

## 卒業論文要旨

# PIXE スペクトル解析ソフト SAPIX の移植

(環境計測) 山口 修平

### 1. はじめに

PIXE とは、Particle Induced X-ray Emission (荷電粒子誘導 X 線分析) のことである。加速させた荷電粒子を試料に照射し、その結果発生した元素固有のエネルギーを持つ特性 X 線を計測することで元素分析を行なう。X 線の計測には通常 Si (Li) 半導体検出器が用いられる。求める元素の X 線ピークがスペクトル上で単独な場合は、簡単にそのカウントを算出できるが、一般に得られるスペクトルは、KX 線、LX 線などの X 線が複数に重なり合うことが多く、更に制動 X 線が複雑なバックグラウンドを形成するため、高度なスペクトル解析が要求される。そこで、スペクトルから試料に含まれる元素の定量を行うにはコンピュータによる解析が必須となる。

SAPIX (Spectrum Analysis for PIXE) は 1988 年、世良耕一郎氏 (現岩手医科大学サイクロトロンセンター教授) によって開発された。当初は PC98 機用に開発され、その後海外からの要望に答えるため Quick Basic への変換が行なわれ、IBM PC 機でも使用可能となった。現在でも PIXE 研究者の間で使われている。しかし、SAPIX は MS-DOS 上で動くプログラムであり、Windows XP など、今日的な OS 上では直接動かない。

SAPIX を継続的に使うためにはバーチャルマシン上で動かす、新たな言語に移植するという 2 つの方法がある。バーチャルマシン上に Windows2000 を置いて SAPIX が動くことを確認したが、SAPIX 自身が古い PC の規格に合わせているため解像度が低い、全てキーボードからのコマンド操作であるなど、今日的でない要素が数多く存在する。また、SAPIX は構造化が不十分である問題や、殆どの変数がグローバルという変数管理上の問題もある。今後、機能の拡張とともに、それに対応するためのプログラムの拡張、改良が必要となり、継続的に使うためにはプログラムの可読性を高めることが好ましい。これらの問題の解決を図るため、Windows 上で直接動く言語への移植をすることにした。使用する言語はオブジェクト指向の Visual Basic 2005 とした。これによって、OS やユーザーインターフェイスに関する問題の解決を図ること、可読性を高めることを目指した。

### 2. 移植

#### 2.1 開発環境

OS : Microsoft Windows XP

PC : DELL OptiPlex GX260 (CPU : Pentium(R) 4-3.20GHz 、メモリ : 2.00GB)

プログラミング言語 : Visual Basic 2005

#### 2.2 プログラム処理の流れ

SAPIX によるフィッティングまでの手順は以下のようになる。

① ファイルの読み込み。エネルギー、ピーク幅校正用ファイルの読み込み。X 線エネルギー

一表の読み込み。

- ② X線スペクトルを描画。X線スペクトルのX-Yスケールの変換。
- ③ バックグラウンド処理。バックグラウンドはスペクトル全体として大局的にとらえたバックグラウンド関数(多項式を用いている)を作り、実際のフィッティングではその関数を基礎として、それに補正を加えるという方法を取っている。
- ④ フィッティング領域の指定、ピーク位置のサーチ、パラメーターの自動設定。
- ⑤ フィッティング。③、④で得たパラメーターより行なう。フィッティングのアルゴリズムは修正 Marquardt 法を用いている。

### 2.3 移植の方針

SAPIXはおよそ5000行に亘る長いプログラムであるが、分岐命令が多用され読み難く、また、殆どの変数がグローバルとなっており、動作が解り辛い。そこで移植は、2.2の処理の順に沿ってオブジェクトを使い、扱いやすいプログラムを目標に行なった。現在、2.2の一連の処理を行なうことまではできており、計265あるメインプロシージャとサブプロシージャの内、160の移植を終えている。今後のメンテナンスを考慮して、移植後は各プロシージャに使用する変数を意味も付け加えた上で記載し変数管理を行なった。

### 3. 移植の結果

生物試料(人肺)のサンプルデータを用いて移植前と後のプログラムでフィッティングを行なった(フィッティング領域:180~217チャンネル 元素:Fe)。図1と図2にその結果を示す。図1と図2ともにX線スペクトル下部の曲線はバックグラウンド、フィッティング領域のバックグラウンド上部の曲線は補正を加えたバックグラウンドを表しており、フィッティング領域のX線スペクトルに重なっている曲線はガウス曲線及びそれにバックグラウンド補正を加えた曲線を表している。

2つの図を比べるとX線スペクトル描画、バックグラウンド関数が一致しており、フィッティングの度合いを示すカイスクエアの値から、正しく移植されていることが確認された。また、描画能力が上がっていることがわかる。

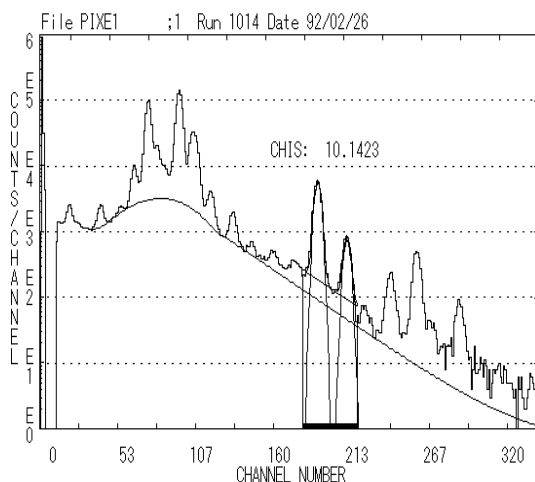


図 1. 移植前のフィッティング結果

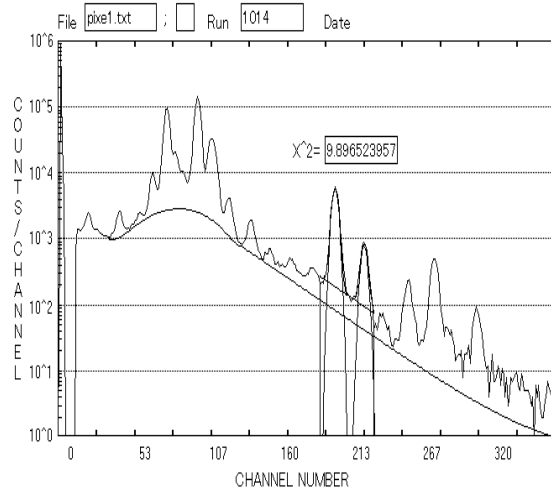


図 2. 移植後のフィッティング結果