

AGNES manual

For Analysis

on eMac

2004.11.22

AGNES 測定で得られたデータの解析

- ・ 大まかな流れとプログラム
- ・ 注意点と基本的な動作
- ・ AGNES のデータ読み込み
- ・ AGNES のデータ解析

大まかな流れとプログラム

★おおまかな流れ

データの読み込み

- AGNESREAD により、上段、中段、下段の channel と角度と強度の関係のデータを得る。
- KaleidaGraph を用いて、だいたいのスペクトルをチェックする。

データの解析

- AGDAS により、得られたスペクトルから $S(Q, \omega)$, $G(\omega)$ を計算する。

以下は、準弾性の解析

- バナジウムの対称化した $S(Q, \omega)$ データから分解能関数を求める。
- AGFIT により、分解能関数の寄与を考慮したフィッティングを行う。

★使用するプログラム名

AGNESREAD	(生データファイルからテキストファイルへの変換)
AGDAS	($S(Q, \omega)$ を導出)
AGSEL	(AGFIT への準備として書き出す)
AGFIT	(準弾性の解析フィッティングを行う)

注意点と基本的な動作

準備するもの

4つのプログラムはすべて

- ・パラメータを書き込んだパラメータを書き込んだ「コントロールファイル」と呼ばれるテキストファイル
- ・それぞれのプログラムが読めるファイル名とフォーマットにしたデータファイル (テキスト)

を、それぞれに対して準備しなくてはならない。

扱えるテキストファイルについて

また、プログラム本体は MacOS X の Unix としての機能を用いるため、入力および出力されるテキストは、「行末コードが LF (Unix タイプ)」である必要がある。通常は Windows タイプ (CR+LF) や、MacOS タイプ (CR) が用いられることが多いので、「行末コードの書き換え」が必須となる。

また、ファイルの終わりをプログラムが検知するために、何行か「空行」が必要であるため、必要なら手動で追加すること。

以上の点で不足があると、プログラムがエラーを吐いて動かないので注意。

MacOS X では、「mi」というフリーのテキストエディタが、ユーザインターフェイス的にも比較的容易に行末コードを書き換えることが出来るので、それを用いるとよいだろう。

Mi (<http://www.mimikaki.net/>)

ちなみに「CNTL ひな形」フォルダに準備された各種コントロールファイルは上記の注意点を満たしているので、実際の解析にはこれらのファイルをコピーして使うべきである。

プログラムの実行

コントロールファイルとデータファイルがそれぞれ準備できれば、

「AGNES_PROGRAM」フォルダの中のプログラムをダブルクリックすることでプログラムを走らせることができる。

どのプログラムも、起動後は、「コントロールファイル」と「データファイル」の入っているフォルダを指定するためにダイアログを開くので、適当なフォルダを選択 (Choose) しておく。

すると、プログラムはコントロールファイルを読み込み、作業を行い、結果を同じフォルダに保存する。

最後に、AGNESREAD 以外のプログラムは、実行ログファイルを書き出すためのダイアログが再度開くので、適当なフォルダを選択 (Choose) する。必要なければキャンセルでもかまわない。

AGNES のデータ読み込み

○ AGNESREAD

生データから扱いやすい変換されたデータを得る。

- ★ 2つのファイルと同じフォルダにおく。
以下の2つを、各自の同じフォルダに持ってくる。

AGNESTOF. CNTL

ひな形が「CNTL ひな形」フォルダにあるのでそれを必ずコピーして利用すること。

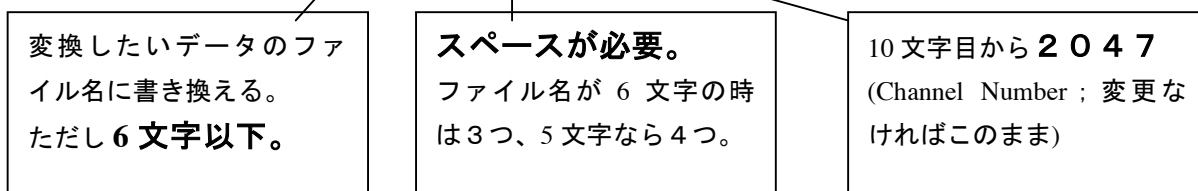
Raw データファイル

VAX から転送した Raw データファイル、複製したものの推奨

- ★ データファイルのファイル名を6文字以下にする。
例) samp01

- ★ AGNESTOF. CNTL を書き換える。
コピーした AGNESOF. CNTL の書き換えは、一列目のみ。

例) s a m p 0 1 □ □ □ 2 0 4 7



- ★ 「AGNES_PROGRAM」フォルダにある、agnesread をダブルクリック
起動するとフォルダを選ぶダイアログが現れるので、先ほど準備した AGNESTOF. CNTL と raw データファイルが入っているフォルダを選択。
計算結果が samp01L. TOF、samp01M. TOF、samp01U. TOF の3つのファイルとして出力される。
(L: 下段カウンター M: 赤道面のカウンター U: 上段のカウンター)

これらの TOF ファイルは、テキストファイルであるため、容易に他のアプリケーションで読み込むことが出来る。

○ Kaleida Graph を用いたデータチェック (必要に応じて)

変換した *****.T0F のファイルを Kaleida graph で読み込むときには以下の設定にする。

1. 区切り 空白
2. 数字 >=2
3. スキップするライン 0
4. タイトル読み込みには check を入れる。

これで OK をクリックする。

読み込んだ全ディテクターのデータを、数式計算によって複数のグループにまとめ、得られたスペクトルをチェックしておく。

なお、エネルギー遷移の計算は次式で行う。

$$C0=5.2276e-6*(1.8/(1.9204e-3+(C1-438)*5e-6))^2-4.5926$$

これを Kaleida Graph 上のメニュー、「ウィンドウ → 数式入力」にて入力して実行する。

～～ これより以下は、必要に応じて行う。～～

例えば、全角度の単位時間あたりの強度、全角度を 8 つ (10~19, 20~29, 30~39, 40~49, 50~64, 65~79, 80~99, 100~120°) に分けたときの各々の単位時間 1 本あたりの強度を計算してみる。

*****M.T0F のファイルの場合

ウィンドウ → 数式入力 → F1 の左のメモのようなアイコンをクリック → 数式の編集に以下の数式を入力する。 →

$$C0=5.2276e-6*(1.8/(1.9204e-3+(C1-411)*5e-6))^2-4.5926;$$

$$c122=(c2+c3+c4+c5+c6+c7+c8+c9+c10+c11)/10;$$

$$c123=(c12+c13+c14+c15+c16+c17+c18+c19+c20+c21)/10;$$

$$c124=(c22+c23+c24+c25+c26+c27+c28+c29+c30+c31)/10;$$

$$c125=(c32+c33+c34+c35+c36+c37+c38+c39+c40+c41)/10;$$

$$c126=(c42+c43+c44+c45+c46+c47+c48+c49+c50+c51+c52+c53+c54+c55+c56)/15;$$

$$c127=(c57+c58+c59+c60+c61+c62+c63+c64+c65+c66+c67+c68+c69+c70+c71)/15;$$

$$c128=(c72+c73+c74+c75+c76+c77+c78+c79+c80+c81+c82+c83+c84+c85+c86+c87+c88+c89+c90+c91)/20;$$

$$c129=(c92+c93+c94+c95+c96+c97+c98+c99+c100+c101+c102+c103+c104+c105+c106+c107+c108+c109+c110+c111)/20;$$

$$c130=(c122+c123+c124+c125+c126+c127+c128+c129)/8/ \text{ (測定時間[h])}$$

→ ファイル → 閉じる → 実行

(注) AGDAS にかけるためのデータであれば、ここまでの手順でよい。

全チャンネルで 2 度の弾性ピークが観測されるので、その 2 つのデータを足しあわせ

るため、c130 の後半部分をコピーし、c131 にペーストする。(ピーク位置が重なるように！！)

ウィンドウ → 数式入力 → F1 の左のメモのようなアイコンをクリック → 数式の編集に以下の数式を入力する。 →

$$c132=c130+c131;$$

$$c133=(c2+c3+c4+c5+c6+c7+c8+c9+c10+c11)/10;$$

$$c136=(c12+c13+c14+c15+c16+c17+c18+c19+c20+c21)/10;$$

$$c139=(c22+c23+c24+c25+c26+c27+c28+c29+c30+c31)/10;$$

$$c142=(c32+c33+c34+c35+c36+c37+c38+c39+c40+c41)/10;$$

$$c145=(c42+c43+c44+c45+c46+c47+c48+c49+c50+c51+c52+c53+c54+c55+c56)/15;$$

$$c148=(c57+c58+c59+c60+c61+c62+c63+c64+c65+c66+c67+c68+c69+c70+c71)/15;$$

$$c151=(c72+c73+c74+c75+c76+c77+c78+c79+c80+c81+c82+c83+c84+c85+c86+c87+c88+c89+c90+c91)/20;$$

$$c154=(c92+c93+c94+c95+c96+c97+c98+c99+c100+c101+c102+c103+c104+c105+c106+c107+c108+c109+c110+c111)/20;$$

→ ファイル → 閉じる → 実行

c133, c136, c139, c142, c145, c148, c151, c154 について後半部分をコピーし、それぞれ c134, c137, c140, c143, c146, c149, c152, c155 にペーストする。(c130 をコピーしたときと同じチャンネルをコピー、ペーストすること！！)

ウィンドウ → 数式入力 → F1 の左のメモのようなアイコンをクリック → 数式の編集に以下の数式を入力する。 →

$$c135=(c133+c134)/(測定時間[h]);$$

$$c138=(c136+c137)/(測定時間[h]);$$

$$c141=(c139+c140)/(測定時間[h]);$$

$$c144=(c142+c143)/(測定時間[h]);$$

$$c147=(c145+c146)/(測定時間[h]);$$

$$c150=(c148+c149)/(測定時間[h]);$$

$$c153=(c151+c152)/(測定時間[h]);$$

$$c156=(c154+c155)/(測定時間[h])$$

→ ファイル → 閉じる → 実行

列にタイトルを入れる。(E/meV, sum/h, 10~24/h, 25~40/h etc.)

以上の計算で得られた表を折れ線グラフで描くと、補正前の準弾性スペクトルが得られる。*****U. TOF、*****L. TOF についても同様の計算を行うとよい。その際の計算式は省く。

AGNES のデータ解析

○ AGDAS

得られたスペクトルから $S(Q, \omega)$, $G(\omega)$ を計算する

★用意するファイル

AGDAS (アプリケーションファイル)
 AGNES.CNTL (コントロールファイル)
 ***** (試料ファイル、8文字以下)
 ===== (バナジウムファイル、8文字以下)

★試料ファイルとバナジウムファイル

AGNES は中段のディテクターで 120 本あり、それらが 10° から 1° おきに並んでいる。これらについて一本ずつ解析を行うこともできるが、強度的な問題もあり、大抵 10~20 本ずつ足しあわせて、7~11 個ほどの平均の角度におけるシグナルとして考えることが多い。AGNES ではこのまとまりを Station と呼んでいる。試料ファイルも、装置分解能関数 (Resolution Function) を導出するためのバナジウムファイルも、同じ Station のまとめ方で準備する必要がある。

★試料ファイルとバナジウムファイルの中身

1 行目: チャンネルの総数 (2047) ←チャンネル幅が $5 \mu s$ のとき。
 2 行目以降: チャンネル番号とその番号における強度 (station ごとに) チャンネル、ステーションデータそれぞれは「タブ区切り」。

★試料ファイルおよびバナジウムファイルの例

(チャンネル幅 $5 \mu s$ 、ステーション数 7 の場合)

2047

1.0000	14.000	22.000	19.000	18.000	23.000	24.000	24.000	26.000
2.0000	14.000	13.000	26.000	16.000	22.000	16.000	21.000	19.000
3.0000	19.000	17.000	20.000	32.000	16.000	24.000	23.000	22.000
4.0000	27.000	19.000	21.000	21.000	24.000	23.000	19.000	23.000
5.0000	12.000	23.000	23.000	35.000	16.000	17.000	22.000	28.000

(以下略)

★もちろん、これらのファイルは必ず「注意点と基本的な動作」の章で述べたとおり、「行末コードは LF」「ファイルの最後は空行」を満たしている必要がある。

★Kaleida Graph による試料ファイルとバナジウムファイルの作り方。

AGNESREAD の後半で説明された計算でできたファイルの channel No. の列 (c1) と C122~C129 を新しい Kaleida Graph のファイルの c0 から c8 にコピー&ペースト

する。Channel の列のタイトルに 2047 と入力する。

ファイル → 書き出し → タブ区切りテキスト → ファイル名を入力 → 保存

★コントロールファイルの中身

- 1 行目：解析開始 or 継続 (1)、解析ストップ (0)
- 2 行目：試料ファイル名 (8文字に足りない場合は8文字目まで空白を入れる)、バナジウムファイル名 (9文字目から書く)
- 3 行目：試料測定時間[分]、バナジウム測定時間[分]
- 4 行目：station の数、測定温度、binning の数、平均 2 乗変位、ボーズスケールするときの基準温度
- 5 行目：それぞれの station の平均散乱角度 (試料ファイル or バナジウムファイルの station の順に書く)

★コントロールファイルの例

```

1
V02/9  V02/9
888, 888
7, 299. 15, 1, 0. 0, 273. 0
17. 0, 32. 5, 48. 5, 64. 5, 80. 5, 96. 5, 112. 5
1
THF03  V02/9
480, 888
7, 276. 15, 1, 0. 0, 273. 0
17. 0, 32. 5, 48. 5, 64. 5, 80. 5, 96. 5, 112. 5
0

```

★AGDAS の実行

試料ファイル、バナジウムファイル、AGDAS.CNTL ファイルの三つを一つのフォルダにまとめておく。そして、AGDAS プログラムをダブルクリックにて実行する。AGDAS プログラムはデータなどの入ったフォルダを選ぶように聞いてくるので、そのフォルダを選択する。すると計算が始まり、結果が 5 つのファイルに書き出される。最後に計算経過のログファイルをセーブして終わる。

AGDAS の計算の結果、書き出されるファイルはそれぞれ、

*****. BSL : ボーズスケールした S(Q, E)

*****. DPS : 状態密度

*****. SBSL : ボーズスケールした対称化 S(Q, E)

*****. SQW : S(Q, E)

*****. SSQW : 対称化 S(Q, W)

である。

★装置分解能関数 (Resolution Function) の決定

バナジウムの SSQW のデータを Kaleida Graph や適当なアプリケーションで読み込み、station ごとにフィッティングを行う。フィッティング関数はガウス関数である。

$$Y = A \times \exp\left(-\frac{(X - B)^2}{2C^2}\right) + D$$

AGFIT による計算では、ここで得られる標準偏差 C を使用する。
この作業は、各サイクル、各バナジウムごとに一度行っておけばよい。

○AGSEL

*****. SSQW ファイルからフィッティングをする部分のデータを選び出す

★ AGSELは指定したエネルギーの範囲とそれに対応するSSQWを選び出し、ファイルに書き出すプログラムである。

★用意するファイル

AGSEL (アプリケーション)

AGSEL.CNTL (コントロールファイル)

*****. SSQW (入力ファイル)

★コントロールファイルについて

3行目; 入力ファイル名 (20文字以内)、出力ファイル名 (20文字以内)

5行目; エネルギーの列番号、選び出すエネルギーの最小値、最大値

7行目; 同様のデータの選び出しを再び行うか。行う (1)、行わない (0)

コントロールファイルの例

```
=====
**** File names (input, output) ****
```

```
'L6265 .SSQW', 'L6265stn1'
```

```
**** Column No. of energy, Minimum energy, Maximum energy ****
```

```
3, -2.000, 2.000
```

```
**** Stop (0) or continue (1) ****
```

```
0
```

```
=====
**** File names (input, output) ****
```

```
'L6265 .SSQW', 'L6265stn2'
```

```
**** Column No. of energy, Minimum energy, Maximum energy ****
```

```
6, -2.000, 2.000
```

```
**** Stop (0) or continue (1) ****
```

```
1
```

このプログラムにより station ごとのデータファイルが得られる。

○ AGFIT

分解能関数の寄与を考慮し、フィッティングを行う。

★AGFITによりローレンツ関数（最大2個）とデルタ関数を用いてフィッティングする。各関数は分解能関数（ガウス関数）でコンボリューションできる。

★用意するファイル

AGFIT（アプリケーションファイル）

AGFIT.CNTL（コントロールファイル）

*****（データファイル，AGSELECTにより作成したデータファイル）

★コントロールファイルについて

3 行目；主題

5 行目；データファイル名、出力ファイル名、プロット用のファイル名

7 行目；装置関数（ガウス関数）の標準偏差

10 行目から 20 行目；関数のパラメーター

コンマの左側は 0 または 1 を入力

0 はその行のパラメーターを固定、1 は変数にする

コンマの右側にはパラメーターの初期値または固定値を入力

フィッティング関数は次のとおり

$I(E) = P7 + G(E) @ [P6 * Del(E, P1) + P2 * \{Lor1(E, P1, P3) + P4 * Lor2(E, P1, P5)\}]$

G はガウス関数、Del はデルタ関数、Lor1 と Lor2 はローレンツ関数、

@ はコンボリューションを表す

10 行目 = P1 (全ての関数に共通のピークエネルギー)

12 行目 = P2 (第 1 ローレンツ関数の強度)

13 行目 = P3 (第 1 ローレンツ関数の半値半幅)

15 行目 = P4 (第 2 ローレンツ関数強度の第 1 ローレンツ関数強度に対する比)

16 行目 = P5 (第 2 ローレンツ関数の半値半幅)

18 行目 = P6 (デルタ関数の強度)

20 行目 = P7 (バックグラウンド)

例えば、ローレンツ関数 1 つだけを使うときは、P4, P5, P6 を 0 に固定

ローレンツ関数 1 つとデルタ関数を使うときは、P4, P5 を 0 に固定

ローレンツ関数 2 つ使うときは、P6 を 0 に固定(下の例)

分解能関数のコンボリューションを行わないときは 6 行目に非常に小さい値を入れる（デルタ関数は使わない。）

22 行目；プロットファイルの作成エネルギー範囲（範囲内に 800 点）

24 行目；同様のフィッティングを続けて行う (1)、行わない (0)

★コントロールファイルの例

```

=====
**** Subject name ****
'01H20stn1'
**** File names (data, output, plot) ****
'01H20stn1','o01H20stn1','p01H20stn1'
**** Standard deviation of resolution function (Gaussian) ****
0.057373
**** Initial parameters (0:fixed, 1:variable) ****
=== Peak energy ===
1,-0.01
=== Intensity and HWHM of 1st Lorentzian ===
1,0.02
1,0.2
=== Ratio of 2nd-to-1st Lorentzian Intensity and HWHM of 2nd Lorentzian ===
0,0
0,0
=== Intensity of Gaussian ===
0,0
=== Constant background ===
1,0.01
**** Energy region for calculated values ****
-2.0,2.0
**** Stop (0) or continue (1) calculating next data****
0
=====
**** Subject name ****
'01H20stn2'
**** File names (data, output, plot) ****
'01H20stn2','o01H20stn2','p01H20stn2'
**** Standard deviation of resolution function (Gaussian) ****
0.054575
**** Initial parameters (0:fixed, 1:variable) ****
=== Peak energy ===
1,-0.01
=== Intensity and HWHM of 1st Lorentzian ===
1,0.02
1,0.2
=== Ratio of 2nd-to-1st Lorentzian Intensity and HWHM of 2nd Lorentzian ===
0,0
0,0

```

```
=== Intensity of Gaussian ===  
0,0  
=== Constant background ===  
1,0.01  
**** Energy region for calculated values ****  
-2.0,2.0  
**** Stop (0) or continue (1) calculating next data****  
1
```

これでフィッティング結果がプロットファイルとして得られ、線幅などのパラメーターがアウトプットファイルとして得られました。あとはそのパラメーターを使用するなどして、好きなように解析しましょう！！