

DIN ISO 22029

ICS 71.040.50; 35.040

Einsprüche bis 2013-09-06

Entwurf**Standardisiertes Dateiformat für den Datenaustausch von Spektren
(ISO 22029:2012)**

Standard file format for spectral data exchange (ISO 22029:2012)

Format standard de fichier pour échange de données spectrométriques (ISO 22029:2012)

Anwendungswarnvermerk

Dieser Norm-Entwurf mit Erscheinungsdatum 2013-05-06 wird der Öffentlichkeit zur Prüfung und Stellungnahme vorgelegt.

Weil die beabsichtigte Norm von der vorliegenden Fassung abweichen kann, ist die Anwendung dieses Entwurfes besonders zu vereinbaren.

Stellungnahmen werden erbeten

- vorzugsweise online im Norm-Entwurfs-Portal des DIN unter www.entwuerfe.din.de bzw. für Norm-Entwürfe der DKE auch im Norm-Entwurfs-Portal der DKE unter www.entwuerfe.normenbibliothek.de, sofern dort wiedergegeben;
- oder als Datei per E-Mail an nmp@din.de möglichst in Form einer Tabelle. Die Vorlage dieser Tabelle kann im Internet unter www.din.de/stellungnahme oder für Stellungnahmen zu Norm-Entwürfen der DKE unter www.dke.de/stellungnahme abgerufen werden;
- oder in Papierform an den Normenausschuss Materialprüfung (NMP) im DIN, 10772 Berlin (Hausanschrift: Burggrafenstr. 6, 10787 Berlin).

Die Empfänger dieses Norm-Entwurfs werden gebeten, mit ihren Kommentaren jegliche relevanten Patentrechte, die sie kennen, mitzuteilen und unterstützende Dokumentationen zur Verfügung zu stellen.

Gesamtumfang 14 Seiten

Normenausschuss Materialprüfung (NMP) im DIN

Inhalt

	Seite
Nationales Vorwort	3
Einleitung.....	4
1 Anwendungsbereich	4
2 Allgemeine Betrachtungen	4
3 Beschreibung des Formats	6
3.1 Allgemeines	6
3.2 Erforderliche Schlüsselwörter.....	7
3.3 Spektrendaten	8
3.4 Optionale Schlüsselwörter	9
3.5 Abschließen einer Datei	12
4 Beispiel für eine Datei im EMSA-Spektrenformat.....	12
Literaturhinweise	14

Nationales Vorwort

Diese Internationale Norm (ISO 22029:2012) wurde vom Technischen Komitee ISO/TC 202 „Microbeam analysis“ erarbeitet, dessen Sekretariat vom SAC (China) geführt wird.

Das zuständige deutsche Gremium ist der Arbeitsausschusses NA 062-08-18 AA „Elektronenmikroskopie und Mikrobereichsanalyse“ im Normenausschuss Materialprüfung (NMP).

Mikrobereichsanalyse — EMSA/MAS-Standard-Dateiformat für den Datenaustausch von Spektren

Einleitung

Das ursprüngliche EMSA/MAS-Standard-Dateiformat für den Datenaustausch von Spektren wurde im Oktober 1991 veröffentlicht. Seitdem haben Fortschritte sowohl in der Mikrobereichsanalyse als auch im Bereich der Computertechnologie dazu geführt, dass dieser ursprüngliche Standard den heutigen Anforderungen nicht mehr vollständig gerecht wird. Die vorliegende aktualisierte Fassung wird von den Mitgliedern des ISO/TC 202 (dem für die Mikrobereichsanalyse zuständigen Technischen Komitee der ISO) vorgeschlagen. Es wurde darauf geachtet, nur solche Änderungen vorzunehmen, die die Anwendbarkeit des Standards verbessern oder an den aktuellen Stand anpassen, wobei versucht wurde, Inkompatibilitäten mit der Ursprungsnorm auf ein Mindestmaß zu beschränken. Der Aufgabenbereich des TC 202 umfasst nicht Verfahren der Oberflächenanalyse; diese fallen in den Bereich des ISO/TC 201, weshalb Verweisungen auf entsprechende Verfahren gegenüber der ursprünglichen Fassung wo nötig gestrichen wurden. Das ursprüngliche Dokument enthielt außerdem Beispiele für Codierungs- und Telekommunikationsprotokolle. Da diese mittlerweile größtenteils veraltet sind und für die Formatierung der Daten keine wesentliche Rolle spielen, wurden sie ebenfalls gestrichen.

Es wird darauf hingewiesen, dass eine der Organisationen (EMSA) seit Veröffentlichung des ursprünglichen Standards ihren Namen geändert hat. Der offizielle Name lautet nun „Microscopy Society of America“ bzw. MSA; der Namensbestandteil „Electron“ wurde gestrichen, um die Arbeit und das Interesse der Mitglieder der Gesellschaft an jeglicher Form der Mikroskopie besser widerzuspiegeln.

1 Anwendungsbereich

Diese Internationale Norm stellt ein einfaches, als EMSA/MAS-Standard bezeichnetes Format für den Austausch digitaler Spektrendaten vor. Dieses Format ist sowohl für den Menschen als auch für Computer lesbar und zur Übertragung durch verschiedene elektronische Netze, das Telefonsystem (mit Modems) oder auf physikalischen Computerspeichern (wie mobile Speichermedien) geeignet. Das Format ist nicht an einen Computer, eine Programmiersprache oder ein Computerbetriebssystem gebunden. Die Anwendung dieses Standardformats würde unterschiedlichen Laboratorien den freien Austausch von Spektrendaten ermöglichen und bei der Standardisierung von Datenanalysesoftware helfen. Wenn die Gerätehersteller ein gemeinsames Format unterstützen, kann die Mikroskopie- und Mikroanalyse-Gemeinschaft den doppelten Aufwand, den das Schreiben von Datenanalysesoftware darstellen würde, vermeiden.

2 Allgemeine Betrachtungen

Die Vorzüge eines einzigen Standard-Datenformats wurden bereits von verschiedenen Autoren sehr anschaulich beschrieben [1], [2], [3], [4]. Oft wäre es praktisch, nachdem ein anderes Labor aufgesucht wurde, um einen anderen Spektrometertyp für die Mikroanalyse zu benutzen, zur Auswertung der Daten in das eigene Labor zurückkehren zu können oder wenn ein Labor ein Spektrum an eine andere Gruppe an einem anderen Standort versenden könnte, damit diese das Spektrum auf ihrem Computer analysieren könnte. Mit einem gemeinsamen Format wäre es außerdem möglich, Prüfspektren zwischen Datenerfassungssystemen zu transportieren, um unterschiedliche Datenanalyseroutinen zu vergleichen, und der Anwender hätte basierend auf kommerzieller oder auf Public-Domain-Software eine größere Auswahlmöglichkeit in Bezug auf das Analyseverfahren.

Ideal wäre natürlich, wenn die Hersteller Daten in einem Standardformat darstellen würden, doch ohne eine gewisse Richtungsvorgabe seitens ihrer Kunden (der Mikroanalyse-Gemeinschaft) ist eine Einigung auf ein Format eher unwahrscheinlich. Daher ist es in hohem Maße wünschenswert, dass EMSA und MAS mit der Verabschiedung eines Standardformats voranschreiten. Ein derartiges Format schließt nicht aus, dass

Forschungsgruppen oder Hersteller ihre eigenen, möglicherweise proprietären Formate anwenden. Intern können Spektrendaten in jedem beliebigen Format gespeichert werden, solange die Möglichkeit besteht, dieses Format zwecks Austausches in den externen Standard umzuwandeln (und umgekehrt). Ein Standardformat sollte die folgenden Merkmale aufweisen:

- a) Es sollte die Daten exakt (ohne Veränderung des wissenschaftlichen Inhalts) darstellen können.
- b) Das Format sollte einfach und leicht zu verwenden sein.
- c) Es darf NICHT an einen bestimmten Computer, eine bestimmte Programmiersprache oder ein bestimmtes Betriebssystem gebunden sein. Es sollte auf einer großen Anzahl von Computern jeglicher Größe funktionieren, wobei nicht garantiert werden kann, dass es auf sämtlichen möglichen Computern funktionieren wird.
- d) Das Format sollte sowohl für den Menschen als auch für Maschinen (Computer) lesbar sein.
- e) Es sollte mit bestehenden elektronischen Kommunikationsnetzen wie zum Beispiel (jedoch nicht notwendigerweise ausschließlich) BITNET, ARPANET und dem Telefonsystem (unter Verwendung von Modems) kompatibel sein. Zukünftige Netzwerke werden wahrscheinlich die Kompatibilität mit diesen Netzen beibehalten.
- f) Das Format sollte Spektren unterstützen, die für die Mikrobereichsanalyse-Gemeinschaft von Interesse sind (zum Beispiel XEDS, EELS, AES usw.) und ausreichend flexibel sein, um zukünftige, noch nicht festgelegte Datensätze integrieren zu können.
- g) Jede Datei sollte ausreichend Informationen enthalten, um Typ und Ursprung der Spektrendaten eindeutig identifizieren zu können und deren Signifikanz zu rekonstruieren.
- h) Falls möglich, sollte das Format mit verschiedenen handelsüblichen Datendarstellungs- oder -analyseprogrammen kompatibel sein (z. B. Tabellenkalkulationsprogramme oder Graphikauswertungspakete).
- i) Das vorgeschlagene Format braucht kein hocheffizienter Speichermechanismus zu sein. Seine vorstehend genannten primären Ziele schließen im Allgemeinen eine hohe Speichereffizienz aus. Dieses Format ist eher darauf ausgerichtet, einfach und benutzerfreundlich zu sein.

Das ursprünglich von der Electron Microscopy and Microanalysis Public Domain Library (EMMPDL) in Argonne [1] angewendete Format besitzt zwar den Vorteil, dass es einfach ist, für eine allgemeine Anwendung ist es jedoch zu unflexibel. In einer kürzlich erfolgten Überarbeitung [5] wurden einige Unzulänglichkeiten behoben, es ist jedoch eine umfassendere Neubearbeitung notwendig. Das von einer früheren EMSA-Task-Force [3], [4] vorgeschlagene Format spricht viele dieser Probleme an, wird jedoch von einigen Mikroskopikern für die alltägliche Anwendung als zu kompliziert angesehen. Das VAMAS-Format, dessen Beschreibung [6] sich auf 60 Seiten beläuft, ist für die in dieser Norm vorgesehenen Zwecke ebenfalls zu komplex. Ein als JCAMP-DX bezeichnetes Format, das von der Infrarotspektroskopie-Gemeinschaft [2] verwendet wird, ist zwar spezifisch und detailliert, jedoch für die Spektroskopien, die in der Mikrobereichsanalyse durchzuführen sind, nicht ganz geeignet.

Das hier vorgeschlagene Format folgt in vielerlei Hinsicht dem JCAMP-DX-Format, ist jedoch weniger kompliziert und umfasst Merkmale, die speziell auf die Röntgen-, Energieverlust- und Auger-Spektroskopie ausgerichtet sind. Verschiedenen Herstellern von XEDS-Systemen wurde eine Vorab-Version dieses Vorschlags vorgelegt, und es sind Kommentare und Anregungen eingegangen, von denen viele in das vorliegende Dokument eingearbeitet wurden.

Das damit einhergehende Problem eines Standardformats für die Speicherung digitaler Bilder ist ähnlich gelagert wie das Problem der Speicherung von Spektrendaten, wobei jedoch ausreichend Unterschiede bestehen, um einen eigenen Standard zu rechtfertigen. Während die meisten Spektren kompakt genug sind, um in einer für den Menschen lesbaren Form gespeichert zu werden, sind Bilddaten normalerweise so groß, dass sie als „rohe“ Binärzahlen gespeichert werden müssen. Es gibt Formate für die Bildspeicherung, die weit verbreitet sind. EMSA und MAS sollten sich für eines dieser Formate (wahrscheinlich TIFF) entscheiden, was der Mikroanalyse-Gemeinschaft erlauben würde, die große Zahl der bereits verfügbaren kommerziellen Software und Public-Domain-Software zu nutzen.