

Ajuda para o programa CvData de conversão de formatos de dados de diferentes técnicas analíticas

(última versão: v.11.0.0, 15.Abr.2019)

Como usar?

Tipos de ficheiros, Ficheiros especiais (dependente da versão), Pré-definições

Acesso em rede

Seleccção cruzada

Botões importantes: Add/Remove Go End

Histórico das versões recentes – SQUID (só v.2.4.3/2004)

Direito de propriedade/alienação de responsabilidades

Como usar?

Para converter com sucesso dados, da forma de espectros (binário ou ASCII), para a forma de tabela a 2 colunas aceite pelo Origin, siga as etapas seguintes:

1 - Escolha a unidade e pasta em que se encontram os ficheiros a converter, usando as caixas de selecção adequadas.

2 - Verifique se um dos tipos ou extensões apresentadas por omissão na caixa de texto "File types" está correcta:

.cnf, .mca	- ficheiros de dados em binário, estruturados em blocos, com cabeçalho (CANBERRA/Genie2K, MCA, S100, 35/40)
.mpa, .mp	- ficheiros estruturados em blocos, com cabeçalho ASCII (FAST Comtec/MPA), sub-formatos ASC, SPE, EMSA/MAS, DAT (binário) (v.8.7.x)
.chn	- ficheiros de dados em binário, estruturados em blocos, com cabeçalho (ORTEC/Maestro)
.raw	- ficheiros de dados em binário, estruturados em blocos, com cabeçalho (Bruker/AXS, D8)
.bin, .spu, .evt	- ficheiros de dados em binário
.spx, .spe	- ficheiros de dados ASCII estruturados em blocos, com cabeçalho SPX: ficheiros XML (Brüker/AXS); SPE: ficheiros AIEA
.dat	- ficheiros de dados ASCII sem cabeçalho de qualquer tipo
.asc	- ficheiros de dados ASCII convertidos da AccuSpec/A (com LOTCNV)
.rbs, .sim	- ficheiros de dados ASCII convertidos do RUMP (com comando WRASCII)
.spa, .spc	- ficheiros de dados em binário, estruturados em blocos, com cabeçalho (Thermo-Scientific/Nicolet/OMNIC, Nicolet/Varian 5000)
.jdx, .gaml	- ficheiros de dados ASCII em blocos sinalizados, formatos JCAMP-DX (IUPAC) v.4.24, ou XM (com dados 32 bit-IEEE754:1985 cod. base64)
.dcm/DICOM	- ficheiros de dados em binário (DICOM/NEMA, somente standard “ <i>explicit VR, little endian</i> ”)

3 - a) Se estiver correcta seleccione, na caixa de selecção "Files", os ficheiros que pretende converter, usando o dispositivo apontador (rato ou outro).

b) Se não estiver apresentada a extensão pretendida, escolha a opção pretendida da lista que se expande (apenas versões 8.x) ou escreva directamente a extensão correcta no campo referido (todas as versões), e, em seguida, proceda como em 2.a).

4 - Actue o botão "Add" para adicionar os ficheiros seleccionados à caixa de texto à direita.

5 - Se verificar que existe(m) algum(ns) ficheiro(s) que foi(foram) indevidamente seleccionado(s), marque-o(s), nessa caixa de texto, e actue o botão "Remove:" para remover.

6 - Actue o botão "Go" para converter os ficheiros seleccionados.

7 - Se pretender converter mais ficheiros repita as etapas 1-6.

8 - Se pretender converter para formatos SPE (GUPIX/AIEA) ou SPO (GupixWin) seleccione a opção correspondente (as opções “-dat” ou “-odat” na janela de extensões não são permitidas a partir da v.8.6.8).

Se terminou, actue o botão "End".

[Topo](#)

Tipos de Ficheiros

a) **ficheiros objecto** - os ficheiros a converter

Ficheiros normais

Quaisquer ficheiros de dados, escritos em código ASCII, na forma de qualquer sequência de canais ou em matriz de n linhas por m colunas, sem cabeçalhos, com qualquer extensão, excepto uma das indicadas abaixo sob a designação de extensões reservadas.

Nota: a utilização de um ficheiro normal com a indicação de uma extensão reservada tem por consequência a truncatura do ficheiro. A utilização de um ficheiro binário com a indicação de uma extensão não associada a esse tipo de registo não é compatível com o modo de funcionamento deste programa.

Ficheiros especiais

Ficheiros de dados com as extensões reservadas:

- cnf** - binários criados pelo Genie2K, formato proprietário CANBERRA, com placas ADC/MCA AccuSpec/A, S100, PCA-III...
- chn** - binários criados pelo ORTEC/Maestro;
- mpa** - estruturados em blocos, criados por *software* da FAST Comtec com cabeçalho ASCII, e sub-formatos ASC, SPE, EMSA/MAS ou DAT/binário (só v.8.7.x);
- raw** - binários criados pelo DIFFRAC, formato proprietário Brüker/AXS, com difractómetro D8-Discovery
 - v.1.01 (espectro único), v.4.00, variantes: GenericXRD (espectro único); HRXRD (espectro único; múltiplos espectros formados por rotina “loop”);
- spx** - ASCII estruturado em blocos, formato XML, criados por *software* da Brüker/AXS, ArTAX...
 - os ficheiros convertidos a partir deste formato podem ser ODF e SPE ou SPO (em vez de DAT como nos restantes formatos);
 - só os ficheiros SPE contêm a informação necessária para funcionar com o WinAXIL (para WinFUND);
 - os ficheiros SPO são semelhantes aos DAT com uma linha de cabeçalho adequado para uso com GupixWin;
- bin** - binários criados pelo MCA, formato proprietário CANBERRA, com placas ADC/MCA AccuSpec/A,(com MOVE DATA)...
- mca** - binários criados por *software* MS-DOS/Win95 do sistema S100, formato proprietário CANBERRA (versões 8.x);
 - binários criados e exportados directamente pelos MCAs CANBERRA das famílias 35/40/80 (versões 8.x);
- spu** - binários criados pelos módulos com ADC/MCA Spectrum Techniques, formato proprietário SpecTech;
- evt** - binários criados pelos software OMDAQ/Oxford Microbeam;
- dxp** - binários criados pelo DSP Titan agregado ao detector de raios-X de Si(Li) e2v/Gresham Sirius (versões 8.x);
- spe** - ASCII estruturado em blocos, nativo QXAS, GANAAS e GUPIX/AXIL/WinAXIL; formato de exportação do *software* ArTAX;
- asc** - ASCII convertido a partir de binário MCA (CANBERRA), pelo módulo LOTCNV;
- rbs** - ASCII criados no programa RUMP, pelo comando WRASCII *name.rbs*;
- sim** - ASCII criados no programa RUMP, pelo comando WRASCII *name.sim*;
- _** - binários criados pelas várias encarnações OMDAQ/Oxford Instruments, contendo informação espectral (para extracção e manipulação de mapas e LMF ‘List Mode Files’ usar o programa RLModeP).

Estes ficheiros contêm cabeçalhos que são automaticamente extraídos.

Notas: estas extensões dão indicação ao programa sobre a conversão adequada a executar.

Ficheiros especiais (*cont.*)

Ficheiros de dados com as extensões reservadas (*cont.*):

spa - binários em formato proprietário Thermo-Scientific/Nicolet/OMNIC, com espectrómetros Thermo-Scientific/Nicolet is'50, Nicolet/Varian 5000...

spc - binários em formato proprietário Thermo-Scientific/Nicolet/OMNIC, com espectrómetros Thermo-Scientific/Nicolet is'50, Nicolet/Varian 5000...

Nota: a extracção de dados – conversão para ASCII – destes SPA e SPC funciona apenas para ficheiros com um único espectro e valores de X regularmente espaçados (*single measurement, evenly spaced X-values*).

jdx - ASCII em formato JCAMP-DX (IUPAC) v.4.24 (não disponível na versão actual, em revisão e actualização para v.6+) ...

gaml - estrutura ASCII em blocos, formato XML, com bloco simples de dados binários (em geral reais 32-bits) codificados em base64...

dcm - binários em formato DICOM criados por diferentes equipamentos médicos (formato NEMA standard “*explicit VR, little endian*”)

Nota: a opção DICOM(NEMA) admite também ficheiros sem extensão.

Estes ficheiros contêm cabeçalhos que são automaticamente extraídos.

Notas: estas extensões dão indicação ao programa sobre a conversão adequada a executar.

b) ficheiros imagem - os ficheiros convertidos, escritos na forma de matriz de *nm* linhas por 2 colunas, sem cabeçalho. A primeira coluna contém o número de canal (ou abcissa) e a segunda contém o conteúdo do canal (ou ordenada). Um ficheiro imagem tem o mesmo nome que o ficheiros objecto correspondente e a extensão ".odf".

Pré-definições

a) ficheiros objecto

Estão pré-definidas as extensões referidas acima, e que constam da lista expansível (nas versões 8.x). Estas podem ser ultrapassadas escrevendo as extensões desejadas no campo correspondente. Deve ter-se em atenção que o programa só converte ficheiros com as extensões indicadas e formatos correspondentes.

ATENÇÃO - VERSÃO 2.4.3 (SQUIDable):

Tratando-se de ficheiros de dados ASCII provenientes do SQUID do LCMBT (FC-UL), com extensão "dat" a caixa de selecção SQUID deve estar previamente marcada (sem o que a conversão não será correcta).

Logo que se recomece a utilização de outro tipo de ficheiros de dados esta caixa deverá ser desmarcada para assegurar a correcção das conversões.

b) ficheiros imagem

Estão pré-definidas as extensões "*odf*" e "*dat*". A pré-definição "*odf*" não pode ser ultrapassada ou alterada. A pré-definição "*dat*" pode ser substituída por outras, "*spe*" ou "*spo*" (mas não ambas simultaneamente). Para certas extensões objecto seleccionadas – "*spx*" e OMDAQ – a pré-selecção "*spe*" é proposta em substituição de "*dat*".

Acesso em rede

O acesso em rede só pode ser efectuado através de "**drives**" com a **ligação lógica previamente estabelecida**. Para estabelecer uma ligação lógica utilize a opção **Map Network Drive**.

Seleccção cruzada

É possível efectuar a adição à lista de conversão (**Add**), de ficheiros escolhidos de mais do que uma pasta, para uma só sessão de conversão (**Go**).

Comandos importantes

- | | |
|---------------|---|
| Add | - adiciona à lista de conversão ficheiros seleccionados na caixa de ficheiros |
| Remove | - remove da lista de conversão os ficheiros seleccionados na caixa respectiva |
| Go | - lança o processo de conversão dos ficheiros seleccionados |
| End | - termina o programa. |
| Help | - este texto de ajuda. |
| About | - indicação da versão em uso. |

Nota: a maioria dos formatos usados são proprietários e não são universalmente aceites como formatos padrão para a troca de dados, nem sempre obedecendo a normas acordadas entre as diferentes partes.

O formato EMSA/MAS usado aqui está contido na formatação geral recomendada pela norma ISO 22029:2012 (Microbeam analysis - EMSA/MAS standard file format for spectral-data exchange).

O formato DICOM/NEMA usado aqui está contido na formatação geral recomendada pela norma ISO 12052:2006 (Health informatics - Digital imaging and communication in medicine (DICOM) including workflow and data management).

Histórico das versões recentes estáveis:

- v.11.0.0, 15.Abr.2019 – revista e ampliada a capacidade de descodificação dos formatos SPC para espectros simples XY.
- v.10.9.2, 23.Fev.2019 – revista e reposta a conversão de ficheiros ASCII .JDX/.DX de espectro único (X+(Y...Y)) em formatos IUPAC/JCAMP-DX (4.24/5): formatos AFFN e ASDF; eliminação de inconsistências na representação de decimais: adoção de ‘.’ como separador decimal, universal e independente dos ‘locale’ (definições regionais);
- v.10.8.6, 27.Out.2018 – introdução da capacidade de descodificação dos formatos RAW [‘null version’], RAW 4.00/v.2.8 e RAW 4.00/Rigaku;
- v.10.8.1, 15.Out.2018 – revisão geral da retroconversão .ODF → .DAT: nova rotina com revisão da escrita de formatos .SPE (IAEA) e .SPO (GUPIX);
- v.10.7.5, 03.Ago.2018 – adicionados novos formatos: Shimadzu .SPC, .PHO, and Philips/PanAnalytical .RD (.RD e .PHO também em VBA/Excel ‘ST10x_ng’);
- v.9.4.3, 05.Jun.2018 – alterada a opção inicial: conversão sem apresentação gráfica (N.C.);
- v.9.4.2, 08.Nov.2017 – corrigido erro e estendida a possibilidade de escrita de ficheiros ASCII em formato (tabela com cabeçalho) IAEA/SPE e GUPIX a partir de ficheiros “dat” (ASCII tabela simples);

suprimida temporariamente a possibilidade de conversão de ficheiros em formatos IUPAC/JCAMP-DX por limitação a formatos ASCII mais simples (AFFN separados por espaços), ignorando as restantes variantes AFFN e ASDF;
- v.9.4.1, 22.Out.2017 – corrigidos erros de definição de formatos binários OMDAQ-2007 (header versions 5-8, 11); adicionada a capacidade de descodificar os novos formatos binários OM-3 (header versions 12 e 13), introduzidos em 2016;
- v.9.3.17, 08.Out.2017 – eliminados erros de adequação de extensões (extensões não legais) e formatos não conformes (tipos forçados, e.g. OMDAQ + .###)
- v.9.2.15, 15.Abr.2016 – eliminados erros de representação gráfica de não inteiros por substituição de ‘print’ por ‘write’;
- v.9.2.12, 07.Abr.2016 – aperfeiçoado e alargado o funcionamento de extracção de informação não gráfica de ficheiros DICOM padrão;
- v.9.2.11, 27.Mar.2016 – introduzida a possibilidade de extrair a informação não gráfica de ficheiros DICOM, em particular a relativa a RDSR;
- v.9.1.10, 22.Fev.2016 – corrigido o desempenho de visualização gráfica dos espectros convertidos com inclusão de escala própria para cada espectro;
- v.9.0.8, 10.Dez.2015 – corrigido e ampliado o desempenho de visualização gráfica dos espectros convertidos;
- v.9.0.7, 31.Out.2015 – introduzido a possibilidade de visualização gráfica dos espectros convertidos (com opções linear/logarítmico);
- v.8.9.7, 27.Out.2015 – introduzido código para conversão de formatos tipo GAML:
estrutura XML + {IEEE754 32bit float/little endian Intel} base64 encoded data block;
- v.8.9.6, 25.Out.2015 – introduzido código para converter formatos JCAMP-DX (v.4.24, full ASCII);
- v.8.9.5, 23.Mar.2015 – introduzido código para interceptar e informar de erros de criação de ficheiros em pastas bloqueadas por permissões específicas;
- v.8.9.4, 21.Mar.2015 – corrigida uma falha na extracção correcta do tipo (extensão) dos ficheiros – quando os nomes das pastas contêm pontos – que impedia a conversão (por incapacidade de classificação como tipo conhecido). O reconhecimento do separador é agora feito a partir do fim do nome.
Corrigida a estratégia de captura e informação de erros relacionados com manipulação de ficheiros;

- v.8.9.3, 24.Jan.2015 – melhoradas estruturas lógicas do código e desempenho associado;
- v.8.9.2, 17.Dez.2014 – “tool tips” para listas de ficheiros melhoradas (dispensando acção de marcação para actuarem);
- v.8.9.1, 15.Dez.2014 – eliminado painel de aviso esquecido em testes da versão anterior (8.8.3); eliminadas, por funcionamento deficiente, as listas de expansão automática para nomes de ficheiros ou nomes de pastas demasiado extensos, tentativamente introduzidas na versão anterior (8.8.3): substituídas pela utilização das “tool tips” para essas situações. Adicionada a selecção automática de ficheiros – adição à lista de ficheiros seleccionados – por meio de dupla acção (“double click”);
- v.8.8.2, 04.Out.2014 – adicionada a possibilidade de retro-conversão para o formato espectral DXP a partir de formatos ODF;
- v.8.8.1, 23.Set.2014 – na conversão de/retro-conversão para o formato espectral OMDAQ: introduzida a leitura dos ângulos de inclinação no plano (IBM) e fora do plano (Cornell) detector-feixe; introduzidos, na escrita, os valores (fixos): 15° para o ângulo detector-feixe, e 0° para os restantes;
- v.8.8.0, 21.Set.2014 – introduzida retro-conversão para formato espectral OMDAQ (a partir de ASCII, formato ODF/Origin);
 - detectado e eliminado um erro nas v. anteriores: a formatação SPO “perdia” os 64 canais iniciais;
- v.8.7.8, 12.Set.2014 – introduzida a conversão de formatos binários SPA/SPC (Thermo-Scientific/Nicolet/OMNIC);
 - introduzida a conversão de formatos binários “TA Instruments” criados em RMX/86 (nota: não acede directamente ao sistema de ficheiros);
- v.8.7.7, 27.Jul.2014 – introduzidos menus *drop-down* com identificação das extensões-tipo, melhorada a estética;
- v.8.7.5, 03.Jul.2014 – introduzida conversão de formatos binários MPA (FAST Comtec) c/cabeçalho ASCII, e sub-formatos ASC, SPE, EMSA/MAS, DAT/binário;
- v.8.7.2, 12.Mar.2014 – melhorada a conversão de formatos binários RAW (DIFFRAC, Brüker/AXS);
- v.8.6.8, 05.Fev.2014 – introduzida retro-conversão para formatos espectrais SPE (GUPIX/AIEA) e SPO (GupixWin);
- v.8.X, X < 6.8, 2013 – introduzida a capacidade de leitura de ficheiros da microsonda, em formato binário nativo (OMDAQ, espectros com compressão);
- v.7.2.1, 12.Dez.2007 – introduzida a capacidade de lidar com ficheiros de dados produzidos pelo SQUID da Quantum Instruments (posteriormente eliminada das versões seguintes). A versão 7.2.1. é única;
- v.1.2.0, 30.Mai.1998 – criada para conversão de formatos binários CNF.

Direito de propriedade/alienação de responsabilidades (Copyright/disclaimer)

- a) O programa é da autoria de Rui M.C. da Silva, IST/ITN (1998-2016), pertencendo-lhe o exclusivo direito de o modificar, alienar o código, e outros.
- b) O autor declina qualquer responsabilidade pelo uso do programa para fins que não aqueles para que foi expressamente criado. Mais declina qualquer responsabilidade quanto à adequação dos resultados produzidos sendo da exclusiva responsabilidade do utilizador a verificação da referida adequação.
- c) O programa pode ser livremente copiado ou distribuído desde que seja respeitada a condição de não serem alteradas de qualquer forma as notas e menções de copyright.