

極点図の内部規格化を考える

2014年09月10日



HelperTex Office

山田 義行

概要

極点図の規格化は色々の処で書かれています。

以下の例は、あるメーカーの説明書に説明されている計算で、機種を更新で A) から B) に計算式が変わっています。

A)

$$\langle I \rangle = \frac{\int_{0^{\circ}}^{\pi/2} \int_0^{2\pi} I(\alpha, \beta) \cdot \cos \alpha \, d\beta \, d\alpha}{\int_{0^{\circ}}^{\pi/2} \int_0^{2\pi} \cos \alpha \, d\alpha \, d\beta}$$

$$\text{故に } Rc = \frac{Ic}{\langle I \rangle}$$

B)

$$Rc[\alpha, \beta] = \frac{Ic[\alpha, \beta]}{\langle I \rangle} = \frac{Ic}{\frac{\sum_{\alpha=0}^{90} \sum_{\beta=0}^{360-\Delta S} Ic[\alpha, \beta] \times \cos \alpha}{\sum_{\alpha=0}^{90} \sum_{\beta=0}^{360-\Delta S} \cos \alpha}}$$

被検試料自身の強度データを使用し規格化を行います。

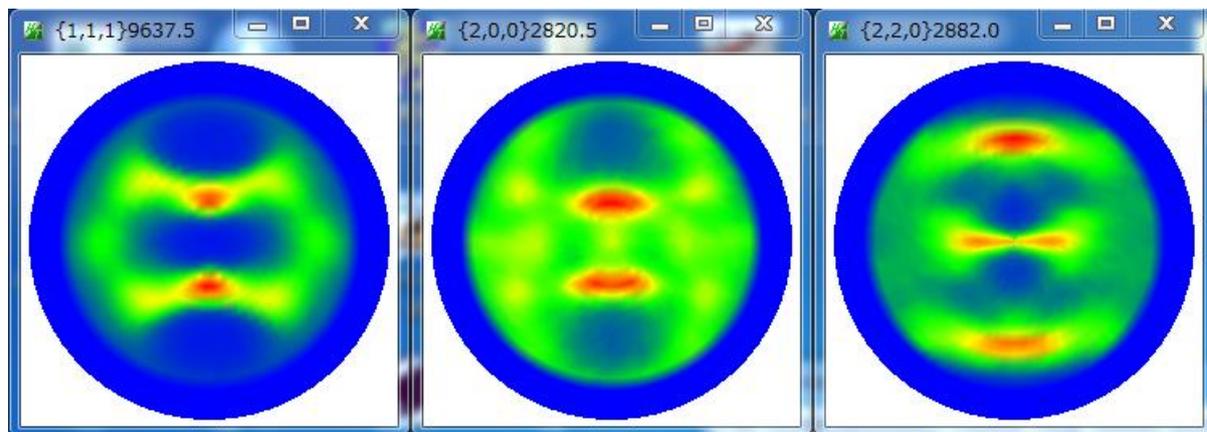
$Rc[\alpha, \beta]$: 規格化強度
$Ic[\alpha, \beta]$: 被検試料強度
$\langle I \rangle$: 無配向強度
ΔS	: β のステップ幅

$\beta = 0$ と $\beta = 360$ はデータが重なっている為で、A) より B) が正しいと思われます。
しかしデータの重なりを考えると、 $\alpha = 0$ と $\alpha = 90$ も特別なデータと考えられます。

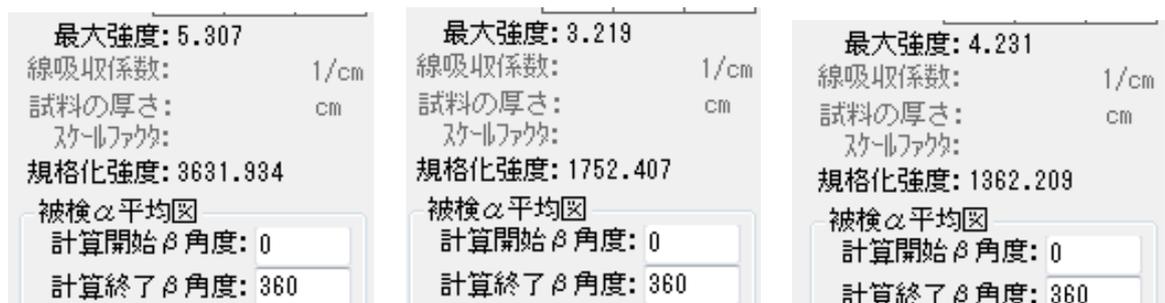
CTR パッケージソフトウェアでは、この特別なデータに対しても計算方法を変えています。
双方の重みを $1/2$ として計算しています。

この計算方法の違いを B) と CTR, LaboTex で比較してみます。

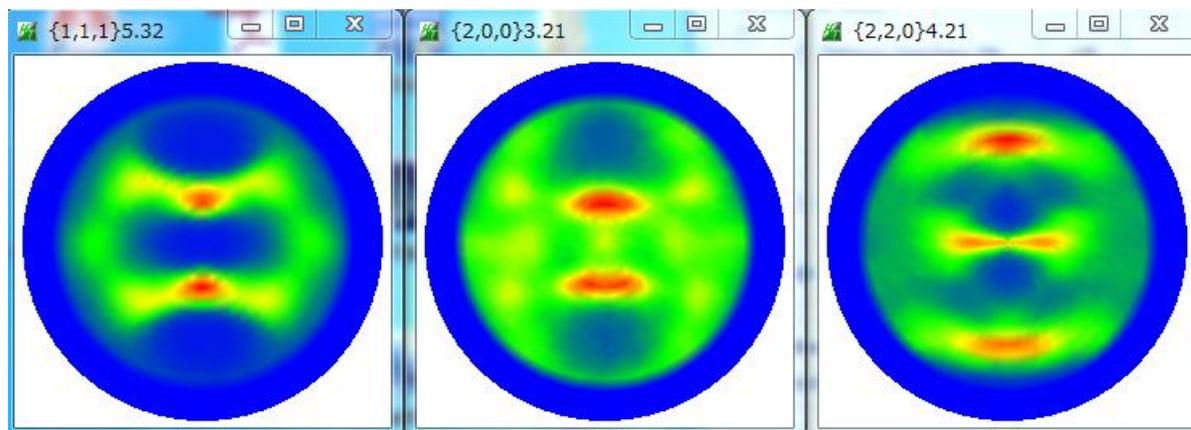
入力データ



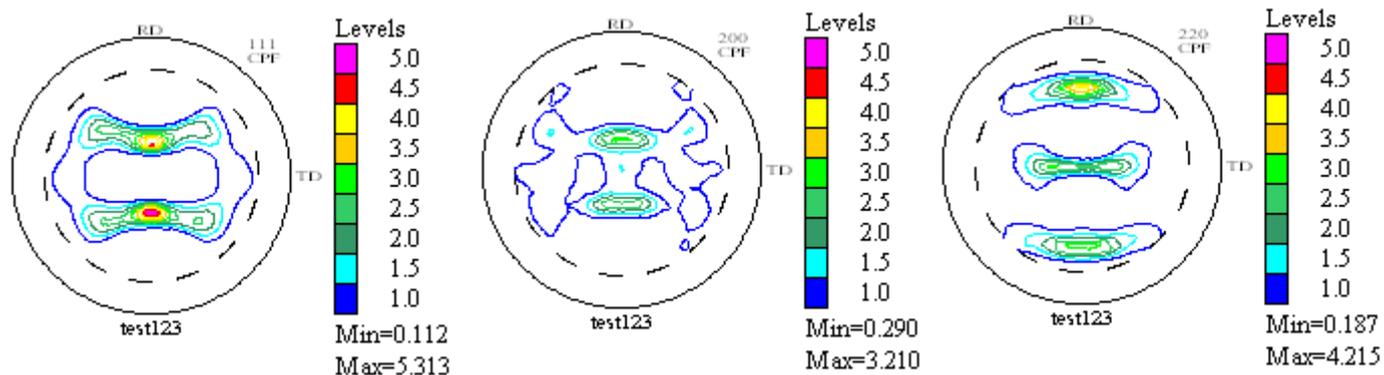
B) の計算式で規格化すると



CTRで計算する



L a b o T e x で計算



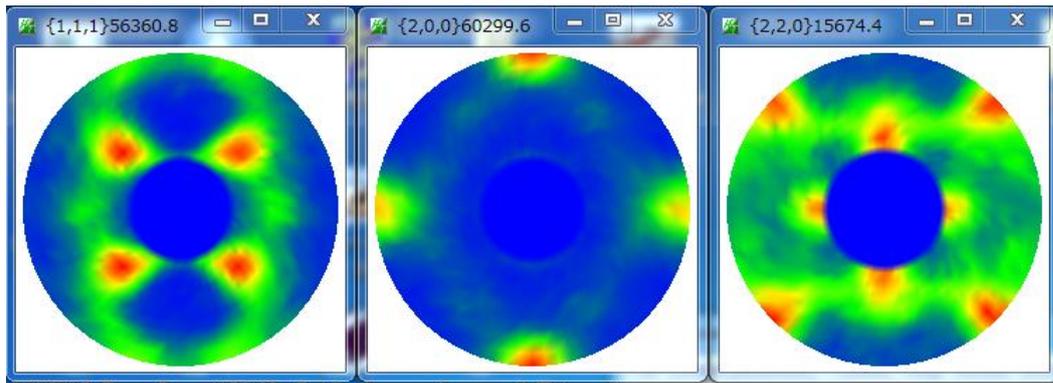
極点図の中心の極密度が強い場合、B)と CTR は一致しません。

完全極点図ではこの違いが大きくなります。

CTRとL a b o T e x は一致しています。

違いは、L a b o T e x 入力データ作成時の桁落ちと考えられます。

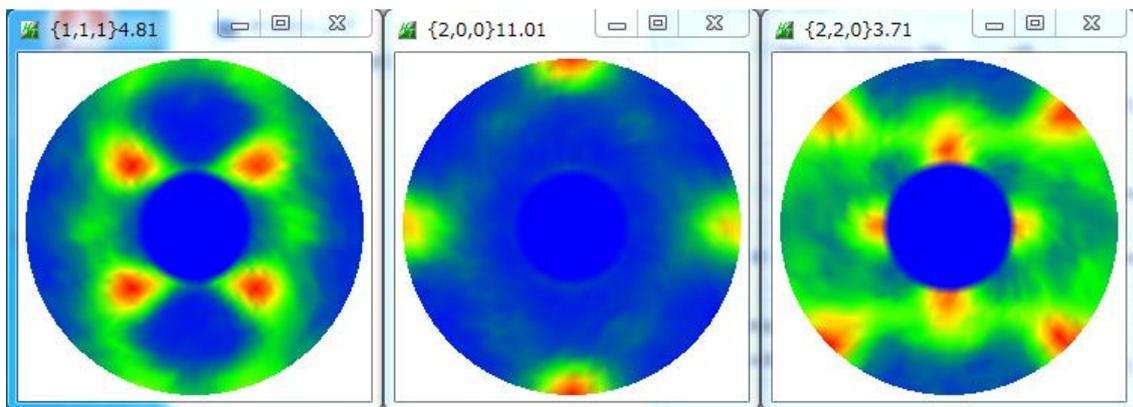
透過法データで比較
入力データ



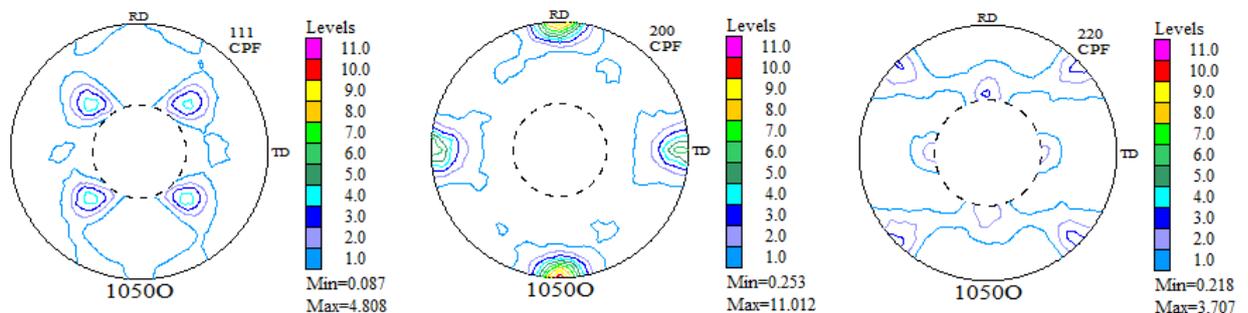
B)の計算式で規格化

最大強度: 4.884	最大強度: 10.394	最大強度: 3.700
線吸収係数: 1/cm	線吸収係数: 1/cm	線吸収係数: 1/cm
試料の厚さ: cm	試料の厚さ: cm	試料の厚さ: cm
スケールファクタ:	スケールファクタ:	スケールファクタ:
規格化強度: 57699.260	規格化強度: 29007.930	規格化強度: 21179.640
被検α平均図	被検α平均図	被検α平均図
計算開始β角度: 0	計算開始β角度: 0	計算開始β角度: 0
計算終了β角度: 360	計算終了β角度: 360	計算終了β角度: 360

C T Rで計算する

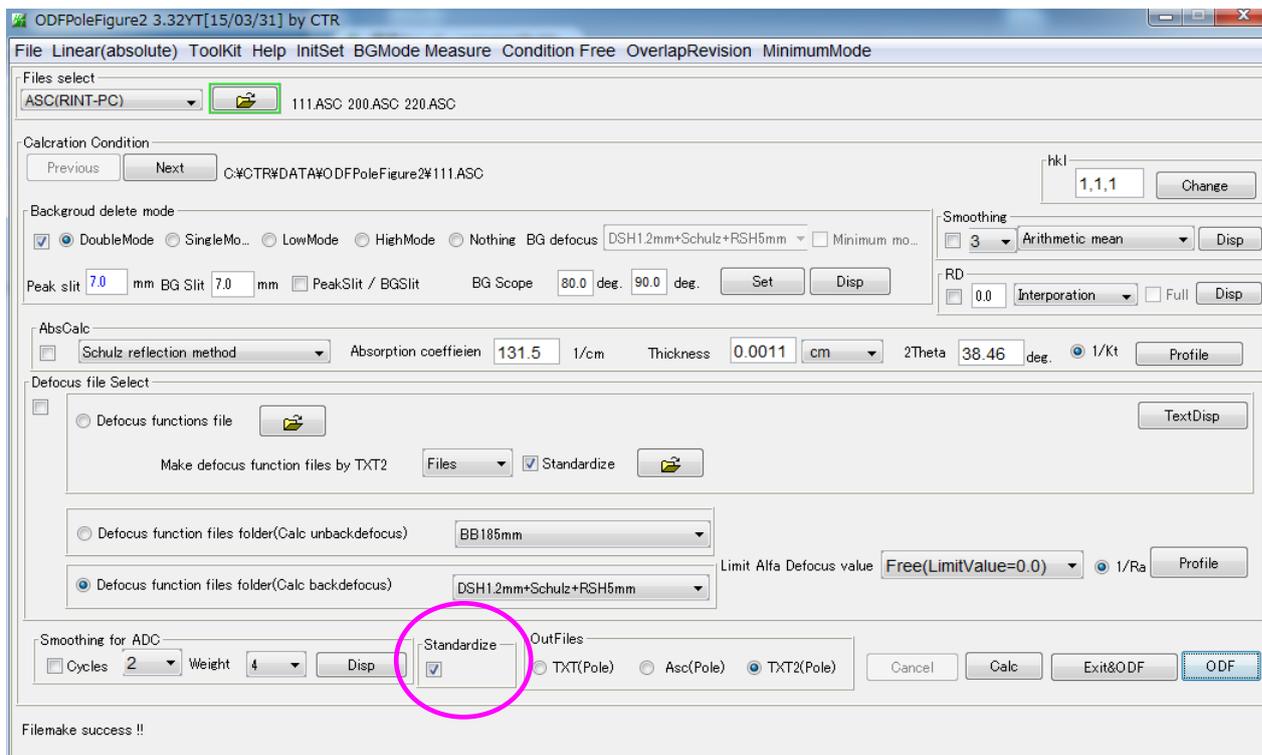


LaboTex で計算



外周付近の極密度が高い{200}で最大極密度の違いが目立ちます。

ODFPoleFigure2 ソフトウェアの内部規格化



ODFPoleFigure1_5 ソフトウェアの内部規格化



CTRパッケージソフトウェアでB)と同じ計算を行うのであれば、

“C:\CTR\work\stdNORM\stdNORM.txt”ファイルに RINT と書き込めば確かめられます。