

簡易 R p % の最適化による各種 O D F の解析結果

Rp%は、ODF 入力極点図と、ODF 解析結果の極点図から計算されます。

ODF 解析結果の極点図は矛盾がほとんどありませんが、入力極点図では、光学系の矛盾など数々の Error が存在しています。

CTR ソフトウェアでは、この R p %に着目し、補正量を変えながら最適な Rp%が得られる機能が追加されています。

$$RP_{\{hkl\}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{\{PF_{exp.}\}_i - \{PF_{calc.}\}_i}{\{PF_{exp.}\}_i} \right| \cdot 100\%$$

where :

$RP_{\{hkl\}}$ - relative error for $\{hkl\}$ pole figure,

$\{PF_{exp.}\}_i$ - intensity of experimental (corrected and normalized) pole figure in point i,

$\{PF_{calc.}\}_i$ - intensity of calculated pole figure in point i,

N - number of measured points on pole figure.

ODFPoleFigure2 で簡易 Rp%の最適化を行うと、ODF 解析結果の Rp%も低下します。

入力極点図に矛盾が多いと最適化による効果が期待できます。

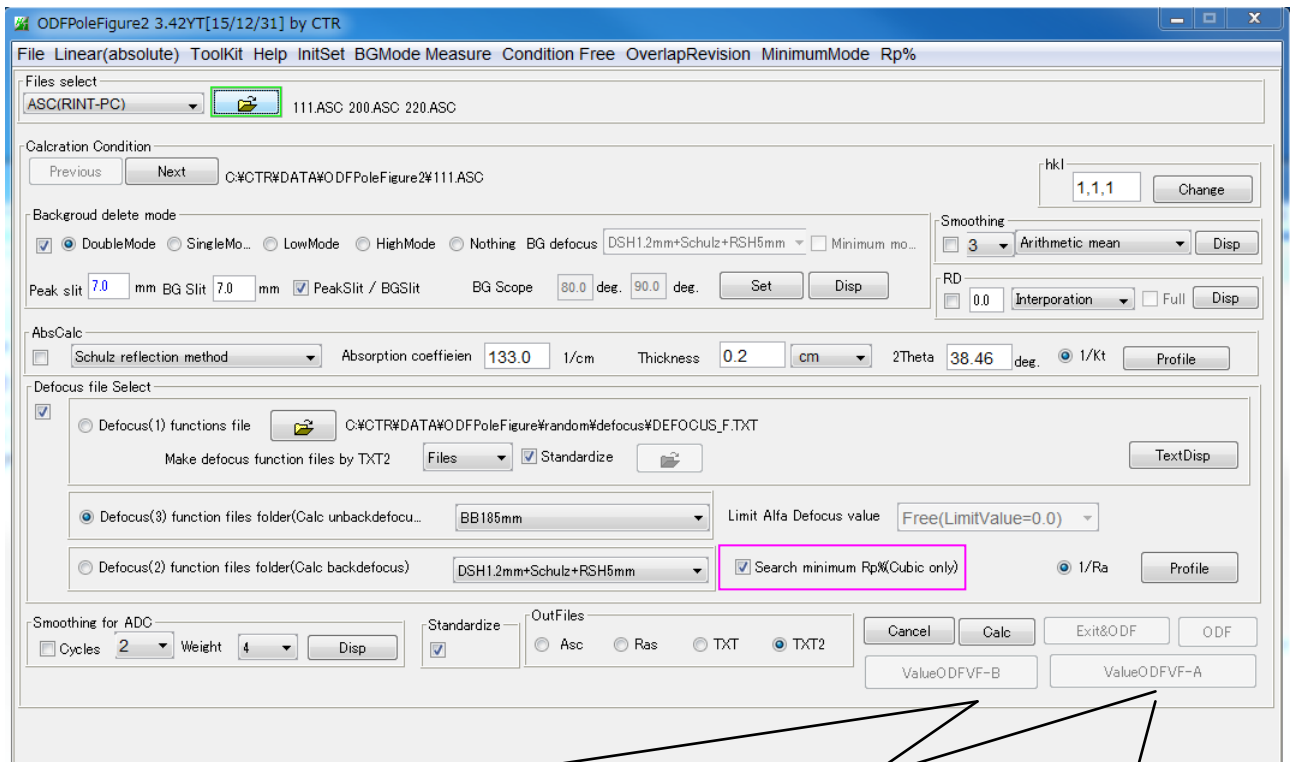
2015年10月13日

HelperTex Office

概要

CTRパッケージソフトウェアでは、ODFPoleFigure2 や ODFPoleFigure1_5 ソフトウェアで ODF 解析結果から算出される Error である Rp% の予測が可能になりました。

Rp% 適正化を行う前と適正化後で ODF 解析結果への影響を調べてみました。



Rp% の適正化を行わない場合、

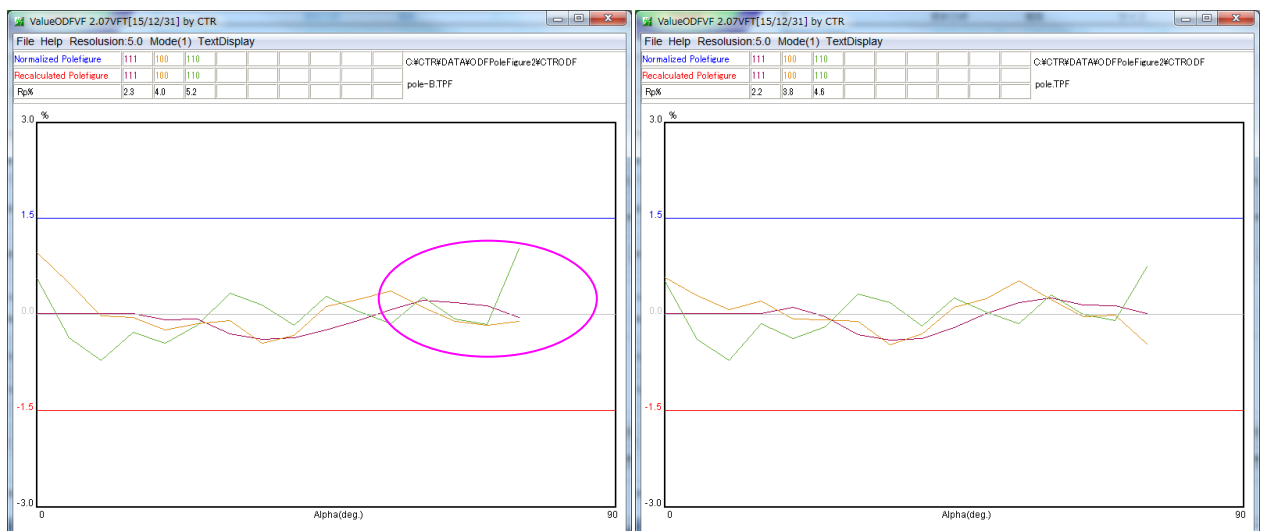
Search Rp% (1,1,1) 3.44% -> 3.44% (2,0,0) 4.65% -> 4.65% (2,2,0) 3.78% -> 3.78% Filemake success!!

Rp% の最適化を行った場合

Search Rp% (1,1,1) 2.27% -> 2.18% (2,0,0) 4.04% -> 3.82% (2,2,0) 5.19% -> 4.6% Filemake success!!

Rp% の適正化を行わない場合(Before)

Rp% の最適化を行った場合(After)

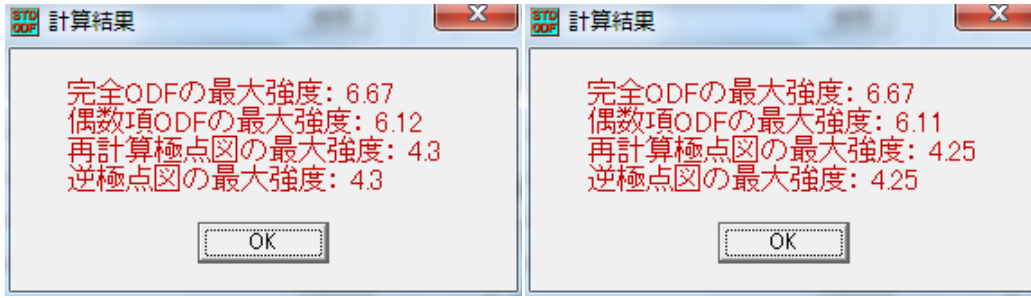


極点図外周付近の Error が少なくなり、その結果全体の Error も少なくなります。

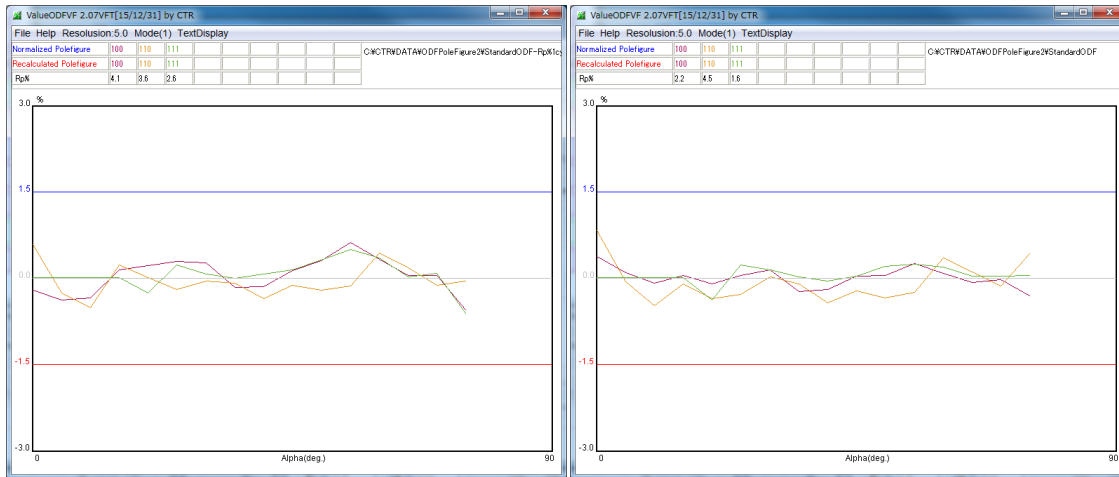
StandardODF

適正化を行わない場合

適正化を行った場合



StandardODF の ValueODFVF 評価



Normalized Polefigure	100	110	111
Recalculated Polefigure	100	110	111
Rp%	4.1	3.6	2.6

3.4%

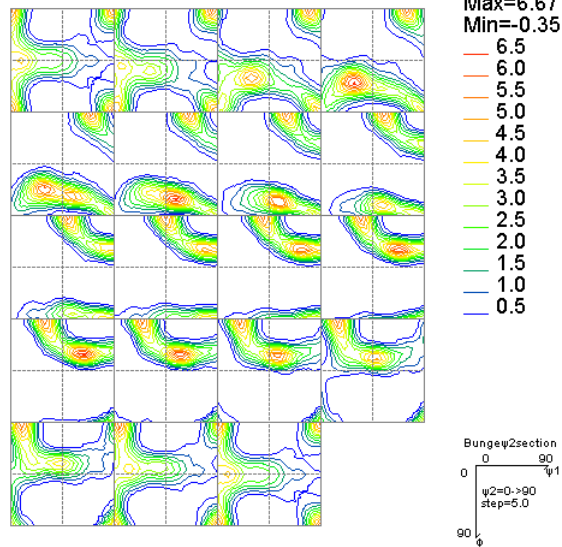
Normalized Polefigure	100	110	111
Recalculated Polefigure	100	110	111
Rp%	2.2	4.5	1.6

2.8%

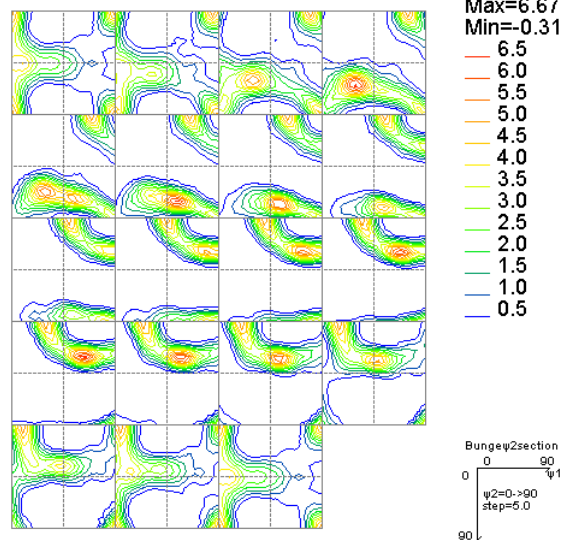
Rp% 3.4% → 2.8%

ODFPoleFigure2 ソフトウェアで Rp% の最適化を行うと、StandardODF 解析結果から計算した ValueODFVF 評価でも Rp% が下がります。

filename: C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure2\StandardODF-Rp%1oyole\ODF15



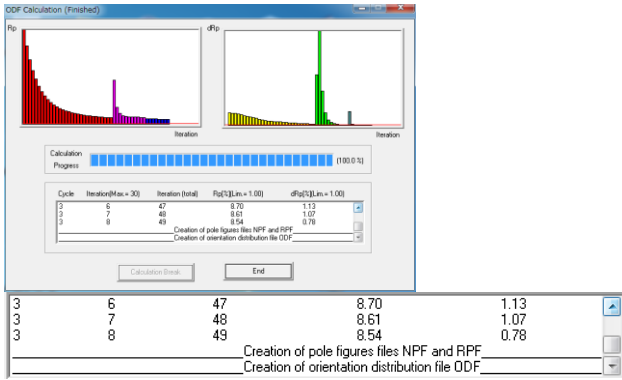
filename: C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure2\StandardODF\ODF15



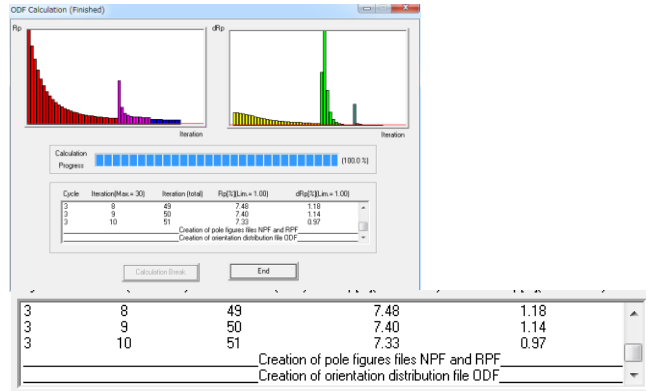
ODF 図では、大きな違いは見られません。

LaboTexの場合

適正化を行わない場合

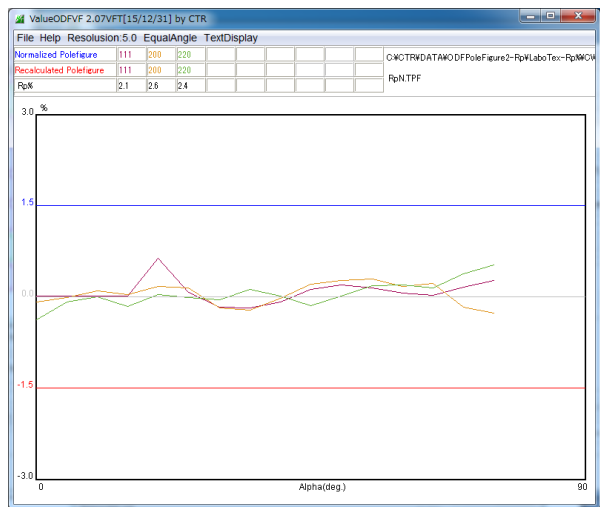
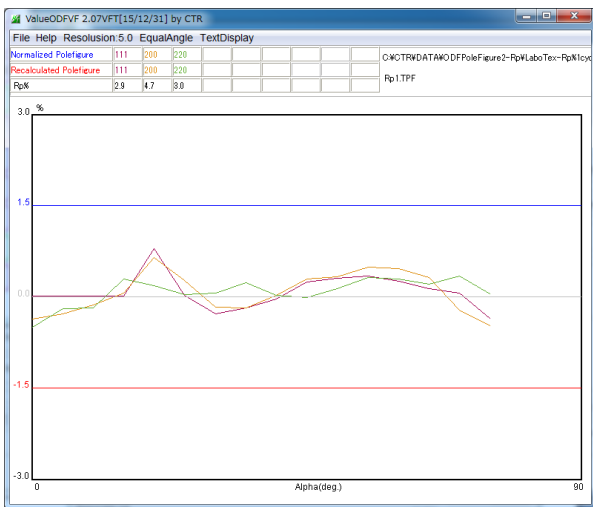


適正化を行った場合



LaboTex の Rp % 8.54% → 7.33%

LaboTex の ValueODFVF 結果



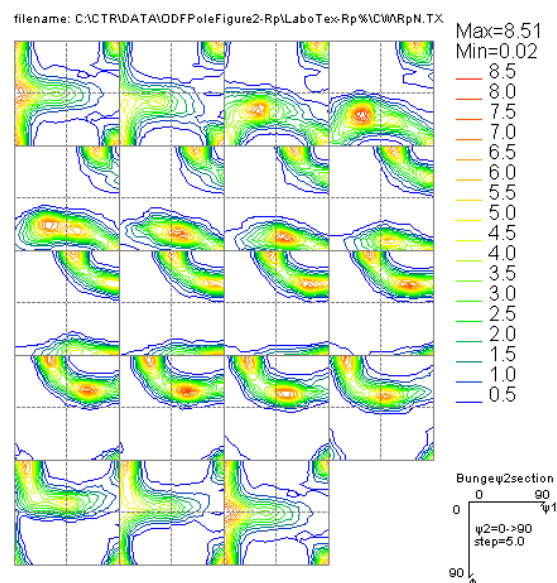
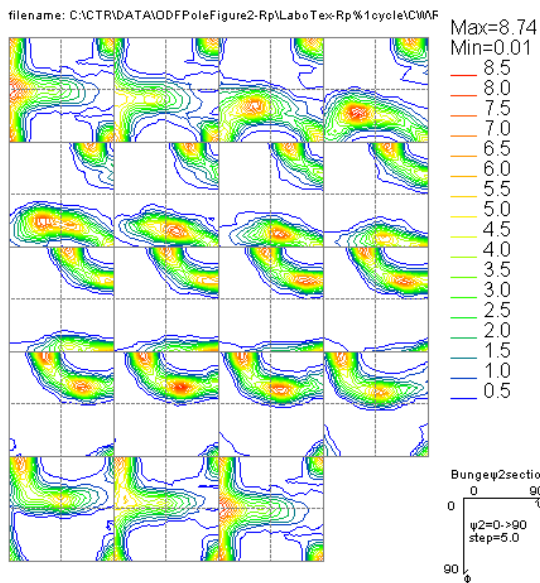
Normalized Polefigure	111	200	220
Recalculated Polefigure	111	200	220
Rp%	2.9	4.7	3.0

3.5%

Normalized Polefigure	111	200	220
Recalculated Polefigure	111	200	220
Rp%	2.1	2.6	2.4

2.4%

Rp% 3.5% → 2.4%



ODF 結果には、大きな違いは見られません。

TextToolsの場合

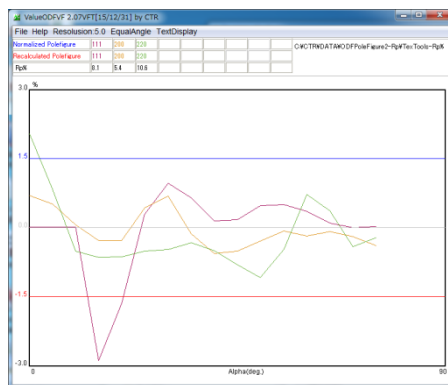
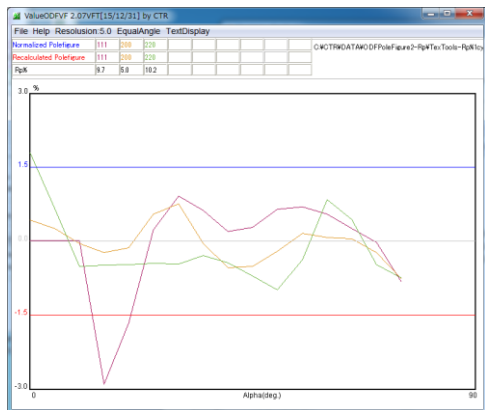
適正化を行わない場合

2↓
3 3↓
0.0100 0.1143↓

TextTools Rp% 11.43% → 11.3%

適正化を行った場合

2↓
3 3↓
0.0100 0.1132↓



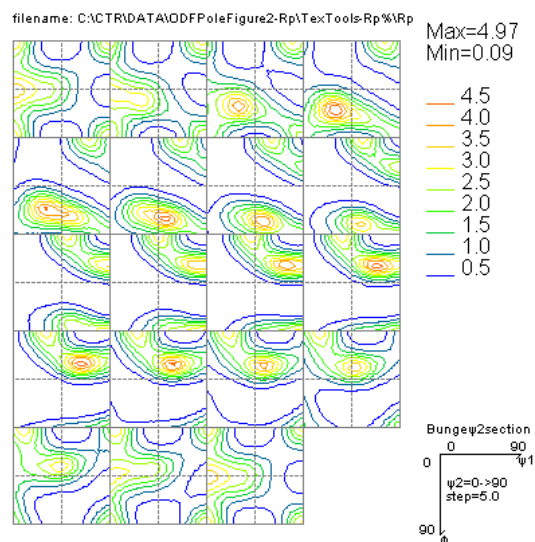
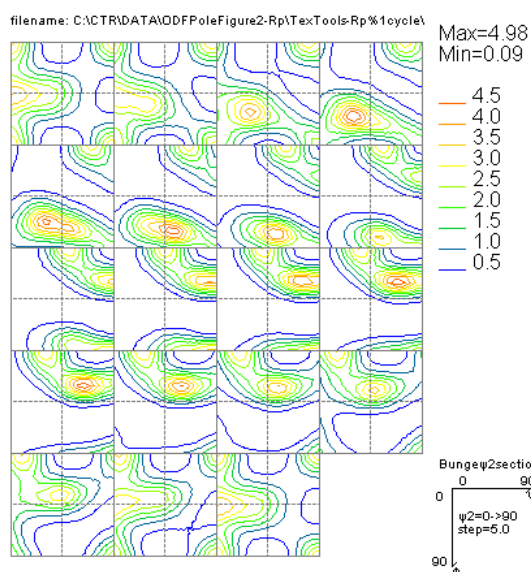
Normalized Polefigure	111	200	220
Recalculated Polefigure	111	200	220
Rp%	9.7	5.0	10.2

8.3%

Normalized Polefigure	111	200	220
Recalculated Polefigure	111	200	220
Rp%	8.1	5.4	10.6

8.0%

TextToolsのValueODF V2結果 8.3% → 8.0%



Rp%が若干低下するが、StandardODFやLaboTexの様に大きく改良されない。

まとめ

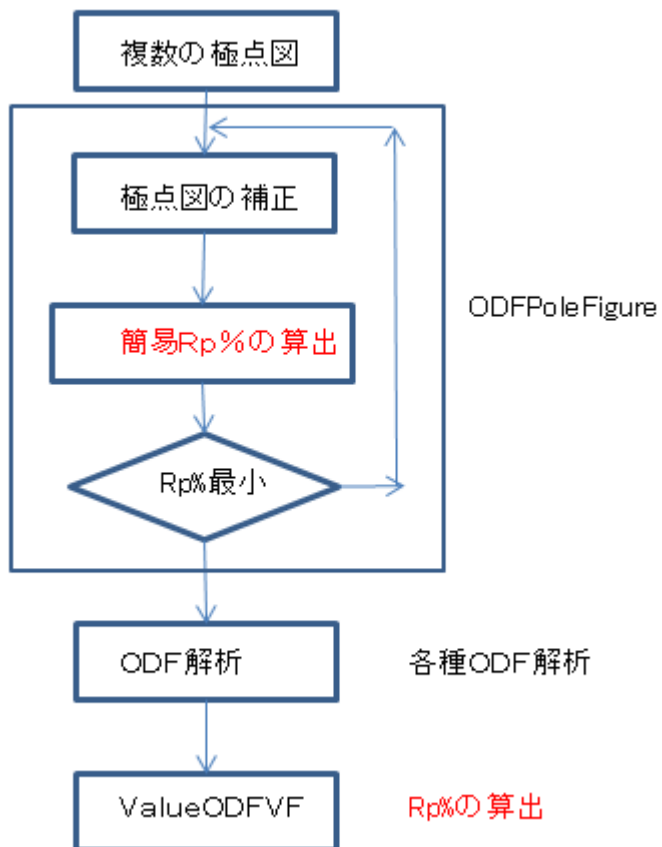
極点データに光学系のErrorがあっても、ODF解析でその矛盾を回避するある程度の機能があります。

(HelperTex サイト、技術資料、「多成分の重なりに対するODF解析」を参考にしてください)
そのため、入力極点図とODF解析結果の差が発生します。

Rp%の最適化は、事前に光学系のErrorを補正しています。

光学系のErrorで大きいのは、defocusによる極点図の外周付近のデータです。

ODFPoleFigureソフトウェアのRp%最適化機能を使うことで光学系のErrorの軽減は有効と考えています。



最適化Rp%（簡易Rp%の算出）時、最終的に計算に用いた DEFOCUS ファイルを
C:\¥CTR¥work¥ODFPoleFigure2¥DEFOCUS.txt（常に上書き）として作成されています。