

E-QEGS Spectrum Analysis

UsersManual

目次

1. 更新履歴.....	1
2. 概要.....	1
3. 起動手順、ソース改変.....	2
4. 画面構成.....	4
5. Common Input / Output.....	5
6. Reconstruction.....	6
6.1. 入力、実行.....	6
6.2. 結果表示例.....	7
6.3. 出力ファイル.....	7
7. Q integration.....	9
7.1. 入力、実行.....	9
7.2. 結果表示例.....	10
7.3. 図の説明.....	10
7.4. 出力ファイル.....	11
8. E spectrum and ISF.....	12
8.1. 入力、実行.....	12
8.2. 補正用ファイル.....	14
8.3. 結果表示例.....	15
8.4. 図の説明.....	16
8.5. 出力ファイル.....	17
9. Show Past Results.....	17
10. データのダウンロード.....	18

1. 更新履歴

Version	Date	説明
1.1.0	Sept. 30, 2025	<ul style="list-style-type: none">・ Reconstruction、Q integration における ROI 設定仕様変更・ E spectrum and ISF の仕様変更<ul style="list-style-type: none">- data_table.csv コメント機能追加- q_min、q_max のデータ型変更（整数→float）- 出力先指定仕様変更- 2D 回折数字データ保存機能追加- S(q)テキストデータ保存及びテーブル表示機能追加- 準弾性散乱のバックグラウンド傾き補正有無選択機能追加・ ソースディレクトリ指定機能追加・ 解析ステップごとのログ出力機能追加
1.0.1	July 22, 2025	GUI が起動しない場合がある不具合を修正
1.0.0	May 12, 2025	初版リリース

2. 概要

E-QEGS Spectrum Analysis（以降、「本アプリ」と呼ぶ）は、BL35XU における CITIUS を用いたガンマ線準弾性散乱による計測システムのうち、SP8DC にて E-QEGS Train Integration（以降、「トレイン積算アプリ」と呼ぶ）でトレイン積算されたデータを用い、スペクトル解析を行うアプリである。本アプリは SP8DC OnDemand 環境で使用できる。

3. 起動手順、ソース改変

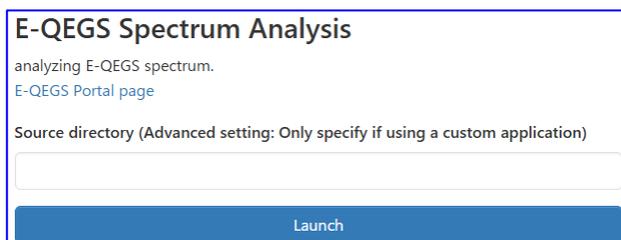
- ① SP8DC にアクセスできる環境において、以下の URL で OnDemand にアクセスする。

<https://ondemand.dmz.dc.spring8.or.jp>

- ② Sign In したら、トップページ (dashboard) にある Interactive Apps から E-QEGS Spectrum Analysis のアイコンをクリックする。



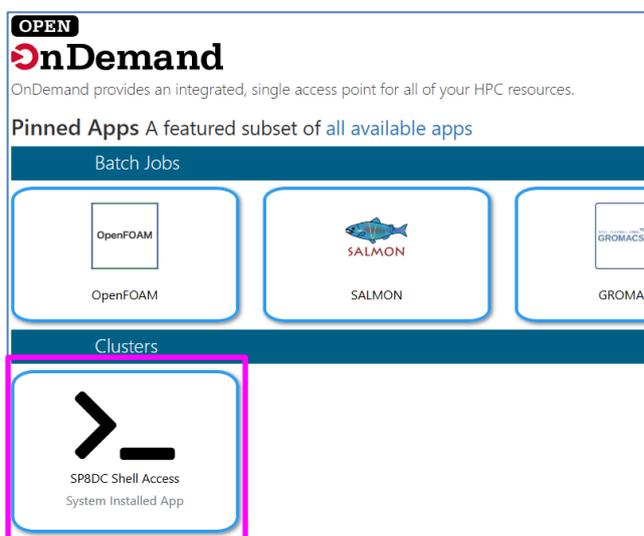
- ③ 必要に応じて以下を指定する。

A screenshot of the configuration form for the 'E-QEGS Spectrum Analysis' application. The form includes a title 'E-QEGS Spectrum Analysis', a description 'analyzing E-QEGS spectrum.', and a link to the 'E-QEGS Portal page'. There is a text input field for 'Source directory (Advanced setting: Only specify if using a custom application)' and a blue 'Launch' button at the bottom.

Source directory :

アプリのソースを公式版とは別のオリジナルのものとして使用する場合に、親ディレクトリを指定する。通常は空欄にすることで、公式版のソースが使用される。※WinSCP 等でパス先頭に付く「/lustre〇」は OnDemand では認識されないため、パスに含めないこと。

ソース一式を自アカウント配下にコピーする方法を以下に記す。



Putty 等のリモートログインクライアントまたは OnDemand の「SP8DC Shell Access」でターミナルを開き、まず以下のコマンドを入力、Enter を押下することで Singularity コンテナに入る。

`/home/share/apps/singularity-ce/4.0.2/bin/singularity`

shell

`/home/share/apps/ondemand/eqegs_spectrum_analysis-rocky93_x86_64.sif`

次に以下のコマンドを入力、Enter を押下することでコピーする（この例では架空アカウント「u0000000」のホームディレクトリ配下の「eqsrc」ディレクトリにソース一式がコピーされる）。

Singularity> `cp -r /opt/app/eqegs_spectrum_analysis /home/u0000000/eqsrc`

Source directory には、この「/home/u0000000/eqsrc」を指定する。なお編集できるのはこの例なら、

- ・ /home/u0000000/eqsrc/eqegs_spectrum_analysis.py
- ・ /home/u0000000/eqsrc/sub 配下

だけである。ソースを改変する場合、以下に留意すること。

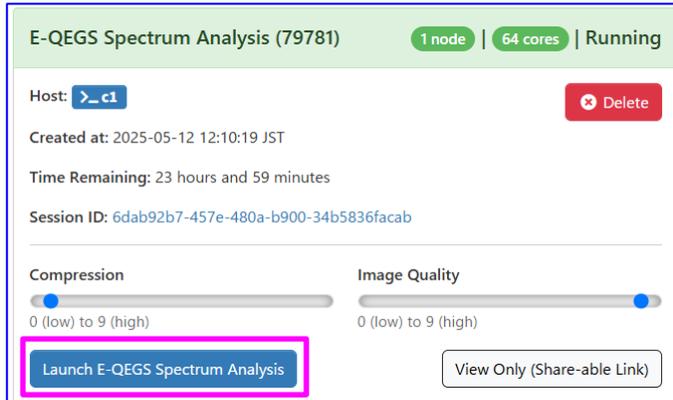
- ✓ 改変は自己責任で、改変後の動作はサポート対象外。自ら読解して編集・デバッグすることが前提。
- ✓ 機能追加やバグ修正で公式版が ver. アップした場合、ユーザが旧 ver. で改変したコードとのマージも、ユーザの自己責任となる。

なおデバッグしやすいように、各解析ステップにおけるログを以下に出力している。

`$(HOME)/eqegs_spectrum_analysis/reconstruction.log`、`q_integration.log`、`e_spectrum_and_isf.log`

ログが home 領域を圧迫しないよう、各解析ステップ実行毎に上書き出力としている。

- ④ Launch ボタンをクリックする。
- ⑤ 計算ノードが確保（※）されたら、Compression=0 (min)、Image Quality=9 (max)として、Launch E-QEGS Spectrum Analysis をクリックすると、GUI が起動する。



※使用リソースは以下が自動で指定される。全て、OnDemand で指定できる最大値である。

- ・ Elapsed time=24h ※「cpu パーティション」での最大値
- ・ Number of CPU cores=64
- ・ Required memory=224GB

24 時間が上限のため、GUI を起動してから 24 時間後に、GUI を起動しているジョブは強制的に終了する。解析実行中に終了した場合、実行中の処理は途中で終了する。従って放置しても問題はないが、数日間に渡って放置したい場合でも、1 日に 1 回は GUI を起動することになる。

なお SP8DC OnDemand ではセッション情報はサーバ側で保持されるため、ブラウザを閉じたりユーザ側の

PC をシャットダウンしたりしても、再度アクセスすれば前回の画面状態が継続されている。用が済んだ時は、GUI 起動時（上述④の画面）の Delete ボタンをクリックすることで、GUI ジョブが削除される。

4. 画面構成



Common Input / Output

各解析ステップ共通となる、入出力に関する情報の指定・情報表示を行う。

Reconstruction Q integration E spectrum and ISF

各解析ステップを実行する。

解析ステップごとに、同じ出力先に既存の解析結果が存在する場合は、上書きするかどうかの確認メッセージが表示され、YES をクリックすると上書きとして処理が開始する。

Show Past Results

過去の解析結果を表示する。

Results of Each Analysis Step

各解析ステップの実行結果を表示する。解析ステップごとにタブで分かれている。

※分かりやすいように、各 Execute ボタンの色と、このタブの色を合わせている。

また解析等の処理を行っている時は、画面最下部（ステータスバー）に実行中の内容が簡潔に表示される。

5. Common Input / Output

Common Input / Output

Sample (train integrated)

Account (train integrated)

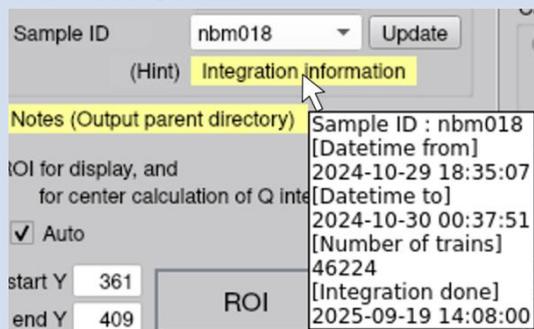
Proposal No.

Sample ID

(Hint) Integration information

Notes (Output parent directory)

項目	説明
Account	トレイン積算アプリで指定した、積算結果出力先のアカウントを指定する。
Proposal No.	解析対象の課題番号を指定する。 /UserData/<Account>/EQEGS/ 配下、即ちトレイン積算が完了した Sample ID が含まれる課題番号を選択肢としている。
Sample ID Update Integration information	解析対象の Sample ID を指定する。 /UserData/<Account>/EQEGS/<Proposal No.>/ 配下、即ちトレイン積算が完了した Sample ID を選択肢としている。トレイン積算アプリと本アプリは動的に連携しているわけではないので、選択肢を最新情報に更新するには、Update ボタンをクリックする。 Integration information 上にマウスポインタを置くと、積算済情報がポップアップ表示される。
Notes	マウスポインタを置くことで、各種仕様の概略がポップアップ表示される。 ※ 以降の「Notes」も同様。



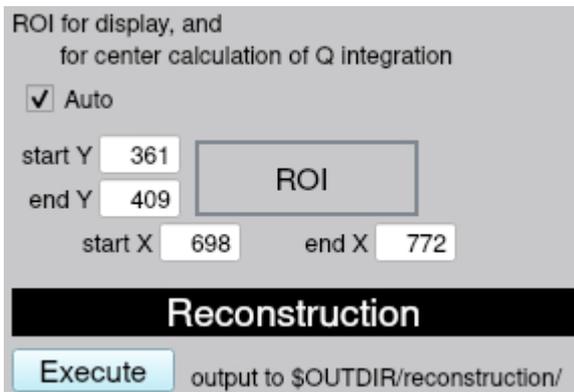
「Notes」に記している通り、解析結果の出力先親ディレクトリは以下の通りで、これはトレイン積算結果と同じアカウント配下に解析結果も出力されることを意味する。

/UserData/<Account>/EQEGS/<Proposal No.>/<Sample ID>

6. Reconstruction

トレイン積算データを使用して、frame ごとに、3 センサ画像を 1 つの画像に再構成する。

6.1. 入力、実行



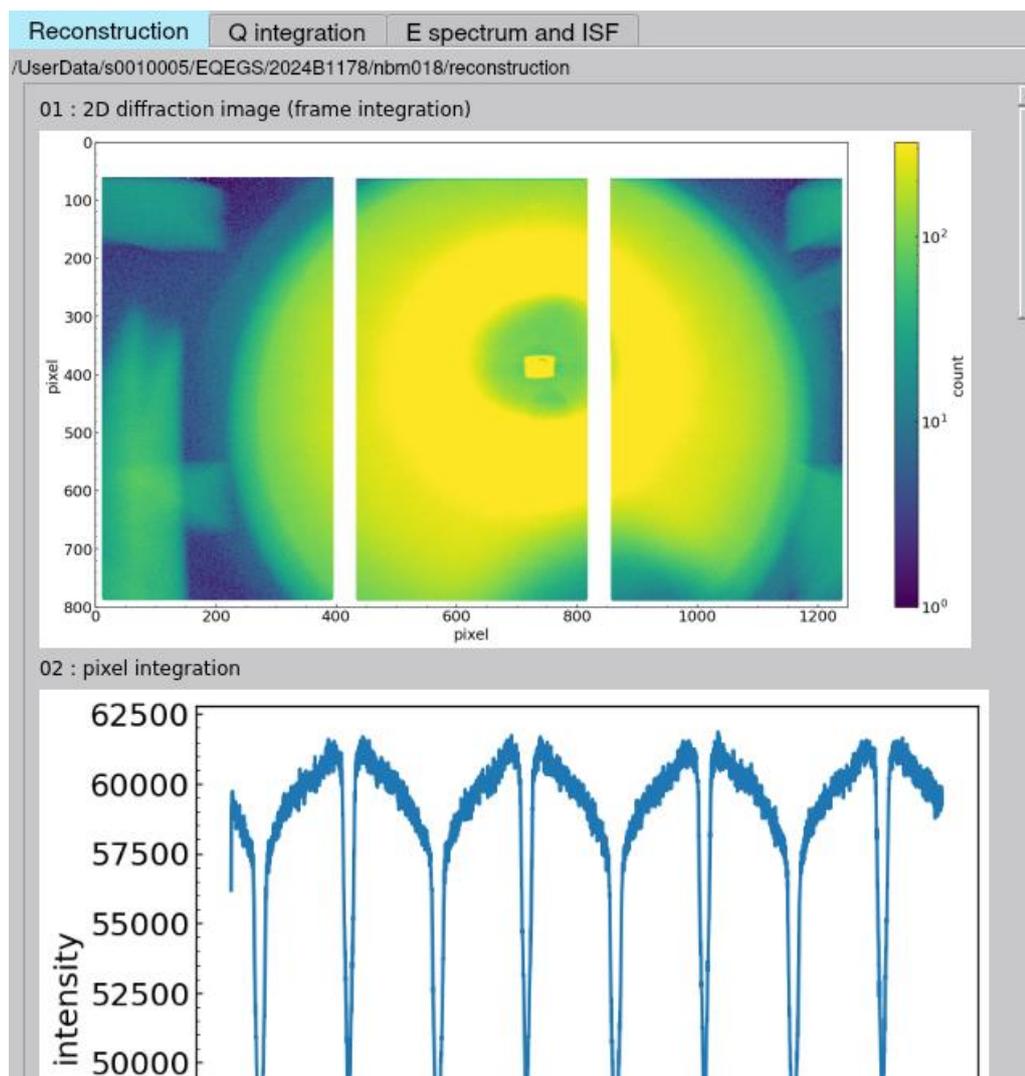
項目	説明
ROI~	ビーム中心検出の際にノイズを誤検出しないように設定する ROI。Reconstruction と Q integration の共有情報である。Reconstruction では、ROI 画像の生成に使用する。Auto にチェックが入っていれば、内部で ROI を自動設定（ピクセル最大値付近）して Reconstruction 終了時に GUI の各座標に反映される。極めて強いノイズが入っているようなシーンでは Auto のチェックを外し、見たい場所を手動で指定する。その指定値が ROI 画像の生成に使用される。Q integration では、Auto のチェック有無は関係なく、GUI に表示中の各座標が ROI として中心計算に使用される。 ※上図の各座標値の例では、ROI のサイズは $\text{width} = \text{end X} - \text{start X} + 1 = 75$ 、 $\text{height} = \text{end Y} - \text{start Y} + 1 = 49$ 、即ち end 座標は ROI に含まれる。

Execute ボタンをクリックすれば処理が開始される。

参考処理時間：1.7 分

他の解析ステップも同様で、処理時間は入力データ（frame 数）、他者や他のプロセスの I/O 利用状況によって長引く場合がある。本書に記す参考処理時間は、SP8DC が混み合っていないシーンで計測したものである。

6.2. 結果表示例



6.3. 出力ファイル

/UserData/<Account>/EQEGS/<Proposal No.>/<Sample ID>/reconstruction/ 配下に出力されるデータを以下に示す。

ディレクトリ、ファイル		説明
dl	fig	*.png 画面表示した図やグラフの画像データ。
	info	info.json GUI と解析コードで情報連携するためのファイル。兼記録用。GUI で入力した情報が記録される。
		roi_detection.json ROI の Auto にチェックが入っている場合に、検出した各座標値が記録される。
		train_integrated.json 使用したトレイン積算データの積算情報。記録用。
reconstruction.csv		再構成後にフレーム積算した 2 次元画像データ (結果 01) の csv 版。
reconstruction.npy		再構成画像データ。4092×728×384 など、3 次元の numpy 形式。Q integration、E spectrum and ISF で読まれる。

他の解析ステップも同様で、「dl」ディレクトリは後でまとめてダウンロードしやすいように、以下に zip 圧縮して設置される。

/UserData/<Account>/EQEGS/<Proposal No.>/download/ 配下

✓ reconstruction_<Sample ID>.zip

- ✓ q_integration_<Sample ID>.zip
- ✓ e_spectrum_and_isf_<Sample ID>.zip

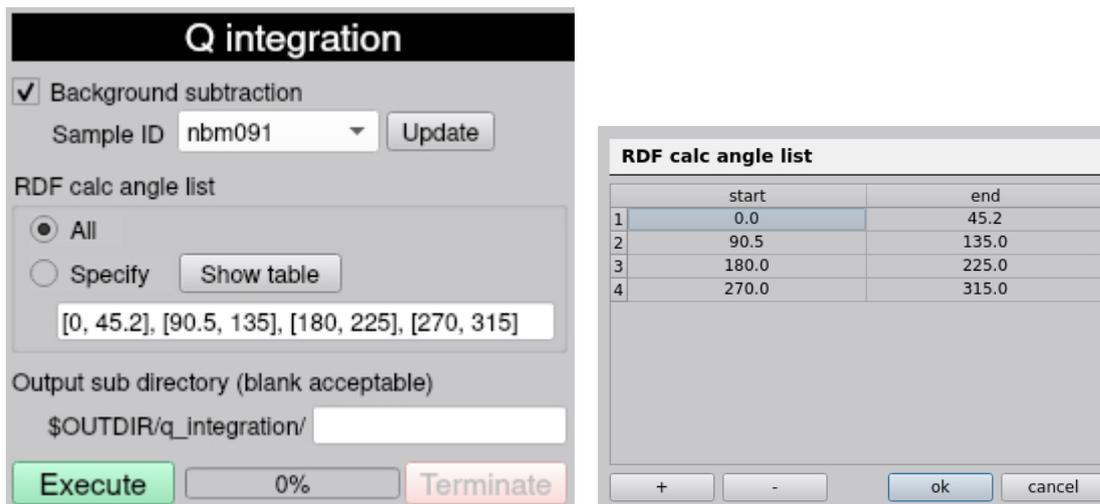
ただし、Q integration、E spectrum and ISFにおいては、それぞれサブディレクトリ指定時はファイル名が以下となる。

- 説明用に、次のように略記。
 - ・ Q integration の sub directory=\$QS
 - ・ E spectrum and ISF の output sub directory=\$ES
 - ・ Sample ID=\$SI
- Q integration にて\$QS 指定
 - ・ q_integration_ \$SI_ \$QS.zip
- E spectrum and ISF にて input sub directory 指定なし、output sub directory で\$ES 指定
 - ・ e_spectrum_and_isf_ \$SI_ o_ \$ES.zip
- E spectrum and ISF にて input sub directory で\$QS を指定、output sub directory 指定なし
 - ・ e_spectrum_and_isf_ \$SI_ i_ \$QS.zip
- E spectrum and ISF にて input sub directory で\$QS を指定、output sub directory で\$ES 指定
 - ・ e_spectrum_and_isf_ \$SI_ i_ \$QS_ o_ \$ES.zip

7. Q integration

ビーム中心検出、バックグラウンド減算、中心から動径方向の強度を積算する。

7.1. 入力、実行

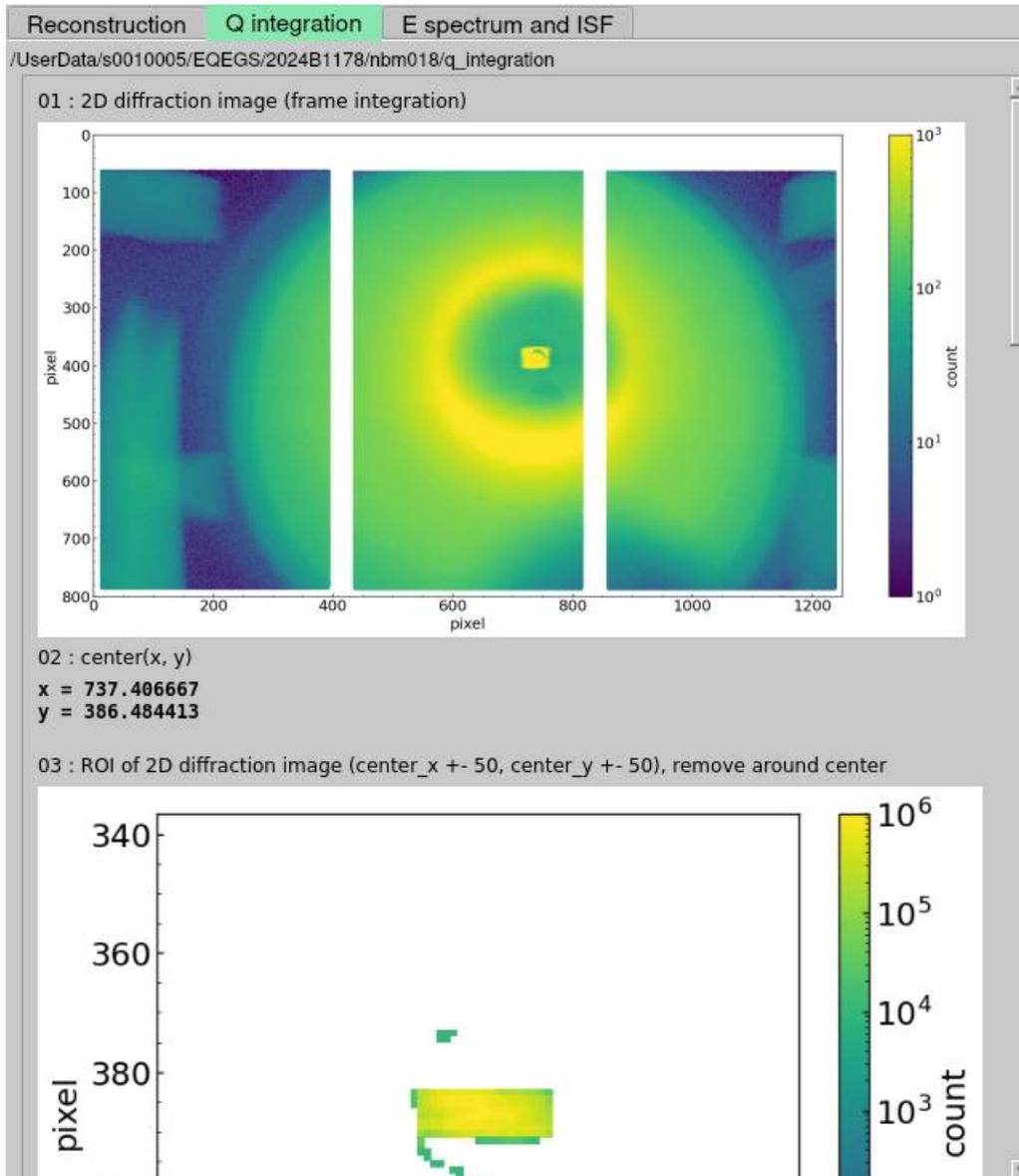


項目	説明
Background subtraction Update	バックグラウンド減算を行う場合は、チェックを入れてバックグラウンドとして使用する Sample ID を選択する。バックグラウンドデータは前述の再構成画像データで、Reconstruction が完了した ID が選択肢となる。選択肢を最新情報に更新するには、Update ボタンをクリックする（Reconstruction 実行完了時は自動で更新しているが、並行して他のユーザが別 GUI で Reconstruction するシーンを想定して Update ボタンを設けている）。
RDF calc angle list all specify Show table	q の計算角度を指定する。全方位使用する場合は all を選択する。角度を指定する場合は specify を選択し、テキストボックスを手動で編集するか、Show table で表示されるテーブル操作（上右図）で指定する。 [start, end]の組み合わせ数は特に制限を設けていない。 角度は X 軸右方向を 0 度として、時計回りに増加する。
Output sub directory	同一 Sample ID に対して複数の実行結果を保持したい場合は、サブディレクトリを指定する。0~9、a~z、A~Z、アンダーバーのみ使用可能。

Execute ボタンをクリックすれば処理が開始されるが、他の解析ステップと比べて処理時間が長めで、かつこのステップだけは別ノードに並列ジョブを投入する（強度計算処理のみ）ため、進捗バーと Terminate ボタンを設けている。何らかの指定を誤った場合などに、このボタンで処理をキャンセルできる。進捗は大雑把で、ビーム中心検出完了で 15%、バックグラウンド減算完了で 60%、強度積算で 100%という 3 ステップである。

参考処理時間 : 4.2 分（ビーム中心検出 50 秒 + バックグラウンド減算 98 秒 + 強度計算 104 秒）

7.2. 結果表示例



7.3. 図の説明

01	2D 回折画像 (全 frame 積算) BG 減算前
02	ダイレクトビーム中心位置
03	前方散乱付近の回折像 (ビーム中心から x, y とも ± 50 ピクセル範囲、ビーム中心付近以外ゼロ化)
04	前方散乱付近の回折像 (ビーム中心から x, y とも ± 20 ピクセル範囲)
05	2D 回折画像 (ビーム中心付近以外ゼロ化)
06	前方散乱強度の総和 サンプルと散乱ノイズ
07	2D 回折画像 (全 frame 積算) バックグラウンド減算後
08	マスク (白い部分が解析に使う部分)
09	マスク適用後の 2D 回折画像 (全 frame 積算) バックグラウンド減算後
10	散乱強度/pixel (マスク後、バックグラウンド減算後) のダイレクトビーム位置からの距離 r 依存性

7.4. 出力ファイル

/UserData/<Account>/EQEGS/<Proposal No.>/<Sample ID>/q_integration/ 配下（サブディレクトリ指定時は更にそのディレクトリ配下）に出力されるデータを以下に示す。

ディレクトリ、ファイル		説明	
dl	fig	*.png、*.txt、*.csv	画面表示した図やグラフの画像、テキスト、テーブルデータ。
	info	info.json	GUI と解析コードで情報連携するためのファイル。兼記録用。GUI で入力した情報が記録される。
		q.json	解析コード内で情報連携するためのファイル。兼記録用。
	2Dimage_diff_SCATTERING_NOISE.csv		バックグラウンド減算後の 2 次元画像データ（結果 07）の csv 版。
	rdf_diff_scattering_noise.txt		散乱強度の q 依存性データ。
log	*	各種ログ。記録用。	
rdf.npz		散乱強度の波数依存性データ。E spectrum and ISF で読まれる。	
mask.npy		RDF calc angle list で specify にて角度を指定した場合のみ出力される、マスクデータ。	

8. E spectrum and ISF

中間散乱関数を求める。

8.1. 入力、実行

項目	説明
Directory of calibration files	各種補正用ファイル（後述）が格納されているディレクトリを指定する。 ※WinSCP 等でパス先頭に付く「/lustre〇」は OnDemand では認識されないため、パスに含めないこと。
Calibration number use data_table.csv Get comment specify Velocity number Angle number	各種補正で使用する設定番号を、data_table.csv から読み取るか、個別に指定するかを選択する。 data_table.csv を使用する場合、csv の 4 列目にコメントを記載していれば、Get comment ボタン押下でそのコメントを下の黄色い枠内に表示する。黄色い枠内にマウスポインタを置くことで、コメント全文がポップアップ表示される（これは枠内に収まらない場合のための機能で、その場合は黄色い枠内の文字の最後が「...」となる）。コメントにカンマ「,」は含められない（そこでコメントは打ち切られる）。
q_min、q_max	計算する q の範囲を、最小値と最大値で指定する。非負 float 値。
Rebin factor	準弾性と分解能関数を線形変換後に足し合わせるデータ点数。1 の場合、標準の足し合わせ個数（最小のデータ点間隔）。非負整数。
Background fitting Number of data points for fitting	バックグラウンドの傾き補正を行う場合は、チェックを入れて計算に使用するデータ点数（非負整数）を指定する。
relax BG coeff	準弾性スペクトルのバックグラウンドを修正する際の係数。float 値。
ISF error threshold	中間散乱関数において表示する点を選択する際の誤差閾値（これより大きな誤差を持つ点は表示しない）。非負 float 値。
Input sub directory	Q integration でサブディレクトリに出力した場合の、当該サブディレクトリを指定する。0~9、a~z、A~Z、アンダーバーのみ使用可能。

Output sub directory Use q range Specify	同一 Sample ID に対して複数の実行結果を保持したい場合は、サブディレクトリを指定する。 例えば q_min=10.1、q_max=14.1 を指定して「Use q range」を選択した場合は、出力先サブディレクトリは「10.1_14.1」となる。なお例えば q_min=10.0、q_max=14.0 といった整数と同値を指定した場合は、小数点以降は無視されて「10_14」というサブディレクトリになる。これは、10.0 と 10 とで別ディレクトリになるのは不自然であることと、Show past 機能において「Use q range」を指定している場合、10.0 と 10 とで異なるディレクトリを指すのは利便性が悪いため、取り入れられた仕様である。 「Specify」を指定した場合は、任意名称でサブディレクトリを指定できる（空欄ならサブディレクトリを作らない）。0~9、a~z、A~Z、アンダーバーのみ使用可能。
--	--

Execute ボタンをクリックすれば処理が開始される。

参考処理時間 : 0.9 分

8.2. 補正用ファイル

補正用ファイルは次の通りで、data_table.csv 以外は必須である。

これらを例えば /home/<ACCOUNT>/EQEGS/calib/ など任意の場所に設置して、前述の Directory of calibration files で指定して使う。

ファイル	説明
calibration_angle.py	角度補正用の関数定義ファイル。補正番号に応じて使用する角度補正用の関数を記述する。
calibration_velocity.py	速度補正用の関数定義ファイル。補正番号に応じて使用する速度補正用の関数を記述する。
sp_param.json	"START_CUT_FRAMES"として、先頭から除外する frame 数を指定する。デフォルトは 5。
data_table.csv (任意)	Sample ID ごとに、速度補正と角度補正の設定番号を記載したテーブルデータ。

data_table.csv を使用する場合は、次のような csv 書式で用意する。sample_name とは、Sample ID の数値部を表す。

```
sample_name, velocity, angle, comment(Do not include commas)
001,1,0,this is comment example of Sample
002,1,0,this is comment example of Sample.
003,1,0,No.003's comment
004,1,0,No.004's comment
```

なお後述 (8.5. 出力ファイル) の通り、補正用ファイルは記録の意味で解析結果とともに出力先 Sample ID ディレクトリ配下にコピーしているため、ユーザ自ら毎回どれを使ったか記録する必要はない。

補正ファイルの example は以下 (前述の起動手順に記載した GUI 起動ページにも、E-QEGS Portal page というリンクを掲載している) からダウンロードすることも可能である。

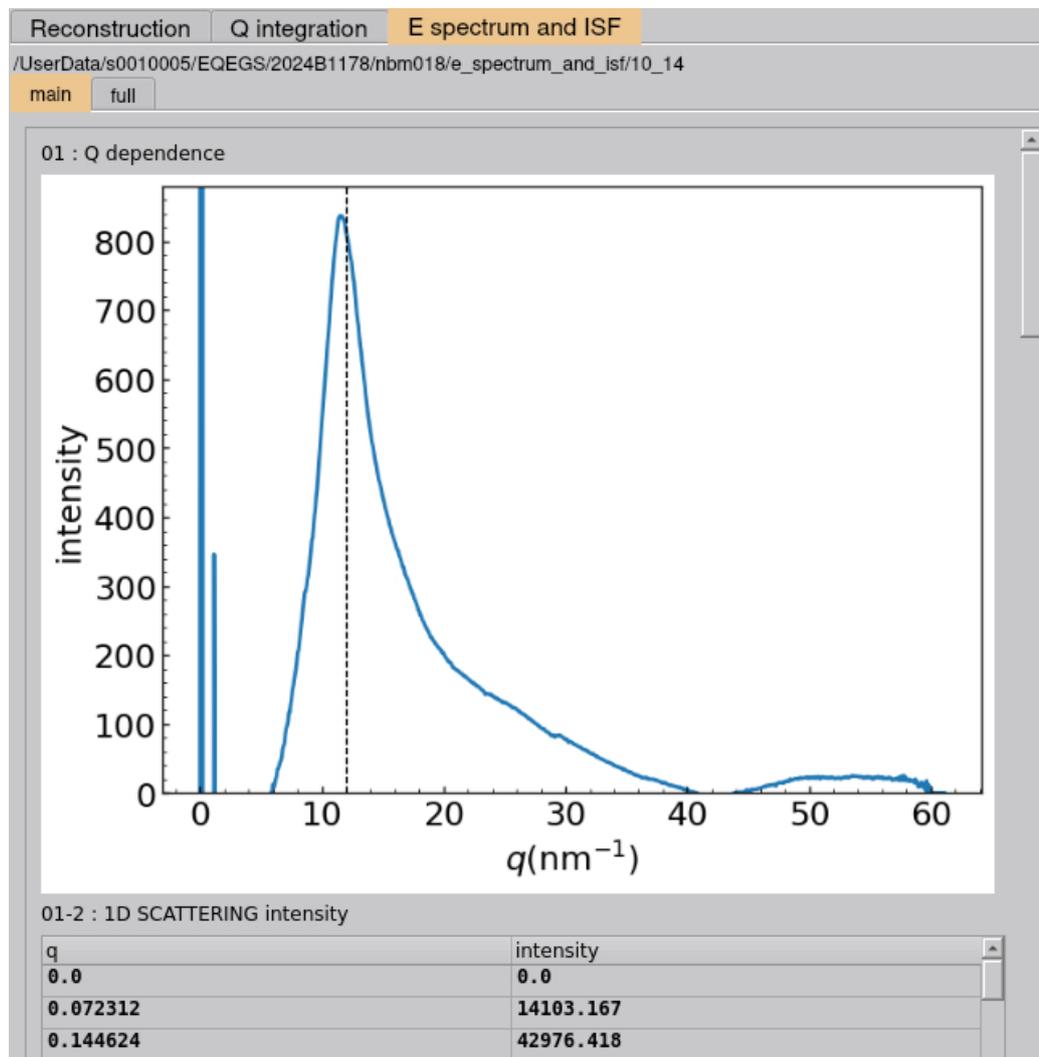
<https://dc-portal.spring8.or.jp/apps/e-qegs/>



8.3. 結果表示例

この解析ステップで出力する図やグラフの数は多いため、Results of Each Analysis Step の E spectrum and ISF のタブ内に、さらに main タブと full タブに分けている。

main は主要な図やグラフ、full は main を含む全ての図やグラフを表示している。



8.4. 図の説明

01	散乱強度/pixel（マスク後、バックグラウンド減算後）の q 依存性
01-2	01 の数値データ
02	2D 回折画像（全 frame 積算） バックグラウンド減算後
03	ダイレクトビーム像
04	前方散乱のトレイン積算スペクトル
05	入力速度波形
06	前方散乱—速度のプロット（速度キャリブレーション用）
07	06 の拡大図
10	前方散乱スペクトル（速度依存性）にしたときに何点の平均としたか
11	前方散乱スペクトル（速度依存性）縦軸は足した点の平均（平均としないと足す数によって値がとびとびになる。何点足したかは後で統計誤差を評価する際に考慮）
12	速度の切り替えし領域のためカットする領域を表示
13	散乱強度/pixel（マスク後、バックグラウンド減算後）の q 依存性、解析を行う波数域
14	選ばれた全ての波数点でのエネルギースペクトル（散乱角ごとのエネルギー補正後）
15	準弾性散乱スペクトル（速度依存性）縦軸は足した点の平均、速度切り返しに伴うカット領域も表示
16	準弾性散乱スペクトル（速度依存性）にしたときに何点の平均としたか
17	バックグラウンド補正に使われる領域の表示
18	バックグラウンド補正 fit 結果
19	バックグラウンドの表示：前方散乱
20	バックグラウンドの表示：準弾性散乱
21	前方散乱スペクトルと準弾性散乱スペクトル（速度依存性）
22	バックグラウンドの値
23	バックグラウンドによる縦軸規格化
24	上に凸形前方散乱、準弾性散乱スペクトル（速度依存性）
25	上に凸形前方散乱、準弾性散乱エネルギースペクトル
26	FFT 後の前方散乱スペクトルと準弾性散乱スペクトルの実部
27	FFT 後の前方散乱スペクトルと準弾性散乱スペクトルの虚部
28	ISF
29	前方散乱の誤差付き吸収スペクトル
30	準弾性散乱の誤差付き吸収スペクトル
31	MC シミュレーション用の前方散乱スペクトル 500 個
32	MC シミュレーション用の準弾性散乱スペクトル 500 個
33	MC シミュレーション用の上に凸形前方散乱スペクトル 500 個
34	MC シミュレーション用の上に凸形準弾性散乱スペクトル 500 個
35	FFT 後の MC 前方散乱スペクトルと MC 準弾性散乱スペクトルの実部
36	FFT 後の MC 準弾性散乱スペクトルと MC 準弾性散乱スペクトルの実部 対数プロット
37	MC スペクトル 500 個から求めた ISF 500 個
38	MC スペクトル 500 個から求めた ISF の各点の標準偏差
39	誤差つき ISF
40	選択された値以下の誤差を持つ ISF データセット
42	上に凸形前方散乱、準弾性散乱エネルギースペクトル、誤差付き

8.5. 出力ファイル

/UserData/<Account>/EQEGS/<Proposal No.>/<Sample ID>/e_spectrum_and_isf/ 配下（サブディレクトリ指定時は更にそのディレクトリ配下）に出力されるデータを以下に示す。

ディレクトリ、ファイル		説明	
dl	fig	*.png、*.txt、*.csv	画面表示した図やグラフの画像、テキスト、テーブルデータ。
	info	info.json	GUI と解析コードで情報連携するためのファイル。兼記録用。GUI で入力した情報が記録される。
		各補正用ファイル	前述の補正用ファイルを、使用データとしてコピーしたもの。記録用。
	1D_SCATTERING_inten sity.csv	前述 01-2 の数値データ。	
	2Dimage_diff.csv	前述 02 の数値データ。	
	Energyfit_relax_*	規格化された準弾性散乱スペクトル。	
	Energyfit_resol_*	規格化された分解能関数スペクトル。	
	time_Sq_std_*	中間散乱関数。	
	time_Sq_std_THRESH_*	閾値以下の誤差を持つ点のみからなる中間散乱関数。	

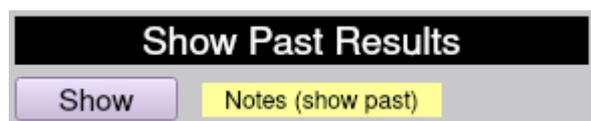
* = <Sample ID の数値部分>_q<q_min 値>to<q_max 値>q_BG_coeff.txt

9. Show Past Results

過去の解析について、GUI 上で指定している各対象（※）の結果を読み込んで表示する。

※Common Input / Output で指定している対象、Q integration・E spectrum and ISF で指定している各 sub directory。

なお Results の図だけでなく、Q integration・E spectrum and ISF で指定している各 Parameter も上書き表示される（Results と Parameter が矛盾しないようにするため）。

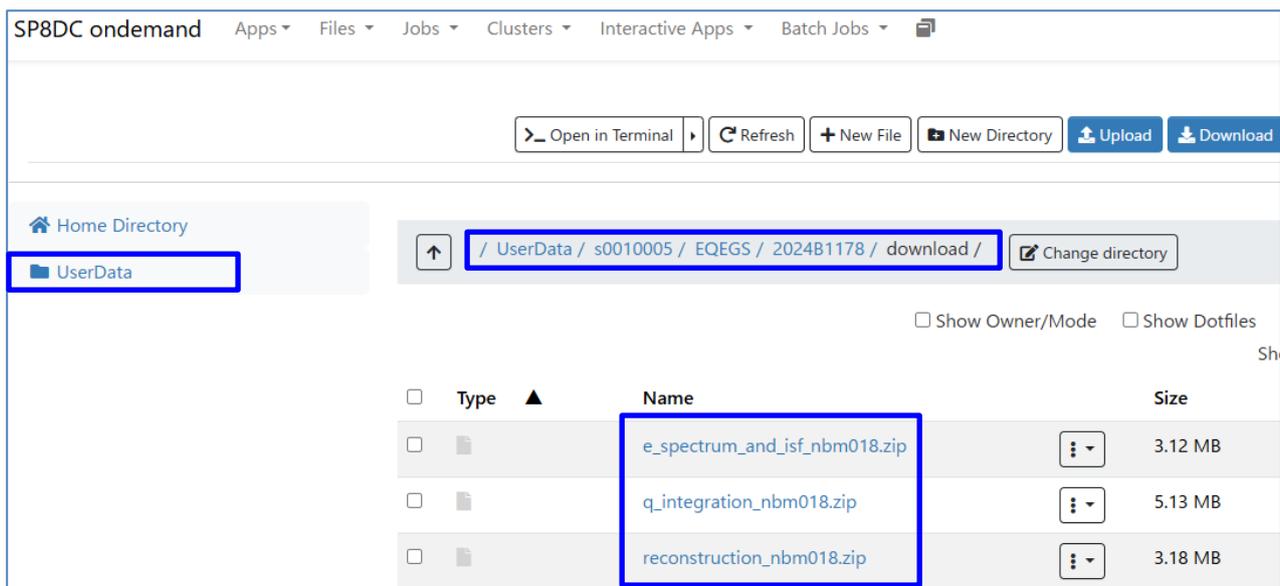
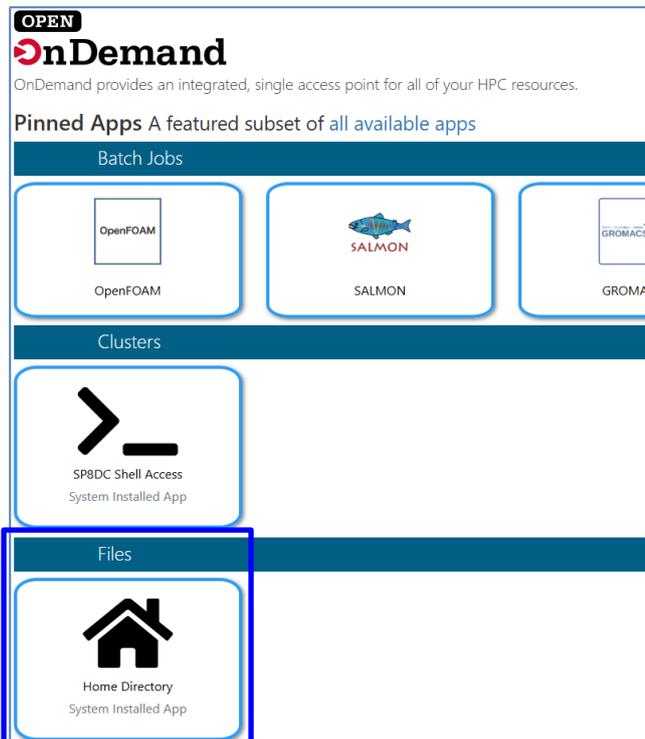


Show ボタンをクリックするだけである。

10. データのダウンロード

6.3 に記した通り、各解析ステップで出力される「dl」ディレクトリは後でまとめてダウンロードしやすいように、zip 圧縮化して設置している。

SP8DC OnDemand では、下図の「Home Directory」からデータをダウンロードすることができる。



ただし各解析ステップの Results で表示された画面上で、テキストデータやテーブルデータについてはマウスドラッグ選択、Ctrl+C でクリップボードにコピーすることが可能である（Ctrl + A で全選択も可）。

※テーブルデータはクリップボードからそのまま Excel に貼り付けることも可能。