

DCT (SP8) manual

2025.01.21 上梶真之

1. インストール

A. MatLabo

必要な物

- ・ 本体
- ・ toolbox (optimization toolbox, image processing toolbox)
- ・ コンパイラ

インストール

```
./install      ** 注意、途中で出てくるログイン名を、ubuntuのuseridと同じにすること  
sudo ln -s インストールディレクトリ /sware/com/matlab_R2024a
```

B. その他

- ・ python2.7 + Anaconda *****

インストール後、condaの設定

```
conda create -n py27 python=2.7 anaconda
```

***以降は、py27環境で構築<=そうしないと、pyQtがなんかうまくいかない

- ・ mysql *****

(i) 必要な物のインストール

```
sudo apt-get install mysql-server  
sudo apt-get install mysql-client  
sudo systemctl start mysql  
sudo systemctl enable mysql  
sudo apt-get install libmysqlclient-dev
```

(ii) 設定

```
sudo mysql  
ALTER USER 'root'@'localhost' IDENTIFIED BY 'bl20xumed';  
exit  
mysql -u root -p  
CREATE USER gtadmin@localhost IDENTIFIED BY 'gtadmin';  
CREATE DATABASE graintracking;  
grant ALL on graintracking.* to 'gtadmin'@'localhost';  
exit  
sudo chmod 755 /var/run/mysqld
```

- ・ astra tool box *****

必要な物のインストール

autoconf

```
sudo apt-get install autoconf
```

libtool

```
sudo apt-get install libtool
```

boost

```
www.boost.org
```

```
tar xvzf boost_*.tar.gz
```

```
cd boost_*
```

```
./bootstrap.sh
```

```
sudo ./b2 install
```

numpy <= conda環境だと既にインストールされてる。

```
sudo apt-get install python-numpy
```

本体のインストール

```
cd astra-toolbox-??/build/linux
```

```
./autgen.sh
```

```
./configure --with-cuda=/usr/local/cuda/ --with-matlab=/sware/com/
```

```
matlab_R2024a/ --prefix=/usr/local/astra
```

```
make
```

```
sudo make install
```

```
sudo cp -r ./linux/build/.libs /usr/local/astra/
```

```
sudo cp -r ./matlab/mex /usr/local/astra/
```

```
conda install -c astra-toolbox astra-toolbox <= 多分要らない
```

** etc *****

```
sudo apt-get install valgrind
```

```
sudo apt-get install libtool
```

```
sudo add-apt-repository -y pppa:ubuntu-toolchain-r/test
```

```
sudo apt-get install -y g++-11
```

以上で動くはず

2. 実験

1. DCT撮影

試料のDCTデータを撮影する（CTデータと同じフローでデータを取得する）。

○一般的なパラメータ

カメラ長：8-10mm程度（30keV-37.7keV）

ピクセルサイズ：3 μ m（2048x2048 pixels）

投影数：3600（半回転1800）

試料サイズ：1mm以下

露光時間：50ms前後

結晶粒径：20 μ m-100 μ m

結晶数：100-200

2. CT撮影

必要であれば、ビームストップを外した状態でCTデータを取得する。この場合、ギャップを変更して光量を落とす必要がある。将来的にはDCTと同時に取得出来るはず。

3. 再構成

取得したCTデータを1スライス再構成する。

※このとき、回転中心を記録すること。後で使う

3. 再構成

必要な物

- ・ **結晶格子情報** (空間群、格子パラメータ(a,b,c, α , β , γ))
- ・ **回折ピーク位置のd-spacing**情報が入ったcsvファイル (※注意！絶対にピークが8本以上必要なので、無い場合は適当なデータを入れてでも8本以上にすること。)

※注意

途中でプログラムが何らかの理由で終了した場合、(dct-convが終わった後matlabが立ち上がった後でmatlabが落ちた場合)、dct-convの代わりに、**dct launch (enter)**と入力する事で、続きを実施する事が出来る。

1. Windows PCで、VcXsrvを立ち上げる。ログインコントロールを無効にするのを忘れないようにする (通常は立ち上げ済)。

2. Teratermを立ち上げ、poolサーバーにログインする。データを保存したディレクトリに移動する

```
cd /pool/2024*****/data1
```

3. python 2.7環境を立ち上げる。

```
conda activate py27 (enter)
```

※これを忘れると、再構成中にエラーが出る

4. データを.img ファイルから、.edfファイルに変換する (5-10min)

```
dct-conv (enter)
```

終了後、matlabが立ち上がる。

5. matlab起動時に、下記のように何をやるかのリストが表示される

Command flow:

```
dct_start [gtSetup, gtPreprocessing, gtSegmentationGUI]
```

```
gtSegmentationGUI
```

```
dct_analysis [gtSetupIndexing, gtSetupForwardSimulation, gtSetupReconstruction]
```

```
GtGrainsManager
```

基本的には、このコマンドをコピペしながら実行すれば良い

6. dct_start : 画像の下準備

```
dct_start (enter)
```

このプログラムでは、

```
gtSetup
```

```
gtPreprocessing
```

```
gtSegmentationGUI
```

を連続して実行する。実行中、基本は自動で進むが、下記の様にいくつか作業が必要になる。

gtSetup中の作業

6-1. パラメータファイルの選択

dct_start (gtSetup) 起動時に、parameters.matファイルを選択する。なければ、
/home/bl20xu/prg/dct
の中にあるファイルを選択する。

6-2. パラメータ入力

その後、ディレクトリの入力を促される

Please specify the directory name for processing of the new dataset : [パス] >>
なにも入力せずにenterでよい。

すると下記のような画面が立ち上がる

Figure 1: gtModifyStructure Version 003@pool2

Edit the values, click "OK" when you are happy

Check carefully that the following are correct:

collection_dir	/ssd1/masayuki/DCT/230418017/L1_230418017	char	Collection directory
name	L1_230418017	char	Name of the dataset
dir	/ssd1/masayuki/DCT/230418017/L1_230418017	char	Directory in which to analyse the data
xdet	2048	double	Detector ROI size X or U (raw image size in pixels)
ydet	2048	double	Detector ROI size Y or V (raw image size in pixels)
nproj	1800	double	Number of images in *180 DEGREES* of scan
refon	3600	double	References after how many images
nref	30	double	How many reference images in a group
ndark	1	double	How many dark images taken
pixelsize	0.0031	double	Detector pixelsize (mm/pixel)
energy	30	double	Beam energy (keV)
dist	8	double	Sample-detector distance (mm) [computed]
sensortype	frelon	char	Camera type ('frelon'/'kodak4mv1'/'marana')
type	360degree	char	DCT scan type ('360degree','180degree', etc)
interlaced_turns	0	double	Interlaced scan? 0 for normal scan, 1 for one extra turn, etc
mono_tune	0	double	Monochromator was tuned after N reference groups, or 0 for not tuned
rotation_axis	vertical	char	Rotation axis orientation ('vertical'/'horizontal')
distortion	none	char	Distortion correction file with path (or 'none')
no_direct_beam	<input type="checkbox"/>	logical	Special scan with no direct beam (taper frelon, offset detector)?
detector_definition	inline	char	Definition of the detector type ('inline'/'vertical')
nof_phases	1	double	Number of phases in sample to be analysed
flip_images	<input type="checkbox"/>	logical	Do you want to flip the images left-right for some reason?
online	<input type="checkbox"/>	logical	Is the analysis online?
scan_type	ftomo	char	Acquisition macro: {'ebs_tomo','fscan_v1','finterlaced'}

Buttons: Clear, Quit, Check, OK

修正点は以下のようなになる。それ以外は変更しない。

xdet, ydet : 画像の各辺のピクセル数を入力

nproj : 投影数を入力 (180度までなので、全投影数の半分)

refon : 何枚後にreference (i0) のデータが現れるか。基本は全投影数で良い

nref : それぞれのreference (i0)の枚数 (一般的にbl20xuでは30)

ndark : すでにconvを行っており、平均化後なので、1枚

pixelsize : ピクセルサイズをmmで入力

energy : 測定エネルギー、37.7keVの場合は変更が必要

dist : カメラ長。後で調整するので、だいたい良い
 distortion : 空白である事が多いので、noneを入力
 scan_type : ftomoとする。

以上で問題なければ、OKボタンを押す。

その後、いくつか選択肢が出る。

Approximate detdiru: : [0 1 0] >>

Approximate detdirv: : [0 0 -1] >>

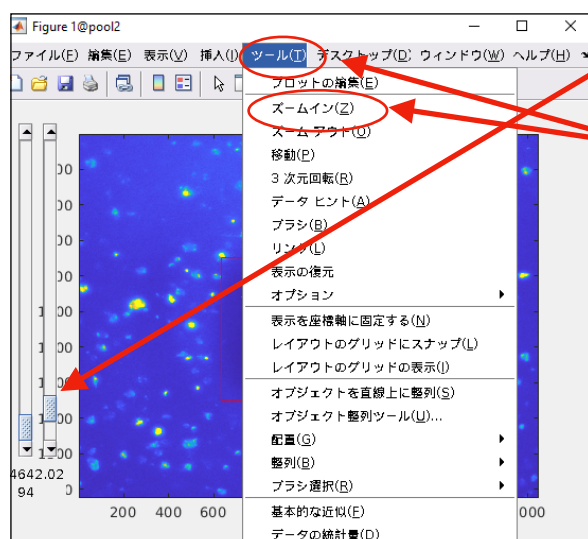
全てそのままenterすれば良い。

6-3. ダイレクトビーム領域の選択

下記のような画面が立ち上がる。

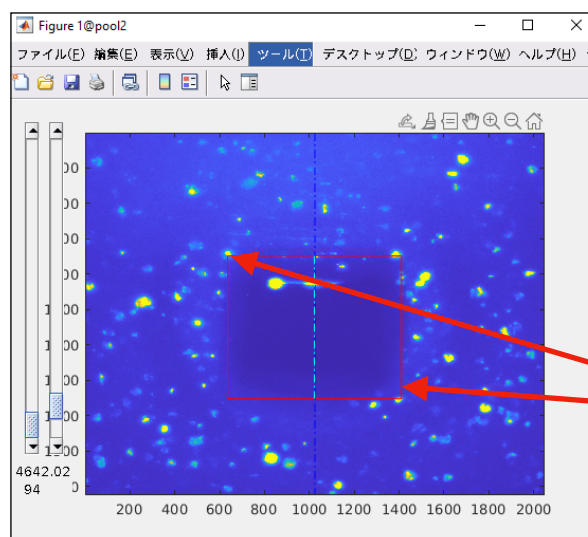
まず、左のスライダーでコントラストを調整し、その後メニューから、Zoomを切る。

zoomを切った後、ビームストップの影の左上と右下を1回ずつクリックすると、その領域が赤い四角で囲われる。暗くなっている部分がダイレクトビームなので、これを選択する



スライダーでコントラストを調整する

メニューからズームインをオフにする



左上と右下を1回ずつクリックして、領域を選択する

この領域で良ければ、Teratermの画面に以下のメッセージが表示されるので
Are you satisfied with this bounding box for the direct beam? [y/n] : [n] >>

この問いに

y [enter]

とすると、入力したボックスの座標が入力され、そのまま表示される（他にもいくつか座標が表示される）。

やり直す場合は、yの代わりに

n [enter]

もしくは何も打たずにエンターとすると、やり直すことが出来る。

その後、ボックスを選択したウィンドウを閉じる。

6-4. 回転中心の入力

CTデータを再構成した時に取得した回転中心の値を入力して、エンターを押す。

Please input rotation axis : : [1024] >>

6-5. 実験情報の入力

下記の様なwindowが表示される。変更する必要は無いので、OKボタンをそのまま押す

Figure 2: gtModifyStructure Version 003@pool2

Edit the values, click "OK" when you are happy

Parameters dealing with arbitrary geometry:

Parameter	Value	Type	Description
beamdir	1 0 0	double	Beam direction in LAB reference (unit row vector)
rotpos	0 0 0	double	Rotation axis position (arbitrary point on axis) in LAB
deflabX	Along the beam direction.	char	Description how Lab X direction was chosen [for records only]
deflabY	Right-handed from Y=cross(Z,X).	char	Description how Lab Y direction was chosen [for records only]
deflabZ	Along rotation axis. Positive away from sample stage.	char	Description how Lab Z direction was chosen [for records only]
labunit	mm	char	LAB units (default is mm) [for records only]
rotdir	0 0 1	double	Rotation axis direction in LAB (unit row vector); omega is right-handed rotation

Buttons: Clear, Quit, Check, OK

6-6. 結晶格子情報の入力

その後、結晶格子情報を入力する。まず、試料内に含まれる鉱物相の数を入力する。通常は1なので、そのままenterでよい

Number of crystallographic phases to be analysed in this sample? : [1] >>

Figure 1: gtModifyStructure Version 003@pool2

Edit the values, click "OK" when you are happy

Manual input of crystallographic parameters for phase 1:

Parameter	Value	Type	Description
name	Al	char	Name of phase to display (e.g. Al, Austenite, Beta_Titanium)
composition	AlZnMg	char	Chemical composition of phase (e.g BaTiO3)
material	het3	char	Distinctive reference name of sample material (e.g ALi_july2010_recrytallized)

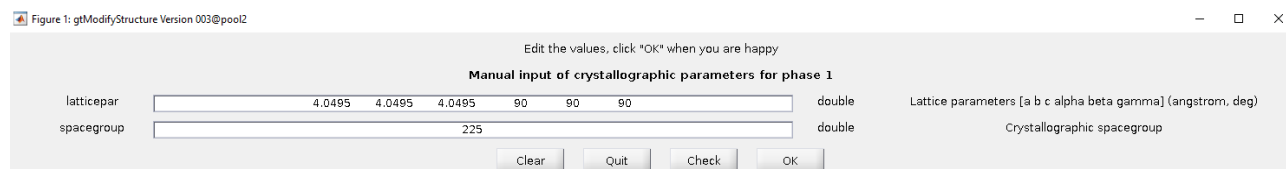
Buttons: Clear, Quit, Check, OK

次に、上記の画面が表示される。これは相の名前などの、DCTデータに対するメタデータを入力するところなので、必要に応じて任意に入力し、OKを押す。

次に、cifファイルを要求される。結晶格子情報をこの後手で入力も出来るが、ファイルを読ませると、それをスキップ出来る。

Do you want to load it from a .cif file? [y/n] : [n] >>

上記で、nでenterを押してcifファイルの入力をスキップした場合、下記の画面が表示される。



ここで、結晶の格子定数と、空間群を入力する。

その後、回折ピークの情報を入力する。

Do you want to load reflection data from .csv or .dat files? (recommended) [y/n] : [n] >>

yを押すと、ファイルを選択するダイアログが表示されるので、csvファイルを選択する。
※csvファイルを入力しないと、プログラムが強制終了する。この場合、dct launchを実行して、再度ここまでの手順を繰り返す。

データを読み込んだ後、下記の選択肢に対して、y (enter)を入力する。入力データのサマリーが表示される。

Do you want to look at the contents of cryst for this phase? [y/n] : [y] >>

Is this phase OK? [y/n] >>y

最後に、下記の選択肢にそのままenterを押すと、ファイルのコピーが始まる（10分以下程度）。

Start moving and correction process now? [y/n] : [y] >>

gtPreprocessing中の作業

6-7. 初期入力

ファイルのコピーが終了すると、自動的にgtPreprocessingが起動する。以下のメッセージが表示される。

Do you want to verify/change the (default) preprocessing parameters? [y/n] : [n] >>

Do you want to redefine the direct beam BoundingBox (currently [583 738 770 910])? [y/n] : [n] >>

Do you want to (re)-calculate the Rotation Axis position (currently 1024.5)? [y/n] : [n] >>

Do you want to (re)-define the Sample BoundingBox (currently [655 697 740 774])? [y/n] : [n] >>

Do you want to (re)-define the Active Area of the detector? [y/n] : [n] >>

Do you want to perform sample drift analysis for this measurement? [y/n] : [n] >>

以上に対して、全てそのままenterでよい。

その後、メディアン画像などの作成が始まる（20分程度）。

画像変換が終了後、gtSegmentationGUIが自動的に立ち上がる

7. gtSegmentationGUI : 回折スポットの抽出

dct_startの終わりに、gtSegmentationGUIが立ち上がる。

手動でやり直した場合は、

gtSegmentationGUI (enter)

で立ち上げる。

立ち上げ後、下記の選択肢が出るが、すべてそのままenterでよい。間で選択を行うウィンドウが表示されるが、OKボタンを押すだけで良い

Do you want to reset all the parameters for segmentation? [y/n] : [n] >>

Recompile functions for OAR? Not normally needed! [y/n] : [n] >>

Check intensities in direct beam ? [y/n] : [n] >>

Drop and recreate fullmedianvals table? [y/n] : [y] >>

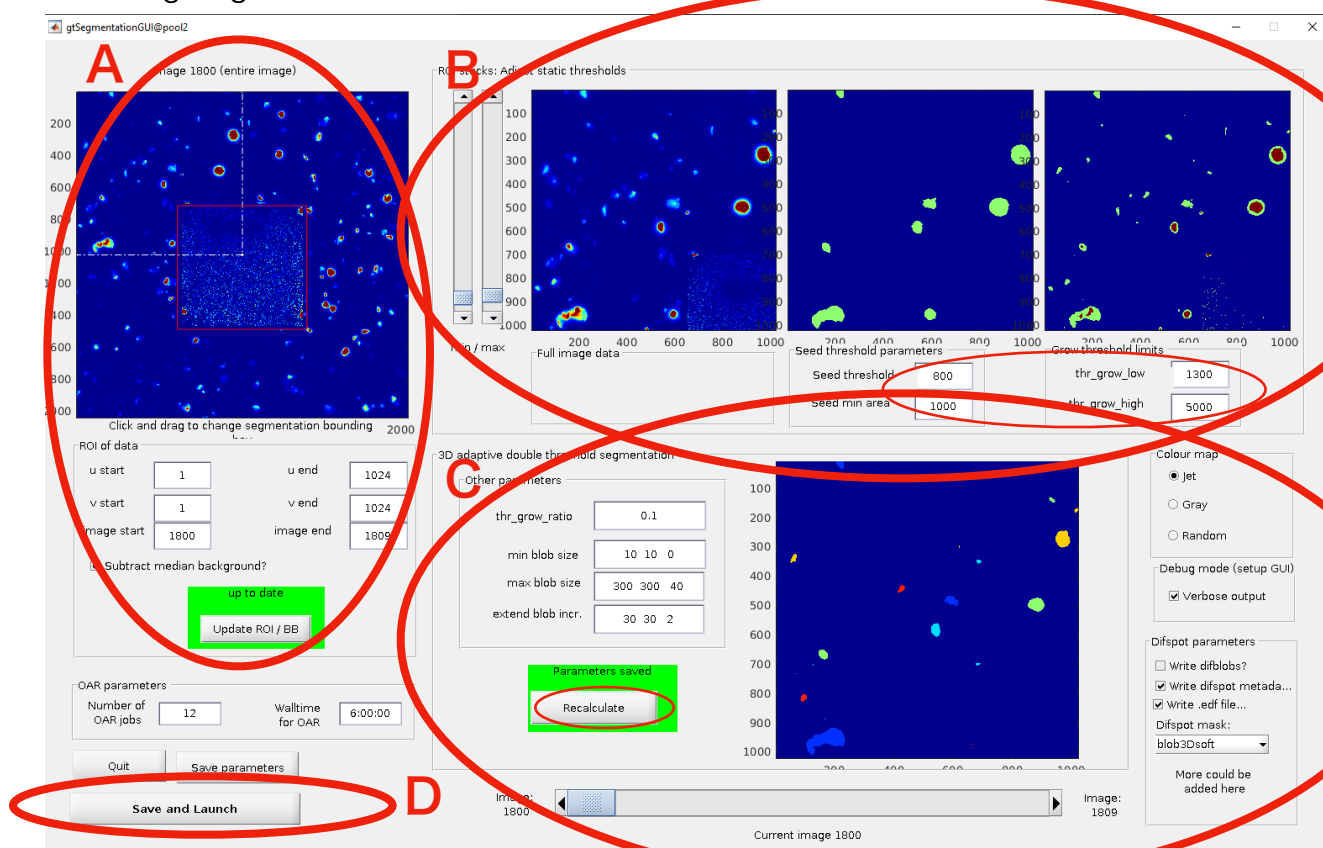
Offset the median value of each full image to 0 (recommended)? [y/n] : [y] >>

やり直した場合、以下の選択肢が出る。これは、yでenterし、元あるデータを全て消すこと。

Drop and recreate difblob tables? [y/n] : [y] >>

Drop and recreate difspot tables? [y/n] : [y] >>

この後、gtSegmentationGUIのUIが下記のように立ち上がる



この画面で、画像のスポットのsegmentationを行う。このSegmentationで、最終的な画像の精度が決まるため、きっちり追い込んでおくことが大事。

画面の構成は、

左上(A) : ある回転角のスポットの全体像と、その一部（白い点線の枠）をこの後の閾値の解析に使うために右上の三つの画像に表示する設定。青い画像中の真ん中の赤い枠は事前に選択したダイレクトビーム領域。青い画像の下は、選んだpositionの情報と、使用する画像番号の範囲。

右上(B) : 閾値の設定のための画像。一番左が、左の画像で選択された生画像。真ん中と右が、下のテキストボックスで設定出来る閾値でsegmentationした画像。

右下(C) : 全ての閾値を適用した場合に得られる回折スポットのクラスター表示。スライドバーは左のカラムで設定した画像番号の範囲で画像を切り替えるための物。

流れは、以下のようになる。

1. 右上の三つの画面で、
seed threshold, (1000)
seed min area, (50)
grow_low, (1500)
grow_high (3000)

の4つのパラメータを決める（括弧内は参考値）。seedは回折スポットのクラスターぐらゐの意味。growは、回折光のテイルに近い強度のピークをどこまで捨るか、という設定。

2. 4つのパラメータが決まった後、さらに、thr_grow_ratioを決める。

3. パラメータが決まったら、Recalculateボタンを押し、画像をアップデートする。上の三つの画像のうち、一番左の生画像と下の画像のクラスターを見比べ、感覚的に正しい回折光が得られているかを判断する。なお画像のカラーがRandomになってしまうため、color mapのラジオボタンをjetにすると良い

回折光のスポットがきちんと決まったら、左下のSave and Launch(D)を押すと、全回折画像に対して、segmentationの計算、及び、得られた回折スポットのデータベースへの格納が始まり、Teratermで進行状況が表示される。スポットの数にも寄るが、20-40分かかる。

8. gtMATCHIGUI : 回折スポットのマッチング

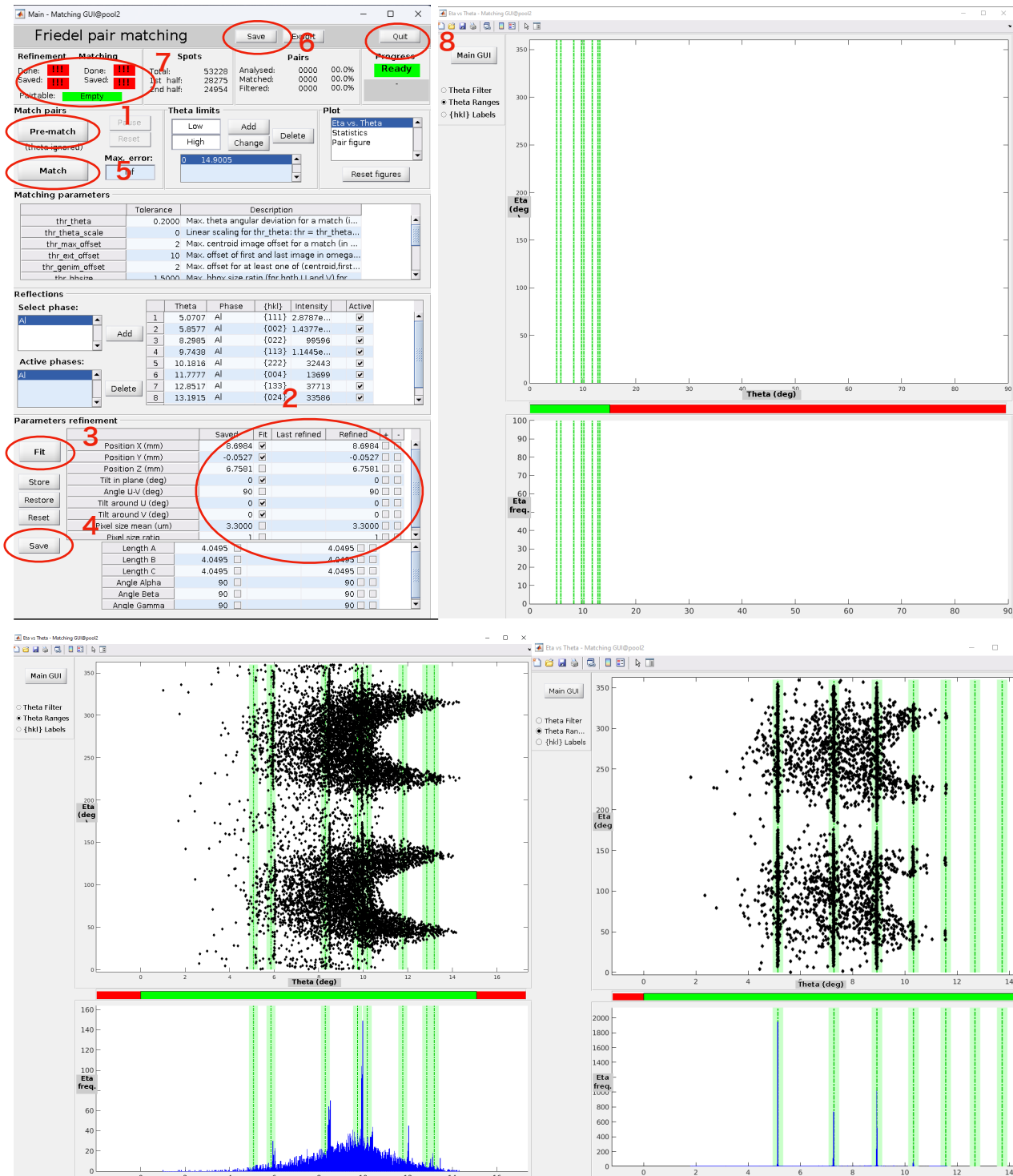
得られた回折スポットを、結晶パラメータに応じてマッチするための、予備作業を行う。このプログラムでは主に、X線回折データと結晶格子情報のマッチングを行い、実験パラメータのファインチューニングを行い、最終的にフリーデルペアのマッチングを行う。本プログラムは自動では立ち上がらないため、segmentation終了後の画面指示に従って下記の通りに入力する。

gtMATCHIGUI (enter)

入力後、図のように2枚のインターフェースが立ち上がる。左がコントローラーで、右側がチューニングの結果を示すウィンドウになる。

作業流れは、以下のようになる。（箇条書きの数字は、画像中の赤文字の数字と対応している）

1. 左のコントローラーで、左上のPre-matchボタンを押す。計算が開始される。計算が終了すると、次の画像のように、右側のウィンドウに結果が表示される。右の図は、横軸が回折角、縦軸が回転角。上の図の黒い点はsegmentationで得られたディフラクションスポットから、ラフにフリーデルペアをマッチングさせた結果で、このペアがどの位置に現れたかを示している。この時点で、プロットが一つも現れなかった場合segmentationがうまくいっていないため、segmentationからやりなおす。



上) コンソールと結果表示の画面の初期画面 (下) 調整前 (左) と調整後(右)の図

この時、緑のラインは、csvファイルで入力した回折角を示しており、そこに回折スポットが現れるはずである。下の図は、縦軸が回転角の代わりにカウントのヒストグラムになっている。

2. 左の画面のコントローラの一番下にある、parameters refinementの値を調整し、黒いスポットの、縦に並んだラインが緑のラインの中心（破線）に乗り、さらにヒストグラムの青いピークの幅が狭くなるように（回転角方向に波打つようにゆがんだスポットをまっすぐにする）調整する。各パラメータの意味は以下のようなになる

Position X: カメラ長。黒いプロットの位置が左右に動く
 Position Y: カメラの横位置。波打っているプロットの縦がまっすぐになる
 Position Z: カメラの縦位置。あまり使わない。
 Tilt around U,V : 波打つ縦のラインがまっすぐになる。まずこれを調整した方がよい
 pixelsize mean: ピクセルサイズ。黒いプロット同士の間隔を調整する。

調整は、数字をダブルクリックして直接入力するか、横の四角いボタンを押して適度に調整することも出来る。

3. 調整出来たら、parameters refinementのFitのカラムのチェックをTilt in Planeを残して全部外す。その後、Fitボタンを押す。これは、自動Fittingを行うボタンだが、こちらが調整した値を変えて欲しくないので、動く可能性の無いパラメータだけFitすることで先に進める

- 4.** Saveボタンを押す（左上の四つのうち、左下が緑になる）
- 5.** Matchボタンを押して、マッチングを行う。（左上の四つのうち、右上が緑になる）
- 6.** Saveボタンを押す。（左上の四つのうち、右下が緑になる）
- 7.** 全ての作業がうまくいくと左上の4つのラベルが緑になり、その下がオレンジ色になる。
- 8.** 右上のQuitボタンで終了する。

9. dct_analysis : 得られたフリーデルペアのindexing、Forward simulation, 再構成

以下のコマンドで、indexing, forward simulation, reconstructionを一気に行う事が出来る。このコマンドにはGUIはない。コマンドラインベースで全ての作業が進む

dct_analysis (enter)

gtSetupIndexing中の作業

9-1. indexing（得られたフリーデルペアのうち、共通の粒子から出る物を抽出する）
 最初に、以下の設問に、全てenterを入力する

Do you want to reset all the parameters for indexing? [y/n] : [n] >>
 Use existing parameters for phase #1 for gtINDEXTER? [y/n] : [y] >>

Start gtINDEXTER now? [y/n] : [y] >>

自動でindexingの計算が始まる。19のステップで結晶粒を見つけ、対応する回折光をマージしていく。ここで結晶粒があまりにも少ない(<20)と、segmentation, Matchingがうまくいっていない可能性がある。この場合segmentationからやり直す。

gtSetupForwardSimulation中の作業

9-2. Forward simulation (抽出された粒子を投影像にもどす)

最初の設問に、全てenterを入力する

以降は自動で進む。ここでエラーが出ることは殆ど無い。

gtSetupReconstruction中の作業

9-2. Reconstruction (得られた投影像から粒子の三次元ボリュームを再構成)

最初の設問に、全てenterを入力する

以降は自動で進む。ここでエラーが出ることは殆ど無い。

終了すると、GtGrainsManagerを起動するダイアログが表示される。

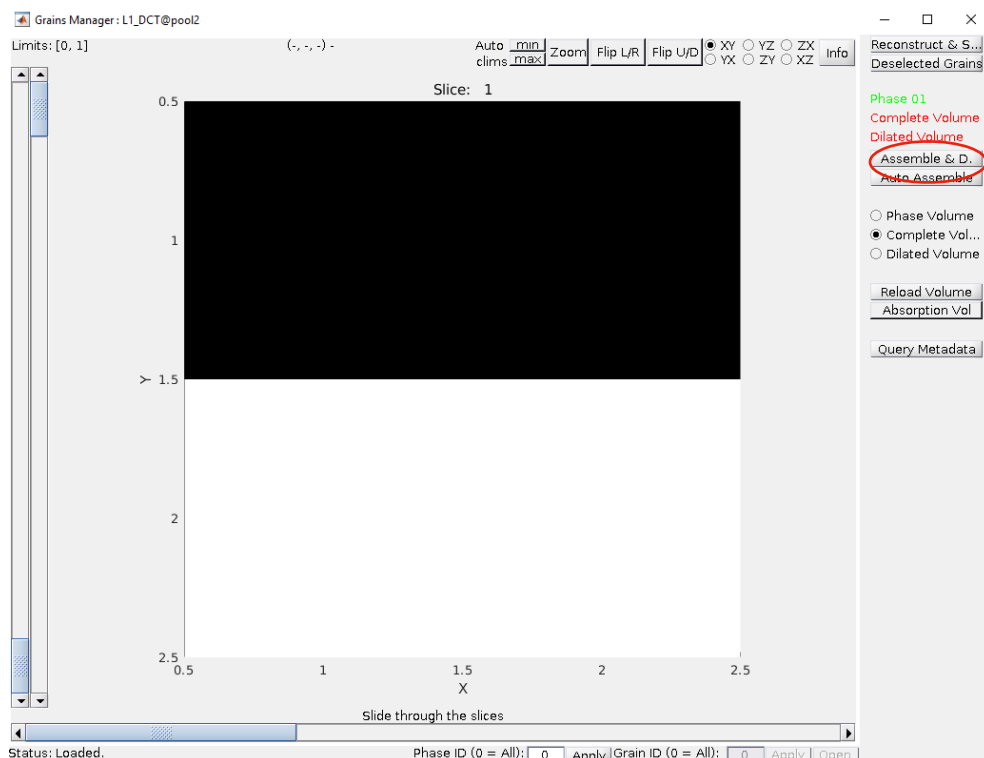
10.GtGrainsManager : 結晶粒データの合成、3D描画、保存

ダイアログに従って、下記のコマンド

GtGrainsManager (enter)

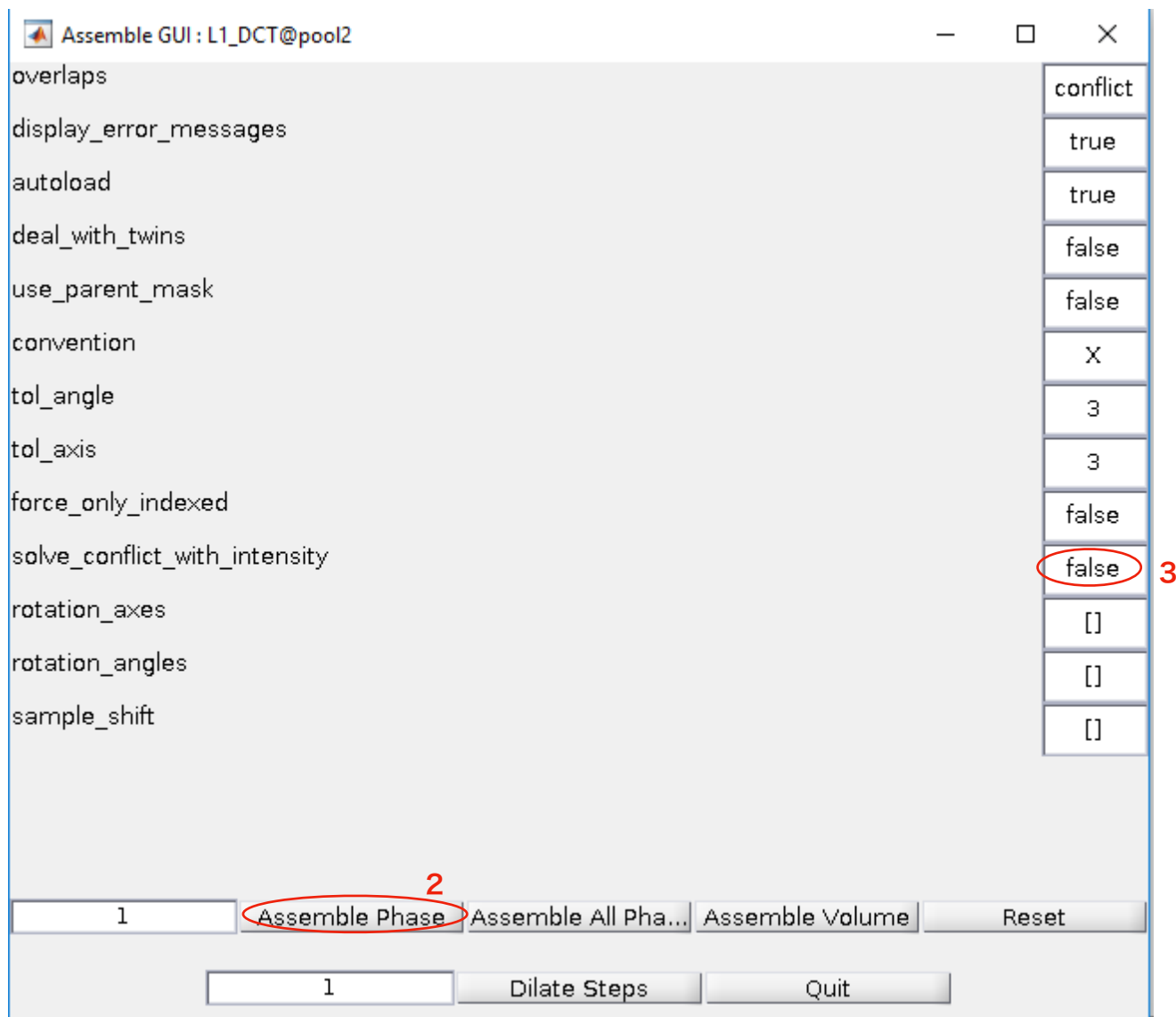
で、GUIが立ち上がる

※ターミナルでエラーが出続けるが、気にしないこと



10-1. 粒子画像の合成

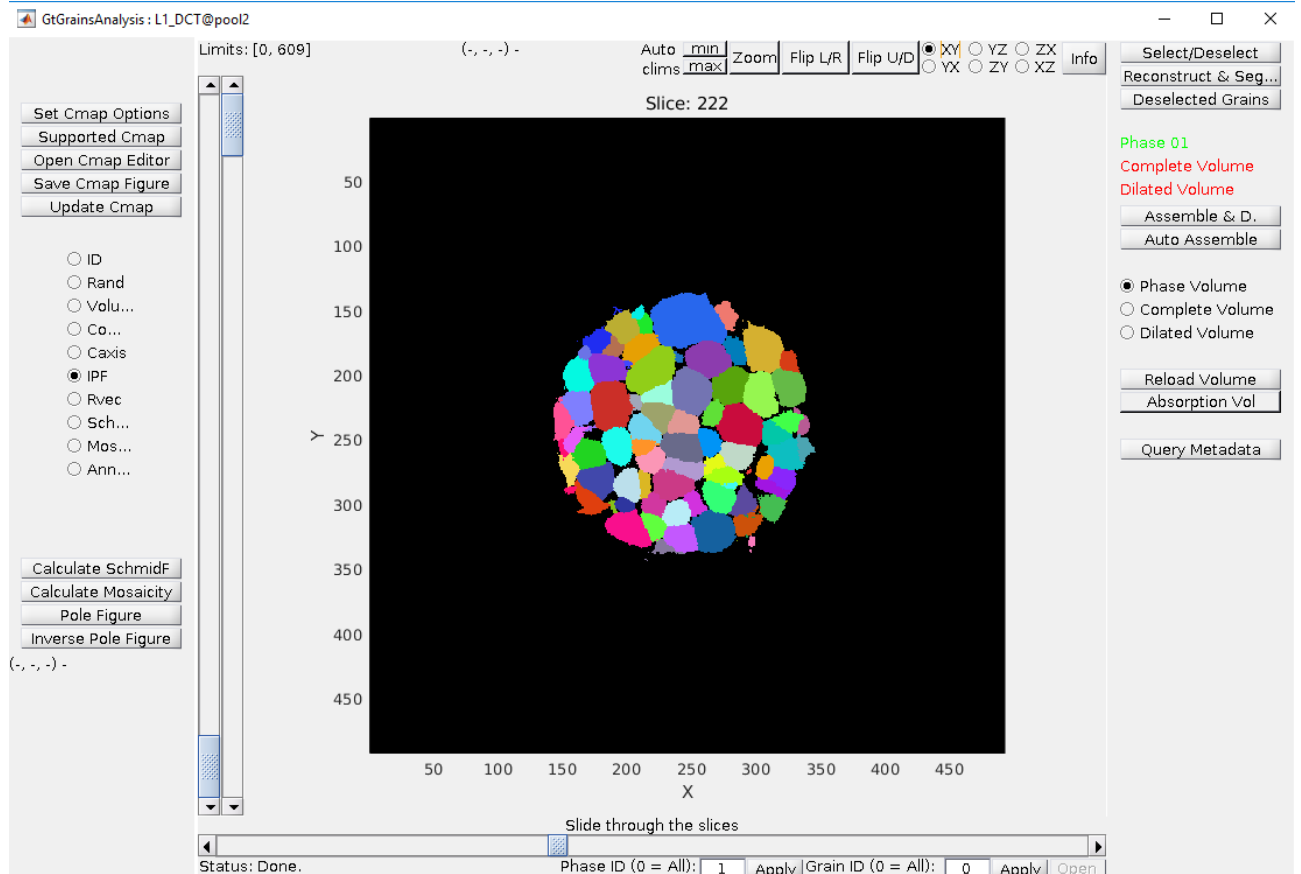
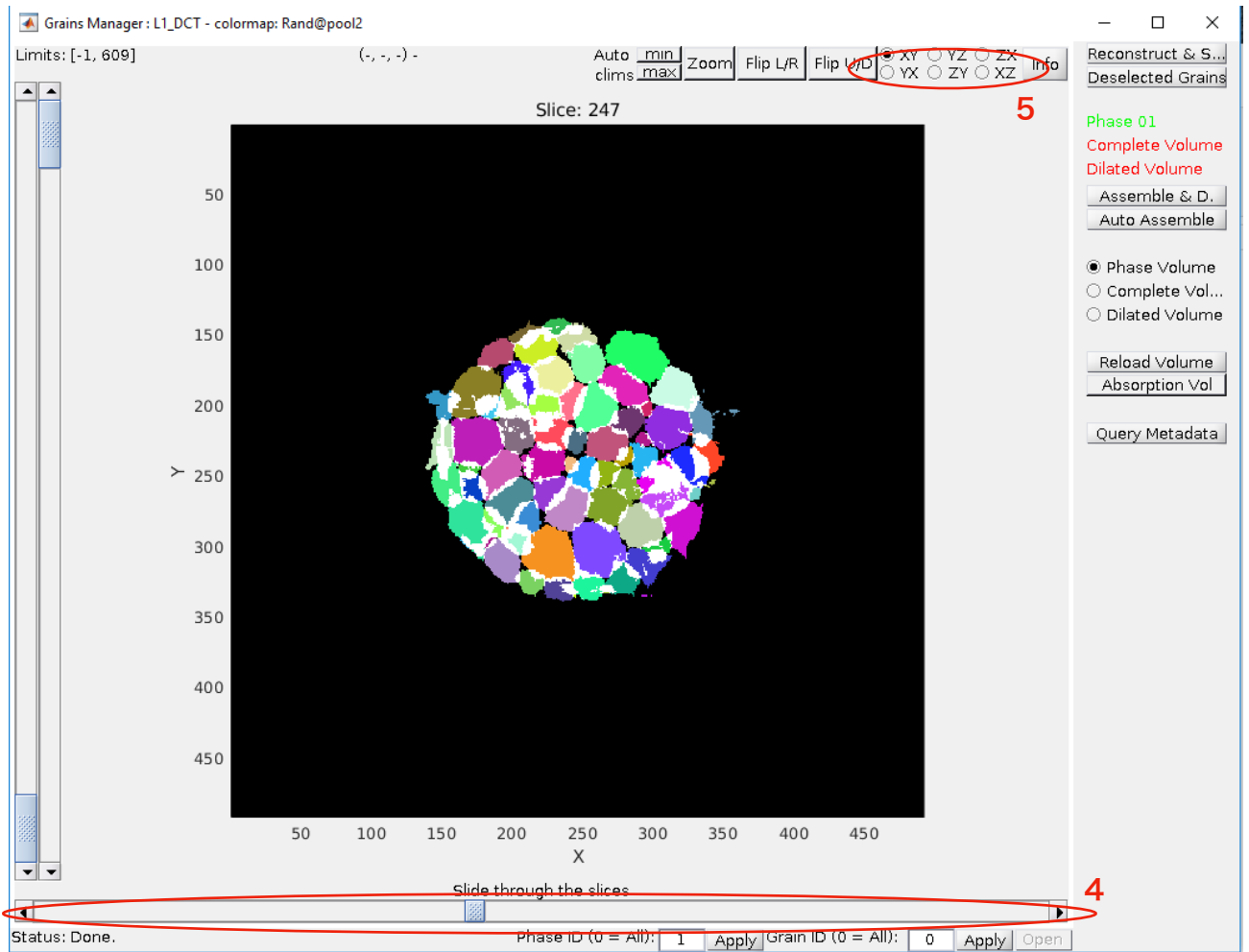
前のステップで再構成した粒子のボリュームを合成し、試料全体のCT画像にする。1 ボタンを押すと、下記の画面が出てくる。



2のボタンを押すと、Teratermで粒子の合成が始まる。この時3のオプションをTrueにしておくと、重なり合ってエラーになった部分(白で表示される)を、Intensityの強い方に合わせてきれいな絵にしてくれる(正しい保証は無い)。

合成が終了した後、前の画面のスライダー4を動かすと、ランダムカラーで記載された粒子のスライス画像が表示される。この時、5のラジオボタンで、縦断面、横断面などを選択出来る。

同様に、GtGrainsAnalysisを立ち上げると、GtGrainsManagerと同じ画面が現れて、同じように3Dボリュームを閲覧出来るが、6のラジオボタンで、IPFカラーを選ぶことが出来る。



(上)solve_conflict_with_intensity = false (下) = true

GtGrainsAnalysis : L1_DCT@pool2

Limits: [-1, 609] (456, 269, 223) Auto min Zoom Flip L/R Flip U/D XY YZ ZX
Phase: 1, Grain 0 clim max YX ZY XZ Info

Slice: 223

50
100
150
200
250
Y

6

ID
 Rand
 Volu...
 Co...
 Caxis
 IPF
 Rvec
 Sch...
 Mos...
 Ann...

Set Cmap Options
Supported Cmap
Open Cmap Editor
Save Cmap Figure
Update Cmap

Calculate SchmidF
Calculate Mosaicity
Pole Figure
Inverse Pole Figure

Rand:
0.000

Select/Deselect
Reconstruct & Seg...
Deselected Grains

Phase 01
Complete Volume
Dilated Volume
Assemble & D.
Auto Assemble

Phase Volume
Complete Volume
Dilated Volume

Reload Volume
Absorption Vol

Figure 3: gtModifyStructure Version 003@pool2

Edit the values, click "OK" when you are happy

Options for IPF colormap:

sampleDir	<input type="text" value="0 0 1"/>	double	Sample direction in the sample CS for IPF calculation
phaseid	<input type="text" value="1"/>	double	Current phase
saturate	<input checked="" type="checkbox"/>	logical	Saturate colors in the IPF map
save	<input type="checkbox"/>	logical	Save colormap on disk?
background	<input checked="" type="checkbox"/>	logical	Do we want the background color in the cmap?

Clear Quit Check **OK**

Slide through the slices

Status: Done. Phase ID (0 = All): 1 Apply Grain ID (0 = All): 0 Apply Open