

DEM_cor2.f90のマニュアル

鈴木賢治*

2023/12/25

大型放射光施設 SPring-8 の BL16XU において、二次元検出器 CdTe PILATUS-300K にて二重露光法 (DEM) で測定した回折像のデータ処理には膨大な労力を要する。それを効率よく処理するためのツール DEM_cor2.f90 を開発した¹。その使用法について以下記述する。そのための要件は、利用するコンピュータに

- 画像処理アプリケーション ImageJ (Fiji)
- gfortran コンパイラー
- gnuplot

がインストールされ、使用者が利用できることである。また、これらのツールを利用して以下のプログラムを使用する。

- copy_paste.ijm : ImageJ マクロであり、前処理に使う。
- DEM_cor.f90 : 相互相関関数によるピーク決定のソースプログラム
- cc_fit.bat² : 計算結果を示す gnuplot を起動するための実行型プログラム (DEM_cor.f90 から呼び出す)

なお、OS によってはコマンドが異なる場合もあるので、各自の OS に合わせて変更すること。

1 前処理

前処理の具体的な流れを図 1 に示す。

CdTe PILATUS-300K で保存される一連のファイル群を処理するまえに、**copy_paste.ijm** は、

1. 欠陥画素 (233,299) の補正
2. (x,y)=(0,213) を起点に、幅 487×高さ 195 の目的のエリア (roi) を取り出す。

の前処理を行う。

1. ImageJ の Plugins > Macros > Install で copy_paste.ijm を読み込んでおく。
2. PILATUS の測定ファイル群を P1 と P2 フォルダーにまとめて入れておく。二重露光法では P1 と P2 が対を成すので、各測定点のデータ番号は P1 と P2 で必ず一致していなければならない。また、ファイル名の末尾が 0000i.tif の形を想定しているので、その形式に合わせるか、自分の形式に合わせてマクロを変更すること。

*新潟大学フェロー、電力中央研究所 EX 研究本部 客員研究員

¹DEM_cor2.f90 では、旧バージョンの DEM_cor.f90 のバグを修正し、ファイル番号が大きくてもエラーを起こさないようにしました。

²以下の gnuplot コマンドを記述しているだけの実行型ファイルである。
gnuplot -e "load 'ccc.plt'"

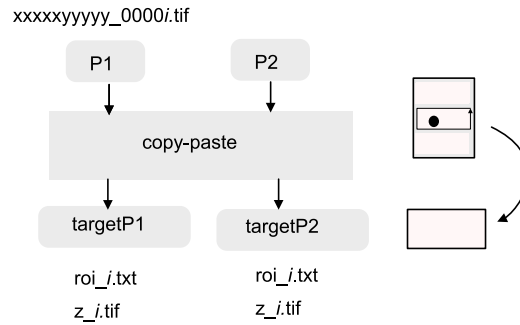


図 1: 前処理の流れ.

3. 処理するファイルのフォルダを指定
4. 処理する先頭のファイルを指定 (拡張子を含めファイル名全部を入力), マクロが開始番号を読み取る.
5. 終了するファイルの番号を入力
6. "target"フォルダが作成され, そこに前処理した一連のファイルが保存される.
7. "target"フォルダ内の `roi.i.txt` は `DEM.cor.f90` で使用するテキストイメージ画像, `z.i.tif` は取り出した `roi.i.txt` の tif ファイルであり, ImageJ の Image sequence で動画にして確認するとよい.
8. "target"フォルダができれば上書きを防ぐために, "targetP1"のフォルダ名に速やかに変更する. 後で利用する `DEM.cor.f90` では, "targetP1", "targetP2"フォルダ名を使う.

2 相互相関関数法による回折角度決定

DEM用の大量の P1 と P2 の回折像の対を相互相関関数法により一気に処理して, 回折角度 2θ を得るプログラムが `DEM.cor2.f90` である. このプログラムを開始番号と終了番号を同一にすれば, 1つの測定点だけを処理できるので, 処理条件の修正・確認に利用できる. 積分領域, 検出器の L_0, L などの修正もこれを使い確認することもできる.

図 2 に `DEM.cor.f90` のフローチャートを示す. 以下, その説明を以下に記す.

1. コンパイル前に実験・処理条件変数の入力しておく.
`m=0:486; n=0:194` !ImageJ マクロ `copy_paste.ijm` で取り出した画像寸法
`L0=435.0; L=503.0` ! L_0, L を P1 と P2 で積分領域が一致するように決定する.
`tth=8.8` !回折計 2θ
`x0=234.99; y0=91.24; x02=234.61; y02=88.79` !P1 および P2 のビームセンター座標
`r1s=67.0; r1e=70.9` ! SUS316 の 311 回折環の回折半径 r_1 (波形 w_1) の範囲
`bp=10.d0` ! $\phi = \pm \phi$ 周積分範囲 $\pm \phi, \text{deg}$
2. `DEM.cor.f90` の下にフォルダ `targetP1, targetP2` があり, 各フォルダーに `roi.i.txt` のセットが用意されていることを確認.
3. `gfortran DEM.cor2.f90` でコンパイル. 実行ファイル `a.out` が生成される.
4. `./a.out` を実行

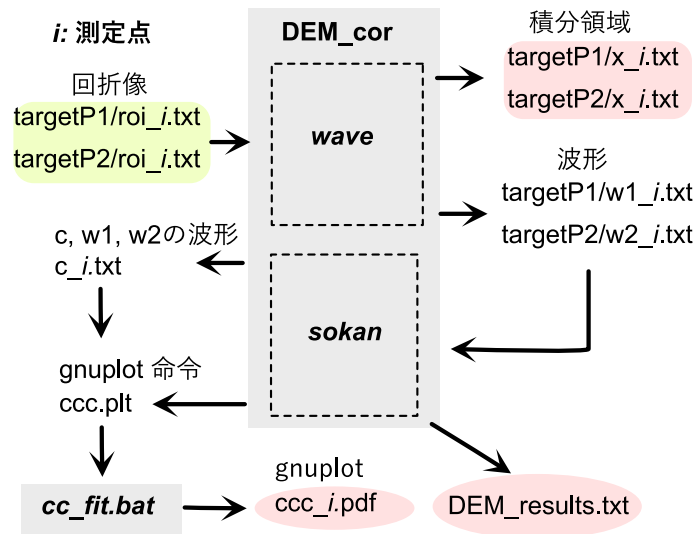


図 2: 二重露光法の回折半径を相互相関により求める DEM_cor2 のフローチャート。

5. 「DEM_cor2.f90 と同じフォルダに cc_fit.bat があり、実行型になっていますか?」に対して OK なら 1 を入力
6. 「処理する開始番号を入力してください」 roi_i.txt を確認して、スタート番号を入力
7. 「処理を停止する番号を入力してください」 roi_i.txt を確認して、終了する番号を入力
8. 「gnuplot の画面出力を見たい: 1 or pdf 出力のみ:0」大量の処理をするなら 0 を入力し、後で ImageJ で pdf を見るのがよい。
9. 以後、処理が進むので監視する。
10. 完了したら ImageJ の Image sequence (IS) で ccc.ipdf のファイル群を読み取り、波形処理の確認をする。
11. 同時に z_i 群も IS で読み込み、エラーが起きた波形の画像を確認する。
12. 出力ファイル DEM_results.txt には、以下の順番でデータが並んでいる。
連番, 2θ , deg, r mm, 相互相関, r_1 mm, r_2
13. DEM_results.txt に NA の記されている行もいくつかある。それらは、回折が取れていないケースである。