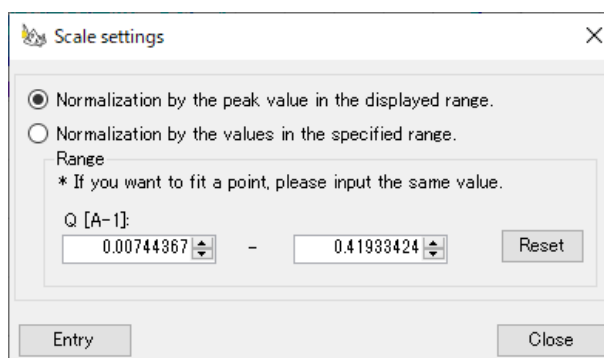
- C) ファイルメニューの[View] - [Graph settings]では、グラフのプロットスタイルや X 軸、Y 軸の表示範囲等を設定します。範囲を指定したら、[Entry]をクリックします。



The 'Graph settings' dialog box has a title bar with a close button. It contains two sections: 'Plot type' with radio buttons for 'Line' (selected) and 'Marker'; and 'Range' with input fields for X (0.00000000 to 0.40000000) and Y (-6.00000000 to -1.00000000), each with a 'Reset' button. At the bottom are 'Entry' and 'Close' buttons.

- D) [Tools] - [Normalization]では、Y 軸の値を規格化することができます。[Scale]では、指定した X 軸範囲の Y 軸のデータを使って規格化します。[Concentration]では、[Conc.]の値を使って規格化します。**規格化は、ファイルリストで「STD」に●が付いたデータを基準として実施されます。**

	STD	Clr	
☐			D:\W\
☐			D:\W\
☒			D:\W\
☒			D:\W\
☒			D:\W\



The 'Scale settings' dialog box has a title bar with a close button. It contains two radio buttons: 'Normalization by the peak value in the displayed range.' (selected) and 'Normalization by the values in the specified range.'. Below is a 'Range' section with a note: '* If you want to fit a point, please input the same value.' It has input fields for Q [A-1] (0.00744367 to 0.41933424) and a 'Reset' button. At the bottom are 'Entry' and 'Close' buttons.

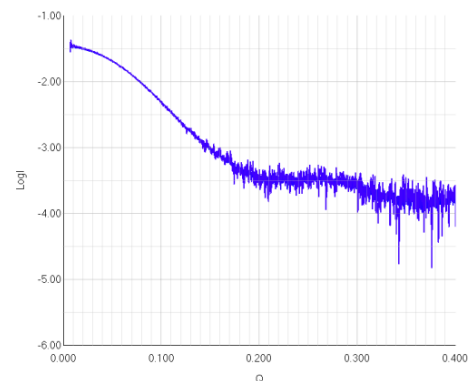
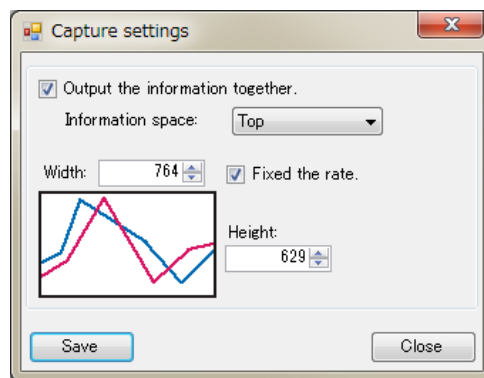
- E) [Scale]を選択するとダイアログが表示されます。[Normalization by the peak value in the displayed range]を選択すると、グラフの表示範囲のピークの値で規格化します。[Normalization by the values in the specified range]を選択すると、規格化する X 軸の領域を指定して、その領域を合わせるように規格化します。特定の X 軸のポイントで規格化したい場合は、2 つのブランクに同じ値を入力して下さい。[Entry]をクリックすると実行されます。[Concentration]も同様です。[Reset]を実行すると元に戻ります。

- F) 表示したグラフのデータを出力することができます。[File] - [Output] - [Output data file] を実行します。出力ディレクトリを設定し、それぞれのデータを個別に出力する[Individual]か、データを 1 個のファイルにまとめる[One file]、もしくは両方にチェックを入れます。[One file]の場合は、保存するファイル名を入力します。[Save]クリックでデータが出力されます。ファイル内には、X 軸の値、散乱強度 I 、散乱強度の標準誤差 σI 、グラフの X 軸の値、散乱強度の常用対数 $\text{Log } I$ 、 $\text{Log } I$ の標準誤差 $\sigma \text{Log } I$ が順番に記録されています。さらに、規格化を行なった場合は、規格化後の値も $\text{Log } I_{\text{norm}}$ 、 $\sigma \text{Log } I_{\text{norm}}$ として出力されています。

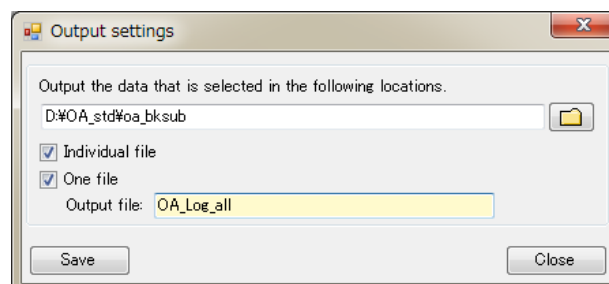
※LogY プロットで Y 軸 Log 表示切替チェックボックスの状態により出力項目が変化します。

Log 表示: X、 I 、 $\text{Sig } I$ 、 $X1(X)$ 、 $\text{Log } I$ 、 $\text{Log } I_{\text{Sig}}$

リニア表示: X、 I 、 $\text{Sig } I$



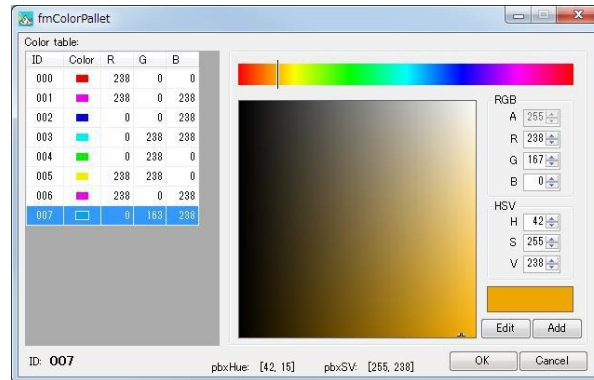
- G) 表示しているグラフを画像 (jpg、png、bmp) として出力することも可能です。[File] - [Output] - [Capture image] を実行します。ダイアログでは、ファイルリストと一緒に画像として保存する場合は、[Output the information together] にチェックを入れます。画像の縦横比は保存するように、初期設定では [Fixed the rate] にチェックが入っています。画像サイズを大きくして保存する場合は、Width や Height (ピクセル数) を変更して下さい。設定が完了したら [Save] をクリックします。保存する場所を続けて指定すると、画像ファイルが出力されます。



※グラフの色を変更するには

グラフの色は、ソフトが自動的に割り振るようになっていますが、以下の手順によってマニュアルで変更する事も可能です。

- (1) 各グラフ Window 右側のファイルリストで、変更したいデータの[Clr]、すなわち Color の欄をクリックすると[ColorPallet]という別 Window が開きます。



- (2) 左側に現在のグラフで使用している Color table が表示されています。このテーブルにある色と入れ替えたい場合は、その色 (ID) をクリックして、[OK]を押します。
- (3) 別の色を新たに加えたい場合は、右側のパレットにて色を調整して[Add]をクリックします。すると、左側の table にその色が追加されますので、(2)同様に選択して[OK]を押します。
- (4) [OK]をクリックすると「Regist Color table data?」と聞かれるので、[はい]をクリックします。
- (5) これで色が変更されます。

⑭ Cormap Maker

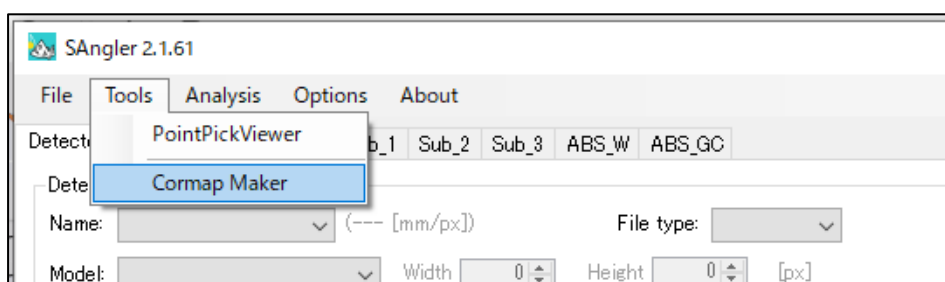
(概要)

最新のSAXS測定では、PILATUS (Dectris) などの高速読出し可能な検出器を使用して、短時間露光を複数回測定 (例えば、1秒露光を10枚測定など) した後、S/Nの向上のためにそれらのデータを平均化して解析を進めます。このような方法は、データへの放射線損傷の影響を検証するために非常に有効ですが、平均化するためには複数回測定のデータが全て同一と見なせることを明確にしなければなりません。SAngrerでは以前より、CirAveやSubタブにおいて、指定したX軸位置のY値をプロットする機能 (Point Pick) をウィンドウ右側のグラフ部に実装しており、複数回測定された値の変動具合に基づき放射線損傷を評価できるようにしています。近年、このような放射線損傷の影響など、データの均一性を定量的に評価するために、データ点間の相関マップ (Correlation map) を作成する方法が提案されています。そこで、SAngrerにもCorrelation mapを作成するツール、Cormap Makerを新たに追加しました。Correlation mapによる評価の詳細に関しては、以下の論文を参照してください。

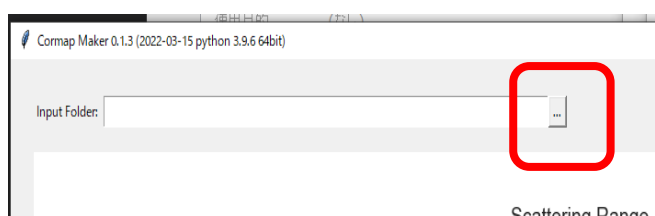
[1] Franke, D., Jeffries, C. M. and Svergun, D. I. Correlation Map, a goodness-of-fit test for one-dimensional X-ray scattering spectra. *Nature Methods* **12**, 419-422 (2015). doi:10.1038/nmeth.3358

[2] Brooks-Bartlett, J. C., Batters, R. A., Bury, C. S., Lowe, E. D., Ginn, H. M., Round, A. and Garman, E. F. Development of tools to automate quantitative analysis of radiation damage in SAXS experiments. *J. Synchrotron Rad.* **24**, 63-72 (2017). doi:10.1107/S1600577516015083.

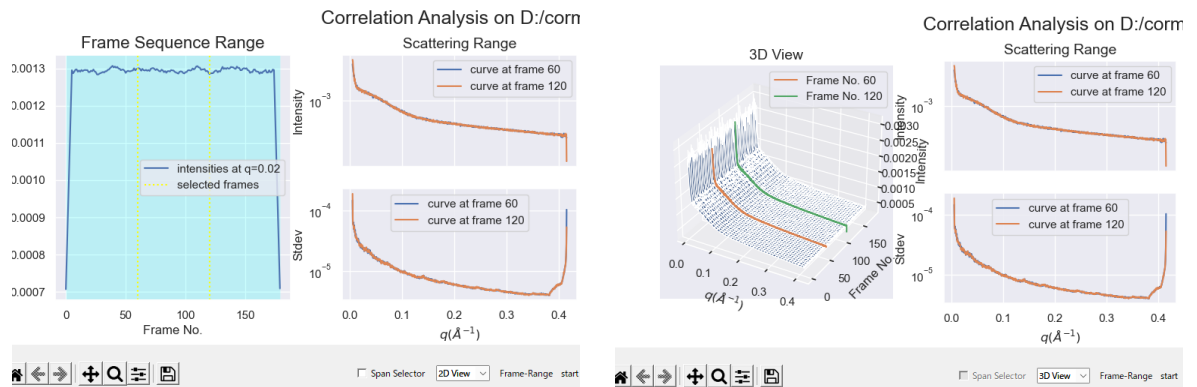
- i. メインウィンドウ左上部メニューから[Tools] - [Cormap Maker]を選択して起動します。



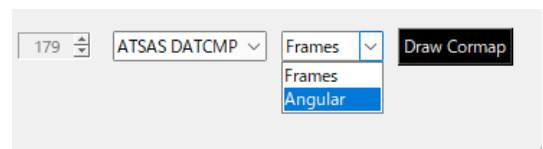
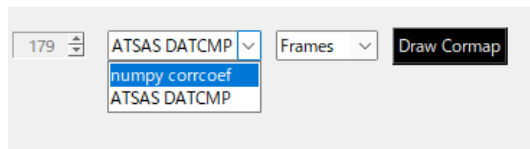
- ii. [Input Folder:]に、マップを計算したい dat ファイルがあるフォルダを指定します。[...]ボタンを押下するとフォルダの選択ダイアログが表示されます。また直接対象フォルダを Drag&Drop しても指定することができます。



- iii. 指定したフォルダ内のデータが画面に反映されます。左側のグラフは読込んだデータ全体を示していますが、ウィンドウ下部のプルダウンメニューで「2D View (特定の X 軸位置の値のプロット)」、もしくは「3D View (データ全体のマトリックス表示)」を切替える事ができます。

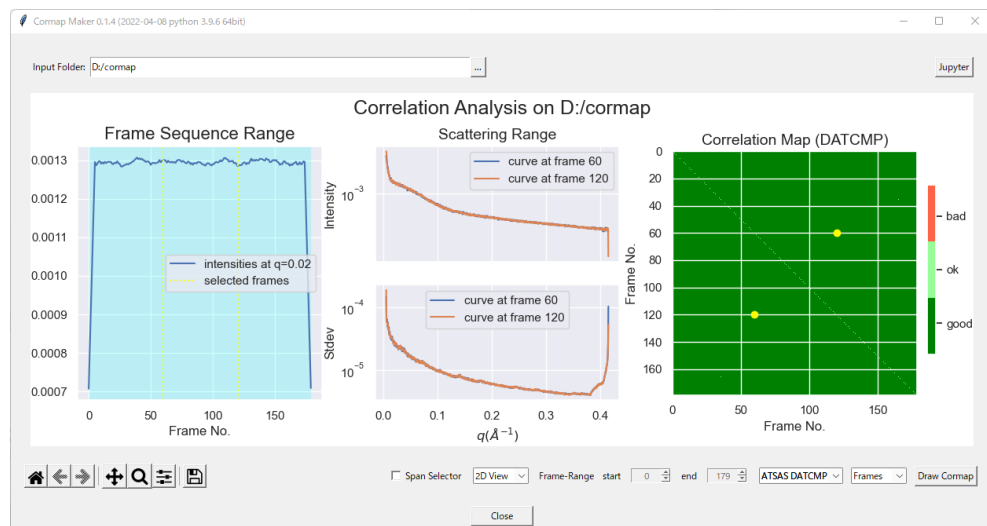


- iv. Correlation map は 2 つのアルゴリズムを使用して作成することができます。一つは、ATSAS の DATCMP、もう一つは Python の拡張モジュールである NumPy(numpy.corrcoef)です。プルダウンから選択して下さい。また、Correlation Map を「Frames(データ間)」で作成するか、「Angular(角度、Q、すなわち X 座標)」で作成するか選択します。DATCMP では「Frames」のみの選択になります。これらの設定をして、[Draw Cormap]ボタンを押します。

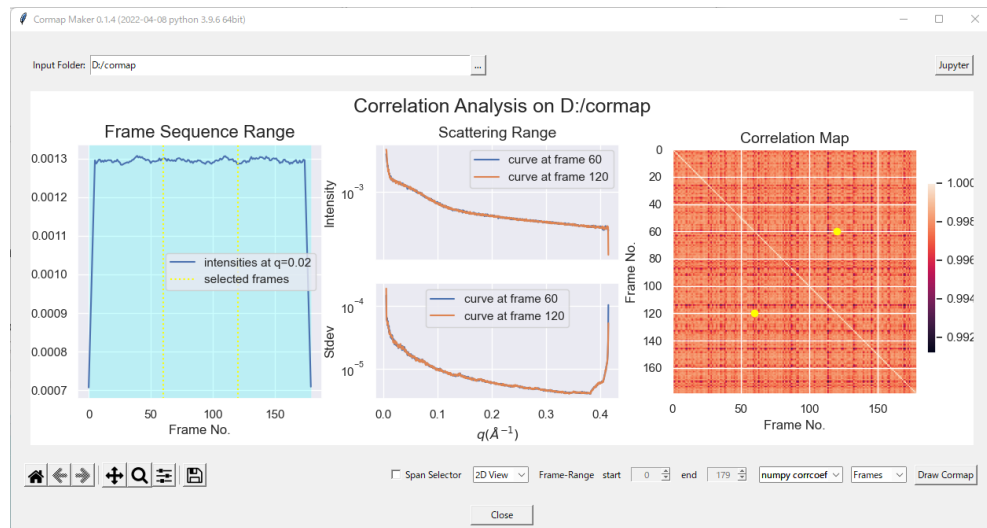


- v. Correlation map は以下の様に表示されます。

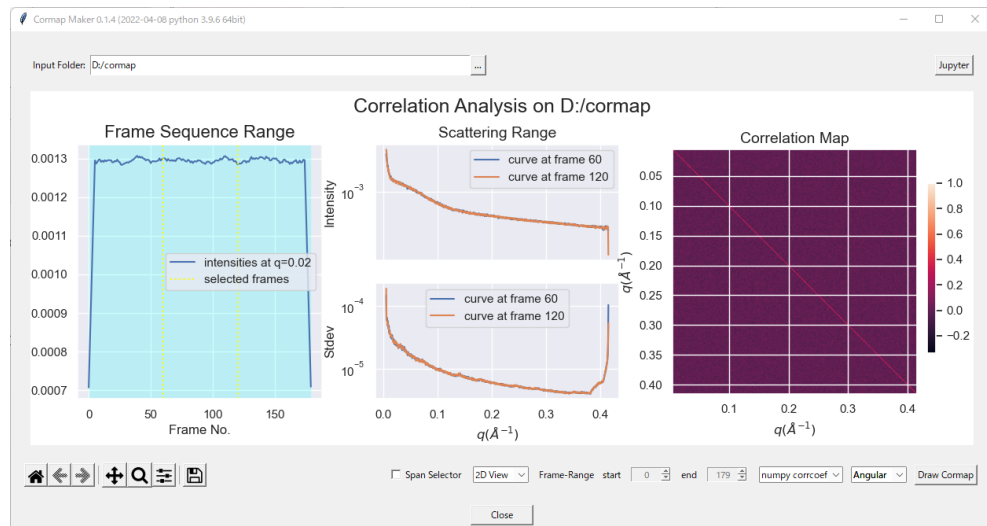
I. Frame 間の Correlation map(ATSAS DATCMP)



II. Frame 間の Correlation map(numpy.corrcoef)



III. Angular 間の Correlation map(numpy.corrcorcoef)

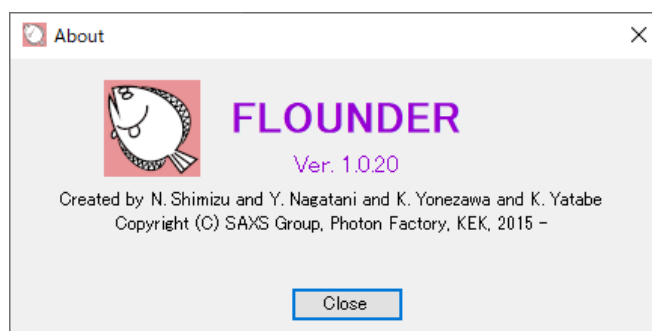


- vi. マップを画像データで保存する場合は、左下のをクリックして保存して下さい。

5. Reference

以下の論文はSAnglerのReferenceですが、FLOUNDERの内部プログラムはSAnglerと基本同じものです。WAXSデータの処理が分りやすい様に、WAXSに特化してSAnglerの機能を一部制限しながら抽出したプログラムとなっています。

- ① Shimizu, N., Yatabe, K., Nagatani, Y., Saijyo, S., Kosuge, T. and Igarashi, N.
Software Development for Analysis of Small-angle X-ray Scattering Data.
AIP Conf. Proc., 1741, 050017 (2016).



- ② PointPickViewer は以下のシステムを使用しています。

- Python 3.9 (<https://www.python.org/>)

Copyright (C) 2001-2020 Python Software Foundation; All Rights Reserved

- Python.NET (<https://github.com/pythonnet/pythonnet>)

Copyright (C) 2006-2021 the contributors of the Python.NET project

- ③ Correlation map を DATCMP で作成して使用する場合は、必ず ATSAS を Reference して下さい。

Manalastas-Cantos, K., Konarev, P.V., Hajizadeh, N.R., Kikhney, A.G., Petoukhov, M.V., Molodenskiy, D.S., Panjkovich, A., Mertens, H.D.T., Gruzinov, A., Borges, C., Jeffries, C.M., Svergun, D.I., Franke, D. (2021) ATSAS 3.0: expanded functionality and new tools for small-angle scattering data analysis. J. Appl. Cryst. 54, 343-355.

6. 補足

- ① 各段階での処理結果は、Igor、Excel 等を利用して FLOUNDER 外で処理した結果と突き合わせ、仕様通りの計算が行なわれているか確認をしています。特に、APS の Jan Ilavsky 博士が開発したIgor proのマクロNikaを参考にし、それぞれの出力結果と整合性が取れているように確認しています。

「"Nika" package of 2D -> 1D SAS data reduction macros for Igor Pro」
<http://usaxs.xray.aps.anl.gov/staff/ilavsky/nika.html>
html