

連載 (解説)

Common Data Processing System Version 10 の使用法 — (1) データ構造の変換 —

吉原 一紘

オミクロンナノテクノロジージャパン(株)

144-0052 東京都大田区蒲田 5-30-15

k.yoshihara@omicron.jp

(2012年4月26日受理)

Common Data Processing System (COMPRO)はスペクトルデータ処理用のソフトウェアとして、1989年から作成が開始された。COMPROを用いることにより、データ構造が異なるスペクトルデータをISO規格のデータ構造に変換することができ、多くの研究者が提案した多様なデータ処理法を利用することができる。また、ISO規格に基づくエネルギー軸や強度軸の校正が可能である。さらに、COMPROはスペクトルデータベースや表面分析に必要な物理定数のデータベースを備えている。

COMPROはバージョンアップを重ね、現在はWindows XP, Windows VISTA, Windows 7上で動くVersion 10 (COMPRO10)が公開されている。これから数回にわたり、COMPRO10の使用法を紹介する。

The Usage of Common Data Processing System Version 10 — (1) Conversion of Data Format —

K. Yoshihara

Omicron Nanotechnology Japan Inc.

5-30-15, Kamata, Ota-ku, Tokyo 144-0052, Japan

k.yoshihara@omicron.jp

(Received: April 26, 2012)

We have been constructing the spectral data processing system named Common Data Processing System (COMPRO) since 1989. COMPRO is designed to be a program to convert an original spectral data file structure to ISO formats, to assess the data processing procedures proposed by scientists, to calibrate energy and intensity scales according to ISO standards, to check a spectrum, and to build both spectra and correction factor databases.

COMPRO has been upgraded many times, and the latest one is Version 10 (COMPRO10), which runs on Windows XP, Windows VISTA and Windows 7. In this series of lectures, the usage of COMPRO10 will be explained. COMPRO11 will be published sometime soon, so this explanation will be applicable to COMPRO11.

1. COMPRO 事始め

表面分析研究会が設立されるに至った経緯は“一通の開催通知, JSA, 3 (1997) 138.”に述べさせていただき、その中でCOMPROについても簡単に触れているが、ここではCOMPRO開発の背景に焦点を当てて記述する。

1982年, VAMAS プロジェクト(Versailles Project

on Advanced Materials and Standards)が立ち上がり、先端材料の評価法に関する国際共同研究を開始することになった。評価法の中には表面化学分析が含まれていた。我が国では1986年に科学技術庁(当時)がサポートする体制が生まれ、表面化学分析に関しては、オージェ電子分光法の定量精度の向上に的を絞った共同研究を開始することになった。

Au-Cu 合金を共通試料として、各機関で合金濃度を測定し、測定値のバラツキや相対感度係数の信頼性を検証したが、その当時はチャート用紙上に出力されたスペクトルデータを「物差し」で測定し、ピーク高さを求めた。この時は、コンピューターで共通でデータ処理するという事は考えもしなかった。1989年に、完全固溶し、偏析が生じない Co-Ni 合金を濃度測定用の標準試料とすることを計画し、Co-Ni 合金を共通試料とした共同試験を行うことになった。ここで問題となったのが、Co-Ni 合金のオージェスペクトルは Co と Ni のスペクトルが重なり合い、「物差し」ではピーク高さを分離して測定できないということであった。そこで、データをコンピューター上で共通で処理することが必要となった。当時は、機種に付属したそれぞれのコンピューターにより、独自のデータ構造のデータを取得し、解析するようになっており、装置付属のコンピューターで全てを行うことが前提となっていた。しかし、共通試験を行うとなると、機種付属のコンピューターで取得されたデータを汎用のコンピューターに転送し、共通のデータ構造にする必要がある。そこで、最初に取り組んだことが共通データ構造を決定することであった。

1. 1 共通データ構造の決定

表面分析に関する共通データ構造に関する提案は 1988 年に SIA 誌 (SIA, 13(1988) 63.) に発表されていた。このデータ構造に対して、当時の装置メーカー各社は「共通データ構造とする」ことに同意した。(個人的な感想：当時の装置メーカーは、共通データ構造の重要性を認識しておらず「何か論文みたいなものだから、別に反対することは無いな」という程度でサインしていたような気がする。) 共通データ構造が決まれば、各装置メーカーのソフトウェアとは独立に、サードパーティの提供するソフトウェアでデータ処理を行うことが可能となり、また、研究者や技術者が提案したアルゴリズムを検証することができ、データ処理の可能性が大きく広がることになるし、データ処理の信頼性も評価可能となる。Co-Ni 合金の共同試験のためには共通データ構造を用いることは必須の事項であった。

このデータ構造は、今では信じられないような当時のコンピューターの能力 (例えば 1 行は 256 文字以内というような) を前提としていた。我々は、できるだけメモリーを節約するために、このデータ構造の中からあまり必要としない情報を削除した

<encoded version>を作り、それを<VAMAS format>と命名して共通構造とした。しかし、その頃から、このデータ構造では将来的には対応できなくなるという意見があり、理想的なデータ構造はどうあるべきかという議論を熱心に行った。しかし、残念ながら、議論の結果は論文にはならず、そのままとなってしまった。一方、SIA に発表されたデータ構造は、論文という体裁をとっており、かつ多くの装置メーカーに (形式的にせよ) 認められていた。したがって、この構造が ISO14976 という国際規格となるのは当然の帰結であろう。COMPRO でも ISO14976 規格に適合した構造をもつデータを処理の対象としている。また、今では装置メーカーもそれぞれのデータを ISO14976 規格で出力するようになっている。

現在のコンピューターの性能は当時とは大きく異なっており、またシミュレーションやデータ処理法も大きく進歩した。分析技術の発展は装置の機能向上と軌を一にしてきたが、装置の機能向上は購入価格の壁にぶつかりつつあり、今後の分析技術の進歩はシミュレーションやデータ処理アルゴリズムの向上に依存せざるを得なくなると思われる。そのときには装置メーカーのソフトウェアに頼るのではなく、研究者や技術者が開発したソフトウェアを利用することになるであろう。そのためにも、今後を見据えた共通データ構造が必要となってくる。

1. 2 データの転送

今ではコンピューター間のデータの転送は USB か Internet 通信で行えるが、1989 年当時は装置付属のコンピューターから RS232C を利用してデータを取り出さなくてはならなかった。データを取り出すにも RS232C ケーブルを結ぶだけではなく、使いにくい転送ソフトウェア (例えば "Kermit") を使わなければならなかった。なかなか転送がうまくいかず、転送法に関する勉強会を開いたり、研究会で講演 (JSA, 3(1997) 134.) してもらったりした。そのうちに装置メーカーの協力もあり、転送はできるようになったが、出力されるデータはほとんどが binary code で記録されており、あらかじめデータの記述法が分からないと、転送しても解読不能であった。したがって、転送されたデータを利用可能とするためには、binary code を読み取り可能な text code に変換し、それをさらに<VAMAS format>に再変換するソフトウェアを作る必要がある。そこで Common Data Processing System を開発することになった。幸いに

共同試験に参加した委員や装置メーカー各社の協力が得られ、1990年にVersion 2が完成し、共同試験に参加した委員に配布して、Co-Ni合金の解析を行った。これがCOMPROの出発点である。その後、コンピューターのOSもMS-DOSからWindowsに移行し、それに伴いCOMPROはversion upを重ねて、現在はVersion 10を公開している。開発当初のCOMPROの機能としてはデータ構造の変換が主体で、データ処理としては、smoothing, differentiation, Shirley background subtraction 程度であったが、Tougaard background subtraction, Thickogram, MRI modelなど新しいデータ処理法が提案されるごとに、それらを組み込むことを行ってきた。そして、1995年に表面分析研究会が創立されるに当たり、共同試験に参加した委員を対象として配布していたCOMPROを一般に公開することになった。

データを共通化することにより、さまざまな機関で取得されたスペクトルデータをデータベース化することが可能となった。表面分析研究会ではデータベース委員会を立ち上げて、スペクトルデータの収集・整理を行い、データベース化してWebに公開し、利用可能となっている。

1. 3 COMPROの今後

今後、分析性能を向上させるためには、シミュレーションやデータ解析がこれまで以上に重要となってくる。そのためには、研究者や技術者が、各自のアイデアや提案に基づいた新しいソフトウェアを作成し、検証していくことが必要である。研究者や技術者が開発したソフトウェアを検証するために、COMPROはその共通の架台(common bed)を提供する役割を果たすことを計画している。現在公開されているのはVersion 10であるが、近々公開予定のVersion 11では、Version 10の使い勝手はほとんど変更せずに、内部の構造だけを第3者が作成したソフトウェアが容易に組み込めるように改造している。多くの方がCOMPROをcommon bedとして使い、自分のアイデアを検証していただくことを期待している。

なお、今後は、分析結果とシミュレーション結果を比較することが頻繁に行われるようになると予測される。そのためにも、シミュレーションに必要な項目も公開できるようなデータ構造であることが必要となる。ISO14976は実験条件とデータを転送するというを目的に提案されたデータ構造であるので、上記のような目的のためには不十分で

あり、新たなデータ構造を提案する時期に来ている。

2. COMPRO10のインストール

COMPRO10を使用するには、コンピューターの画面の解像度が1024 x 768以上が必要で、推奨値は1280 x 768以上である。

COMPRO10は表面分析研究会のホームページ(<http://www.sasj.jp/COMPRO>)からダウンロードできる。<setupCompro10.exe>をクリックすると、実行するか、ダウンロードするかを聞いてくるので、そのまま実行しても、適当なディレクトリーに保存してから実行しても良い。<setupCompro10.exe>を実行すると、保存先がdefaultでは<c:¥SASJ¥compro10>となっているが、変更せずに指示通りに実行する。実行後、Windowsの<Explorer>で<c:¥SASJ¥compro10>を検索し、ディレクトリー内に<compro10.exe>、<comproLibrary.dll>のファイルと、18個のアイコンファイルがあることを確認する。(COMPRO11の場合は、<c:¥SASJ¥compro11>のディレクトリーが作成され、その中に<compro11.exe>、<comproAppendix.exe>、<comproCalibration.exe>、<comproLibrary.dll>、<comproMain.exe>、<comproSimulation.exe>のファイルと<image>、<WebHelp>のディレクトリーがある。) COMPRO10を起動するには、compro10.exe (COMPRO11はcompro11.exe)をダブルクリックする。

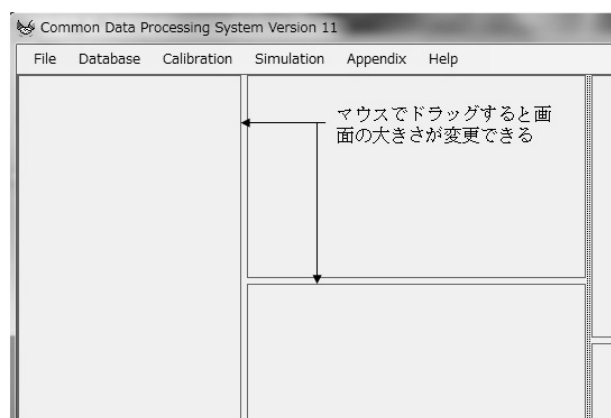
COMPROはMicrosoft dotNetFrameWork 3.5の枠組みの中で動いている。dotNetFrameWork 3.5はWindows XP以降のOSには標準として搭載されているが、もし、搭載されていない場合には、COMPROの起動時に「dotNetFrameWork 3.5が無い」というメッセージがでるので、Microsoftのホームページからダウンロード(無料)するか、COMPROのホームページから<dotnetfx35.exe>をダウンロードする。

COMPROには練習用のサンプルデータがあるので、<sampladata.exe>をダウンロードして実行すれば<c:¥SASJ¥Data>にサンプルデータが作成される。

COMPROにはSASJの会員により収集されたスペクトルデータベースが付属しているので、<database.exe>をダウンロードして実行することを強く薦める。データベースは<c:¥SASJ¥Database>に作成される。後藤敬典先生が取得されたAESの標準スペクトルデータベースも、同様に<gotodata.exe>をダウンロードして実行すると同じ

ディレクトリーに作成される。COMPRO を起動すると<File>, <Database>, <Calibration>, <Simulation>, <Appendix>, <Help>のメニューが現れる。なお、データベースをダウンロードしない場合には、<database.exe>と<gotodata.exe>をダウンロードすることを薦める警告文が現れ、<Database>メニューが「使用不可」になる。

COMPRO の画面は splitter で分割されており、それぞれの画面の大きさはマウスで splitter を移動させることにより変更できる。



3. データ構造の ISO 規格への変換

異なった装置から得られたスペクトルデータを共通の環境でデータ処理するためには、データ構造を共通化しておくことが必要である。そのために、ISO では ISO14975 と ISO14976 というデータ構造に関する規格を制定した。COMPRO では ISO 規格で記述されたデータをデータ処理に用いている。この ISO 規格では、全ての情報はテキストデータとして記録され、記述順序も規定されている。図 1 に ISO 規格によるデータ構造を示す。

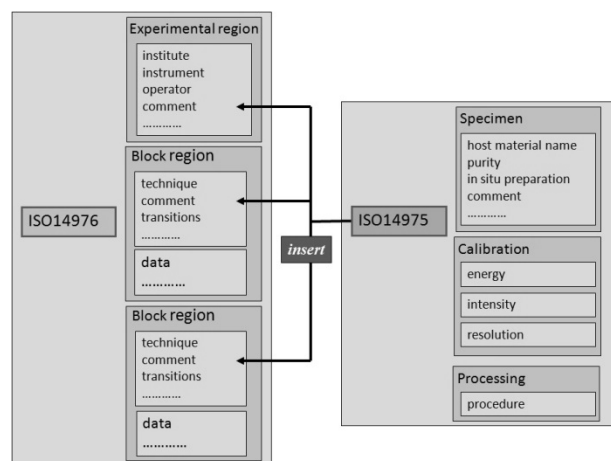
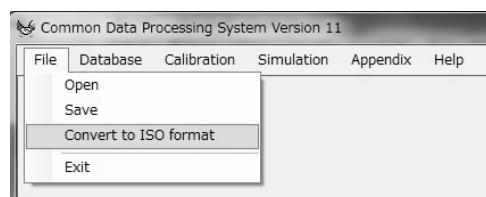


Fig. 1 Structure of ISO14976 and ISO14975

ISO14976 は experimental 部分と block 部分に分かれており、experimental 部分には機関名、装置名などを記録し、block 部分には測定条件、測定データなどを記録するようになっている。block 部分には、測定条件（たとえば、測定範囲、検出角度、スパッタリング時間など）を変えるたびに、測定データを付加していく。ISO14976 では、experimental 部分、block 部分それぞれに実験のタイトルや試料の状態などをコメントとして付け加えることができる構造となっている。ISO14975 は実験に用いた試料の情報、装置の校正結果、データ処理に関する記述方法を決めている。ISO14975 はコメントとして ISO14976 の中にはめ込むことができるようになっている。

既に多くの市販の装置は、取得したデータを ISO 規格に変更して出力させるソフトウェアが添付されているが、必ずしも全ての装置が対応しているとは言えないので、COMPRO でも任意の構造のテキストデータを ISO 規格に変換できる。変換の手順は以下ようになる。

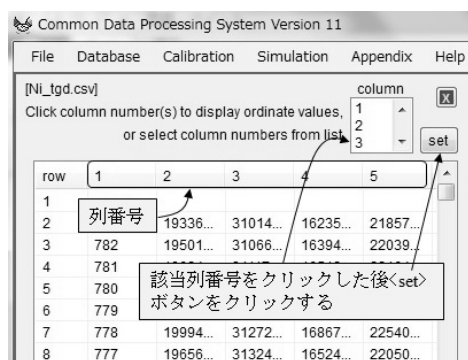
(1) メニュー画面から<File> - <Convert to ISO format>を選択する。



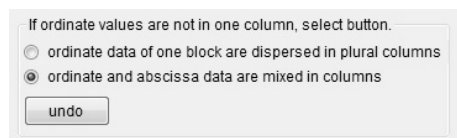
(2) ファイルの選択画面が現れる。

(3) 変換したいファイルを選択すると、データ表示画面が現れる。データ構造は様々である。データが 1 列に並べられているもの、コンマやタブキーにより 2 列に分かれて記述され、1 列目はエネルギー値、2 列目は強度となっているもの、あるいは強度列がコンマやタブキーにより複数列に分割されているもの、など記録形式は様々である。COMPRO はデータ構造を自動的に解析して、list box にデータを表示する。2 列までのデータ構造を持つものは、通常は第 2 列が強度値であるので、第 2 列の値をグラフ表示する。もしこの表示が誤りであったならば、グラフの右上にある緑の<X>ボタンをクリックすると、グラフが消去されるので、左の list box の中で該当する列番号をクリックすると、該当した列のデータに対応したグラフが表示される。2 列以上に分割されたデータ構造を持つ場合は、自動的ににはグ

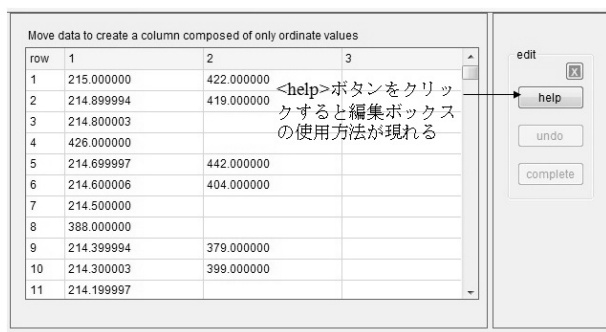
ラフを表示しないので、左の list box の中で該当する列番号をクリックすると、対応した列のデータがグラフとして表示される。なお、同時に複数の列データを表示させたいときには、list box から該当列番号を複数選択して<set>ボタンをクリックする。



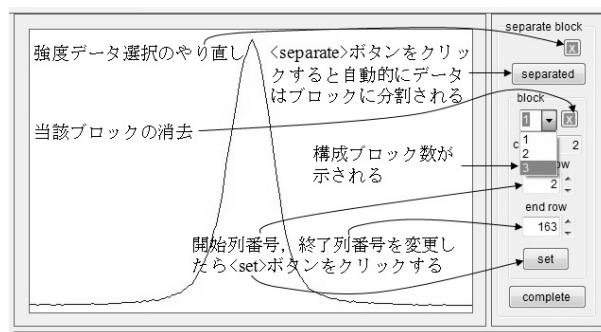
また、データ構造によっては、データが複数列に分散しているなど、複雑な構造のものがある。その場合には、表の下に選択ボタンがあるので、それを選択するとデータの編集画面が現れる。



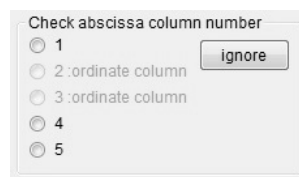
データの編集画面の横の<help>ボタンをクリックすると説明文が現れる。



(4) 表示されているデータが強度データを全て含んでいることが確認できたならば<separate block>と命名された group box 内の<separate>ボタンをクリックする (Version 10 ではボタンの名前は<auto>になっている)。ブロックが複数個ある場合には自動的にデータがブロックごとに分割される。

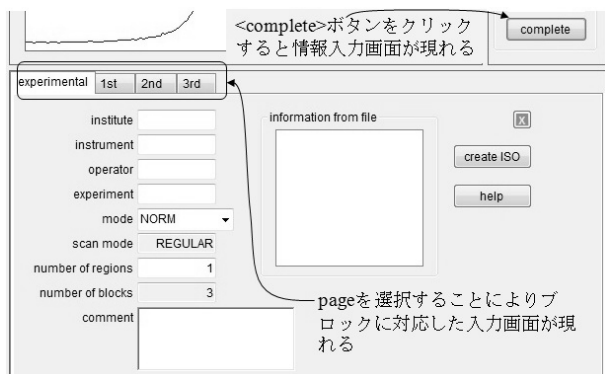


<separate>ボタンは<separated>ボタンと変わる。combo box をクリックすると、分割したブロック数が現れる。図の場合は3個のブロックに分割されたことを示している。各ブロックの開始列番号と終了列番号が示されているので、表示されたスペクトルが不適切であった場合には開始列番号および終了列番号を変更した後、<set>ボタンをクリックして正しいスペクトルを表示させるようにする。またブロックが不適切のときは、ブロック番号を示す combo box 横の緑の<X>ボタンをクリックすると当該ブロックを消去できる。なお、グラフ上でマウスをクリックすると、クリックした箇所の列番号が表示されるので、それを利用すると、ブロックの範囲の判定が容易になる。全てのブロックについて確認できたならば<complete>ボタンをクリックする。ただし、データが3列以上に分割されるような場合で、かつ全ての列データが強度データとして定義されなかったときには、どれか一つの列がエネルギー軸を表している可能性がある。そのような場合には、下の画面が現れるのでエネルギー軸がある場合には対応列番号をチェックする。無い場合には<ignore>ボタンをクリックする。



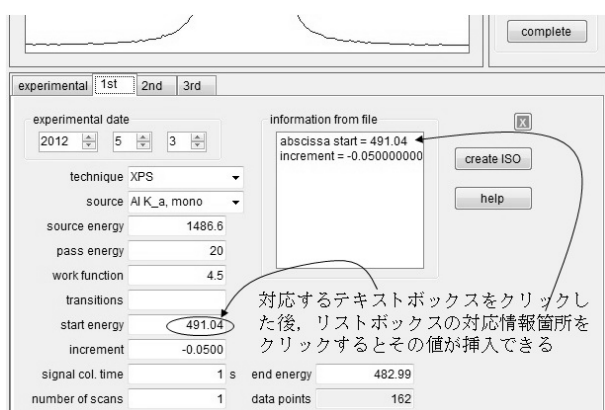
(5) データを定義する情報の入力画面が現れる。画面は<experimental>と<1st>, <2nd>, <3rd>, ...とに分かれて、それぞれのブロックに対応した情報を入力する。COMPRO10 では、スペクトルの形として、NORM ; 通常のスぺクトル, SDP ; スパッタデプスプロファイル[スペクトルのスパッタリング時間による変化], SDPSV ; スパッタデプスプロファイル[ピーク高さのスパッタリング時間による変化]

を対象とした変換だけが可能であることを注意する。なお、エネルギー軸の走査モードは[REGULAR] (等間隔) のみを変換の対象としている。



(6) ブロック番号を選択すると、ブロックに対応した情報の入力画面が現れる。

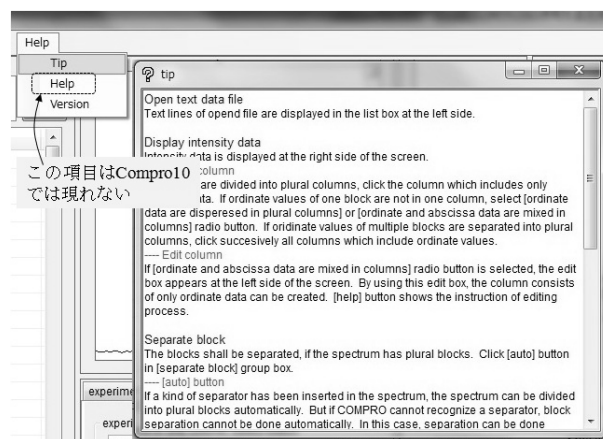
開始エネルギー、終了エネルギーなどは自動的に判断されて表示されるが、不適切な値が表示されている場合には text box の表示を変更することができる。<information from file>と命名された list box の中から対応するデータをクリックすると、自動的にデータが更新される。全てのブロックの入力を確認後、<create ISO>ボタンをクリックすると、保存ファイル名を尋ねる画面が現れるので、保存する。これで変換が完了する。ただし、ここではスペクトル表示に必要な最低限の項目だけを入力しているため、他の情報の入力には[4.5]節を参照のこと。必要な項目の入力漏れがあった場合には、入力を促す警告文が現れるので、警告に従って入力を完了する必要がある。



(7) ファイルが ISO 構造に正しく変換されれば、COMPRO で表示することができる。メニューバーから<File> - <Open>を選択すると、ファイル名を選

択する画面が現れるので、保存したファイル名を選択すると、スペクトルが表示される。

(8) 操作方法や手順が不明な場合にはメニューバーから<Help>-<Tip>を選択すると、説明文が表示される。なお、Version11 には<Help>-<Help>を選択することにより原理等の解説を表示する機能を付加する予定である。



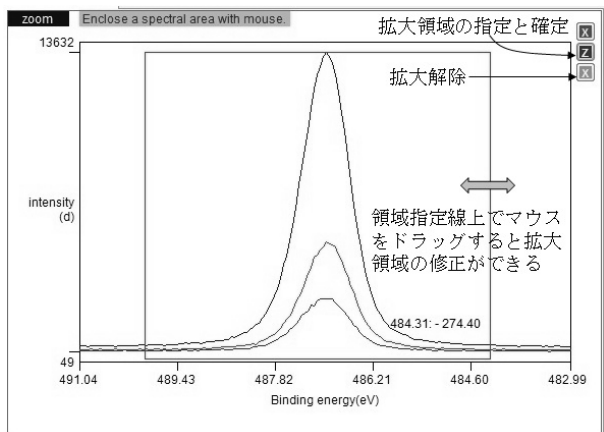
4. スペクトルデータの表示

ISO 構造で記述されたデータは、COMPRO の中ではファイル名に<npl>の拡張子がつけられている。<File> - <Open>を選択すると、ファイル選択画面には<npl>の拡張子を有するファイルが表示され、表示させたいファイルを選択するとスペクトルが表示される。ブロック数が3個ある場合には、それに対応したスペクトルが3本描かれる。グラフの右上には<X>ボタンと<Z>ボタンが表示されている。<X>ボタンをクリックすると表示されているスペクトルを消去できる。

4. 1 スペクトルの拡大

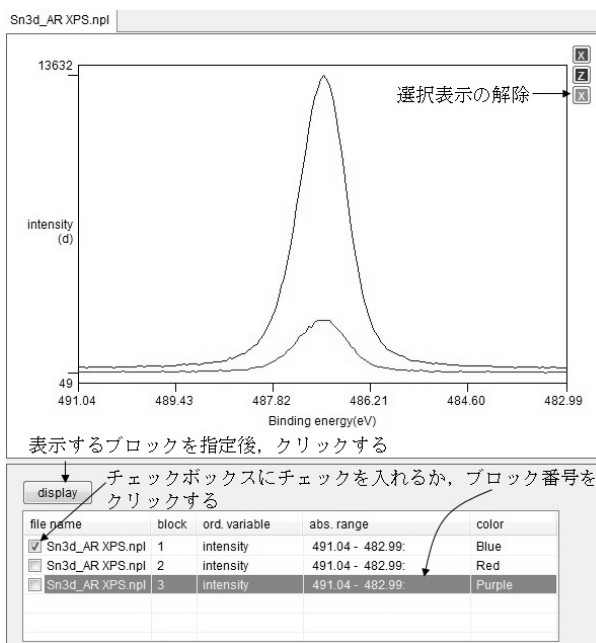
<Z>ボタンをクリックし、マウスで任意の領域を囲み、再度<Z>ボタンをクリックするとマウスで囲んだ領域が拡大される。

領域指定線上でマウスをドラッグすると拡大領域の修正ができる。拡大を解除するには<Z>ボタンの下の緑色の<X>ボタンをクリックする。



4. 2 ブロックの選択表示

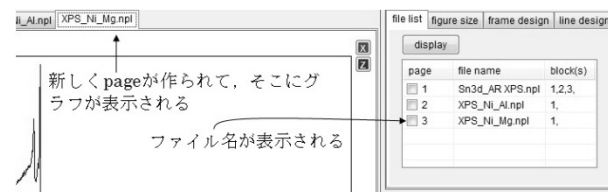
グラフの下部の領域には表示されている 3 本のスペクトルの情報が記述されている。ファイルを選択するとファイルに含まれている全てのブロックのスペクトルが表示されるが、checkbox に check を入れるか、行をクリックすることによりブロックを指定して、<display>ボタンをクリックすると、選択したブロックだけを表示することができる。選択表示を解除する場合には<Z>ボタンの下の緑色の<X>ボタンをクリックする。



4. 3 別なファイルの選択

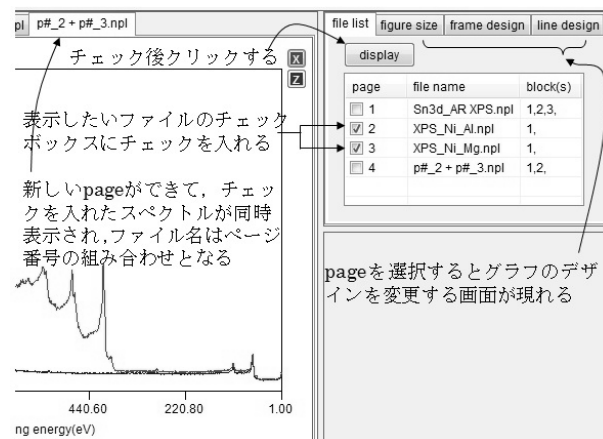
さらに別なファイルを選択して表示させると、新しく page が作られて、そこにグラフが表示される。グラフの右には COMPRO で開いたファイル名が

list box の page の列に記録される。



4. 4 異なったファイルの同時表示

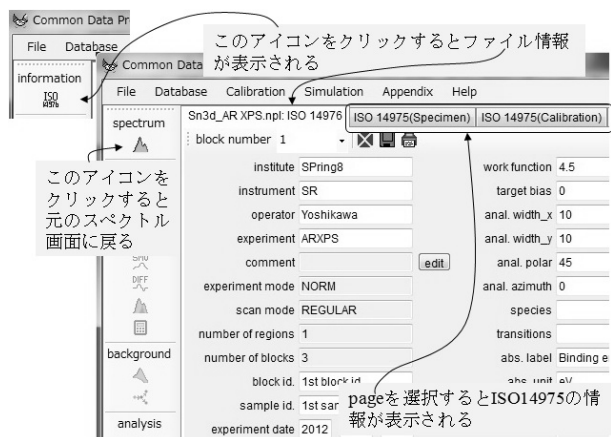
COMPRO で開いたファイル名の checkbox にチェックを入れて、<display>ボタンをクリックすると、選択したファイルを同時表示させることができる。同時表示させたスペクトルを消去する場合には赤色の<X>ボタンをクリックする。なお、グラフの右にある表示欄の page を選択すると、グラフのデザインの変更ができる画面が現れる。



4. 5 スペクトル情報の確認

スペクトル表示画面の左側のボタン列の中の一 番上のボタン (<ISO14976>) をクリックすると、スペクトルに記述された ISO14976 の情報が表示される。

不適切な記入項目や未記入項目があればここで修正できる。また表示領域上部の page を選択することにより、ISO14975 に関する情報の表示と修正も可能である。修正後は左側ボタンの<spectrum>をクリックすると元の表示画面に戻る。修正がなされた場合には、修正内容を保存するか否かが問われる。



最後に、COMPRO の利用者からのよくある質問に対する回答を記述しておきます。

Q : COMPRO の使用者に何か制限やルールはありますか？

A : 制限はありません。どなたでも SASJ の home page から down load して使用できます。

Q:COMPROを Windows 上で使用するにあたって、パソコンの性能 (画面サイズ、CPU、メモリなど) に推奨の仕様はありますか？

A : コンピューターの画面の解像度が 1024 x 768 以上が必要で、推奨値は 1280 x 768 以上です。CPU や記憶容量に関する制限はありません。

Q : 使っているパソコンの画面が小さいせいか、ボタンが表示されないのですが、どうすれば良いでしょうか？

A : COMPRO の画面は splitter により分割されています。splitter をマウスでドラッグすると画面の大きさを変更することができます。ただし、縦方向の解像度が 768 以下ですと一部の機能が使用できなくなります。

Q : 自分自身の実験データを COMPRO で解析し、その結果を使って報告書を書いたり社外発表をしたりする際に、何か制限やルールはありますか？

A : 特にルールは定めていません。

Q : COMPRO に付属するスペクトルデータベースを使って、報告書を書いたり社外発表をしたりする際に、何か制限やルールはありますか？

A : データベースのデータを用いて発表した場合には、当該データを「COMPRO database, ファイル番号 by 取得者名」として引用を明記してください。

Q : COMPRO について質問や要望がある場合に、どのような方法で連絡をさせて頂ければ良いですか？

A : yoshihara.kazuhiro@apost.plala.or.jp にメールで連絡していただければ対応します。