

新粉末構造解析法サポートプログラム

idaizumi20110630.pxp

チュートリアル

名古屋工業大学 セラミックス基盤工学研究センター

井田 隆

概要：

Igor Pro のマクロで作成された idaizumi20110630.pxp アプリケーションを使って、RIETAN-FP ver. 2.x の example データとして収録されているフッ素アパタイトのデータを解析する具体的な手順を示します。RIETAN の操作には習熟していることを前提とします。Mac OS 版での操作について記述するものですが、Windows 版でもそれほど変わらないと思います。Igor Pro ver. 6.2 の試用版（フル仕様、30日間後機能限定）は Wavemetrics 社のサイトからダウンロードすることができます。

1. データの準備

- 1-1 [コピーの作成] ファインダから、FapatiteJ フォルダのコピーを作成します。以下の操作は、このコピーの内容を書き換えることになります。
- 1-2 [統合環境の起動] RIETAN-FP 統合環境のインストールされたテキストエディタ JeditX を使って、コピーされた FapatiteJ.ins を開きます。

2. 初期リートベルト解析

- 2-1 [ins ファイルの変更] FapatiteJ.ins 中の “INDREF = 0” を “INDREF = 1”（ピーク形状出力指示）に変更します。また、“NUPDT = 0” を “NUPDT = 1”（更新）に変更します。
- 2-2 [リートベルト解析] JeditX のマクロメニューから RIETAN を繰り返し実行し、最適化された構造パラメータの値が変化しなくなる事を確認します。JeditX で FapatiteJ.ins を開いたまま、次の操作に移ります。

3. 統計誤差推定

- 3-1 [idaizumi アプリケーションの起動] Igor Pro ver 6.1 以降を使って、idaizumi20110630.pxp を開きます。この後随時 “File” → “Save Experiment” を選択すれば途中経過を保存できます。

- 3-2 [相の数と入力データファイルの指定] “PSAnalysis” メニューから “Load itx [INDREF = 1] file ...” を選択します。“Input Number of Phases :” の入力要求に対して “1” を入力します。引き続き、入力データとなる FapatiteJ.itx ファイルを指定します。この後の入力ファイルの読み込みと一時データの作成にはかなり時間がかかりますが、しばらく我慢します。
- 3-3 [測定モードの指定] “PSAnalysis” メニュー → “Select mode” → “Stationary, symmetric reflection” を選択し、「静止試料に対して対称反射法で測定されたデータ」であることを指示します。
- 3-4 [等高線図の描画] “PSAnalysis” メニュー → “Show Graphs” → “Update Contour Map” を選択し、尤度（ゆうど）評価関数（likelihood estimator）の等高線図用データを作成します。さらに、“PSAnalysis” メニュー → “Show Graphs” → “Show Contour Map” を選択し、尤度（ゆうど）評価関数の等高線図 “ContourMap” を描画します。等高線図描画のためのデータを計算するためには、かなりの時間がかかります。実際の最適化計算ではこの等高線図データは使わないので、この操作を省略することもできますが、本当に最尤推定ができているかを確認するためには、粗いものであったとしても等高線図を表示することが非常に効果的です。
- 3-5 [初期シンプレックスの設定] “PSAnalysis” メニュー → “Initialize Vertices” を選択し、初期シンプレックスを設定します。
- 3-6 [シンプレックスの描画] “PSAnalysis” メニュー → “Show Graphs” → “Show Simplex on Contour Map” を選択し、等高線図上にシンプレックス（ここでは三角形）を描画します。
- 3-7 [シンプレックス頂点座標の表示] “PSAnalysis” メニュー → “Show Tables” → “Show Vertices” を選択し、シンプレックス各頂点の座標 $wVertex[0..2][0..1]$ と頂点での評価関数の値 $wZ[0..2]$ を記載した表 “TableVertex” を画面に表示します。異なる頂点が異なる行に表示され、列の並びは各頂点の座標値に対応します。表に表示される数値はこの後の最適化計算の各ステップで更新され、細かい値の変化を確認するために効果があります。
- 3-8 [最適化計算] “PSAnalysis” メニュー → “Start Downhill Simplex” を選択し、滑降シンプレックス法による最小化を実施します。シンプレックスがどのように変形するかを “ContourMap” ウィンドウのアニメーション表示と “TableVertex” ウィンドウの数値で確認します。
- 3-9 [最適化計算結果の確認] “PSAnalysis” → “Show Graphs” → “Expand Simplex ...” あるいは “Shift Simplex ...” を使って、手動でシンプレックスを拡大、シフトすることができます。“ContourMap”, “TableVertex”, “GraphSigmas” を参照しながら、初期値

を変えて“Start Downhill Simplex”を実行し、収束位置が一意であること、推定統計誤差が変化しないことを確認します。

- 3-10 [統計誤差の計算] “PSAnalysis”メニュー → “Calculate Statistical Errors”を選択し、推定統計誤差を計算します。
- 3-11 [統計誤差の表示] “PSAnalysis”メニュー → “Show Graphs” → “Show Sigmas”を選択し、“GraphSigmas”ウィンドウに推定された誤差を表示します。“GraphSigmas”ウィンドウでは、グラフの上部からトータルの誤差、計数統計誤差、虎谷誤差（観測強度に比例する誤差）、粒子統計誤差が表示されます。
- 3-12 [推定誤差を附属した強度データファイルの作成] “PSAnalysis” → “Save as NINT = 11 [3 data] ...”を選択し、推定された誤差を附属させた強度データを作成します。ここでは“FapatiteJ”フォルダ中にサブフォルダ“step2”を作成し、この中にファイル名“FapatiteJ.int”として保存することにします。idaizumi20110630.pxp は開いたまま、次の操作に移ります。

4. 再リートベルト解析

- 4-1 [ins ファイルの再変更] テキストエディタ JeditX で開いていた“FapatiteJ.ins”中 “NINT = 1”を“NINT = 11”に変更し、“ファイル” → “別名で保存 ...” から、前のステップで作成した強度データ“FapatiteJ.int”と同じ“step2”サブフォルダに新しく“FapatiteJ.ins”として保存します。
- 4-2 [再リートベルト解析] JeditX のマクロメニューから RIETAN を繰り返し実行し、最適化された構造パラメータが変化しなくなる事を確認します。

5. 統計誤差再推定

- 5-1 [アプリケーションの選択] idaizumi20110630.pxp を最前面に表示しなおします。
- 5-2 [相の数と入力データファイルの指定] “PSAnalysis”メニューから“Load itx [INDREF = 1] file ...”を選択します。“Input Number of Phases :”に対して“1”を入力します。今回の入力データファイルとしては、前のステップで作成された“step2”サブフォルダ中の FapatiteJ.itx ファイルを選択します。以下は (3-3) ～ (3-12) と同様の操作を行います。今回は、新しく“step3”サブフォルダを作成し、この中に強度ファイル“FapatiteJ.int”を保存します。

6. 再々リートベルト解析

- 6-1 [ins ファイルの再変更] テキストエディタ JeditX で開いていた“FapatiteJ.ins”について、“ファイル” → “別名で保存 ...” から、前のステップで作成した強度データ

“FapatiteJ.int”と同じ“step3”サブフォルダに新しく“FapatiteJ.ins”として保存します。

6-2 [再々リートベルト解析] JeditX のマクロメニューから RIETAN を繰り返し実行し、最適化された構造パラメータが変化しなくなる事を確認します。

7. 操作の繰り返し

以下、ステップ5～6の操作を繰り返します。