

MTEXのODF計算

uniformODF()と calcODF()を比較

018年02月11日

HelperTex Office

概要

uniformODF()関数と calcODF()を考える

uniformODF()は結晶方位からODF図作成する。calcODF()は極点図からODF図を作成する。
uniformODF()で作成したODF図とその再計算極点図を calcODF()で作成したODF図が一致するか確認する。

randomレベルを得る

```
cs = crystalSymmetry('cubic');  
ss = specimenSymmetry('orthorhombic');
```

```
odfr = uniformODF(cs,ss)
```

goss方位を得る。

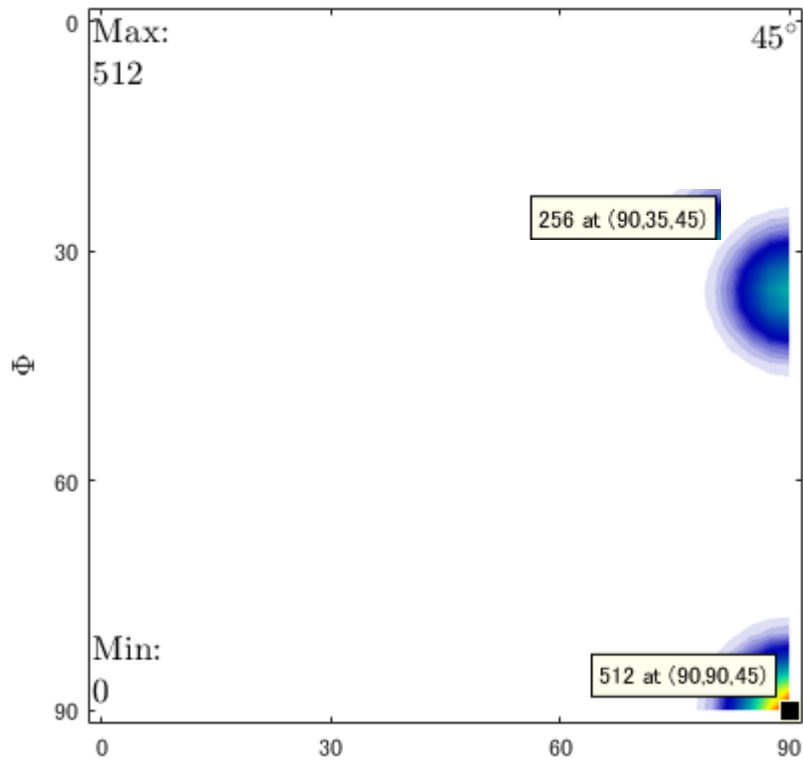
```
ori = orientation('Miller',[1,1,0],[0,0,1],cs,ss);  
psi = vonMisesFisherKernel('HALFWIDTH',5*degree);  
odfg = unimodalODF(ori,psi)
```

copper

```
ori = orientation('Miller',[1,1,2],[-1,1,1],cs,ss);  
psi = vonMisesFisherKernel('HALFWIDTH',5*degree);  
odfc = unimodalODF(ori,psi)
```

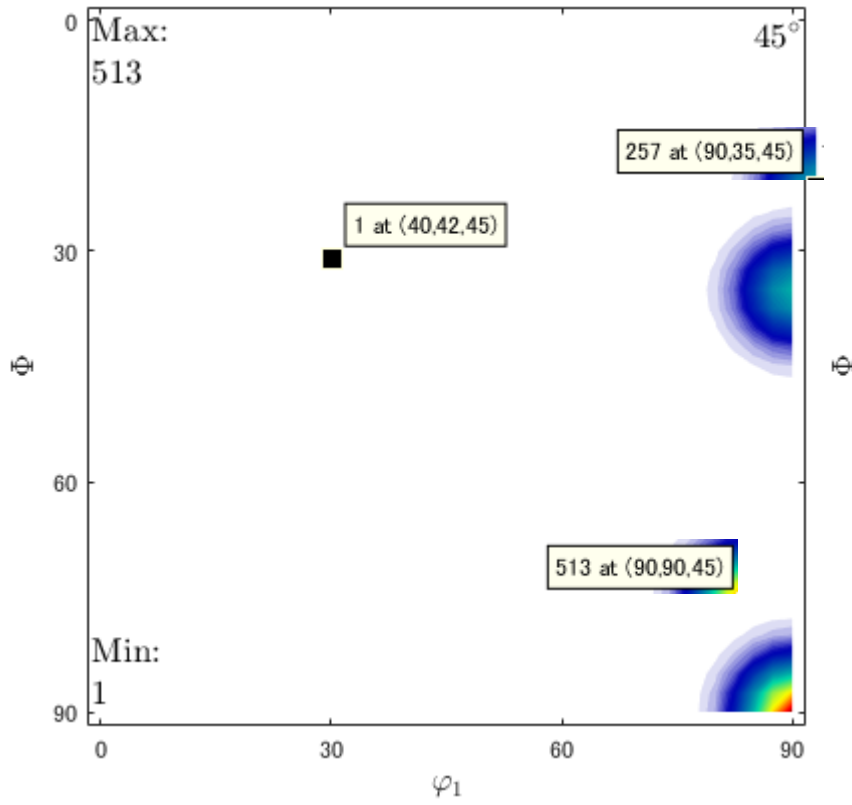
goss+copper

```
odf=odfg+odfc  
plot(odf)
```

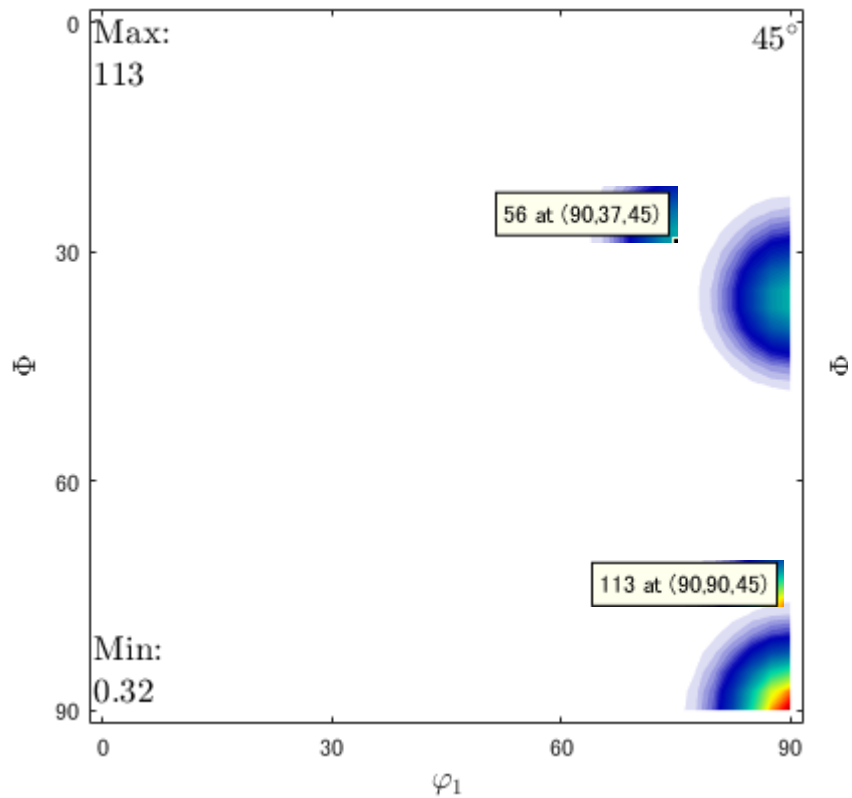


goss : copper = 2 : 1 は正しい

random+goss+copper



ODFの足し算になっていて、規格化がされていない。
 $h = \{ \text{Miller}(1,1,1,cs), \text{Miller}(2,0,0,cs), \text{Miller}(2,2,0,cs) \}$
`rpf=calcPoleFigure(odf,h)`
`odf2=calcODF(rpf)`

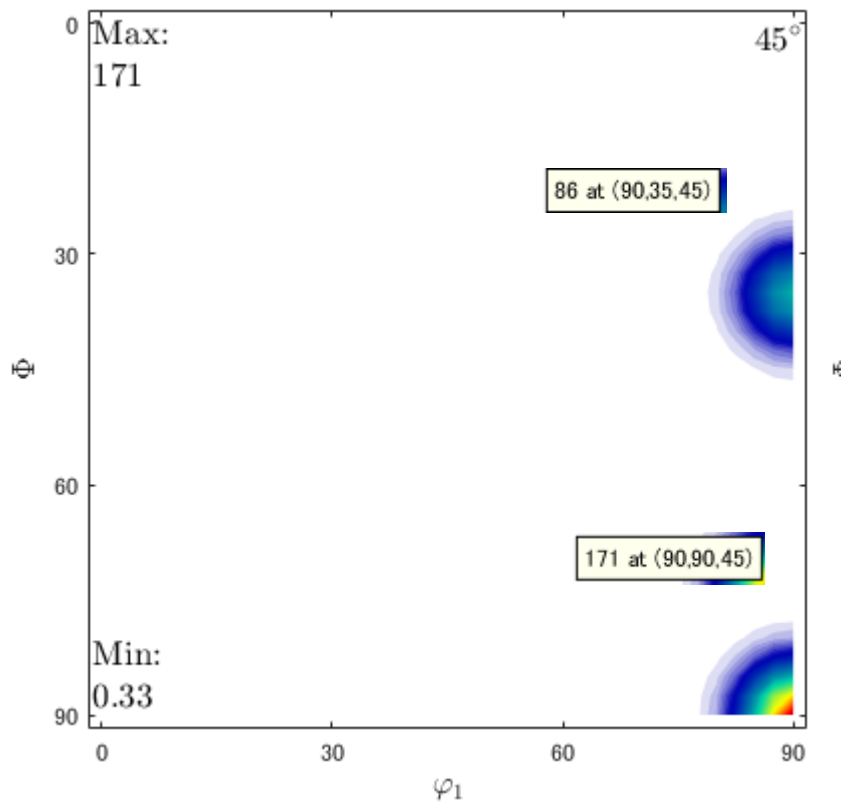


規格化されたODF図となる。

しかし

```
odf3=odf/3
```

```
plot(odf3)
```



と異なる

方位の半価幅が広がっている。

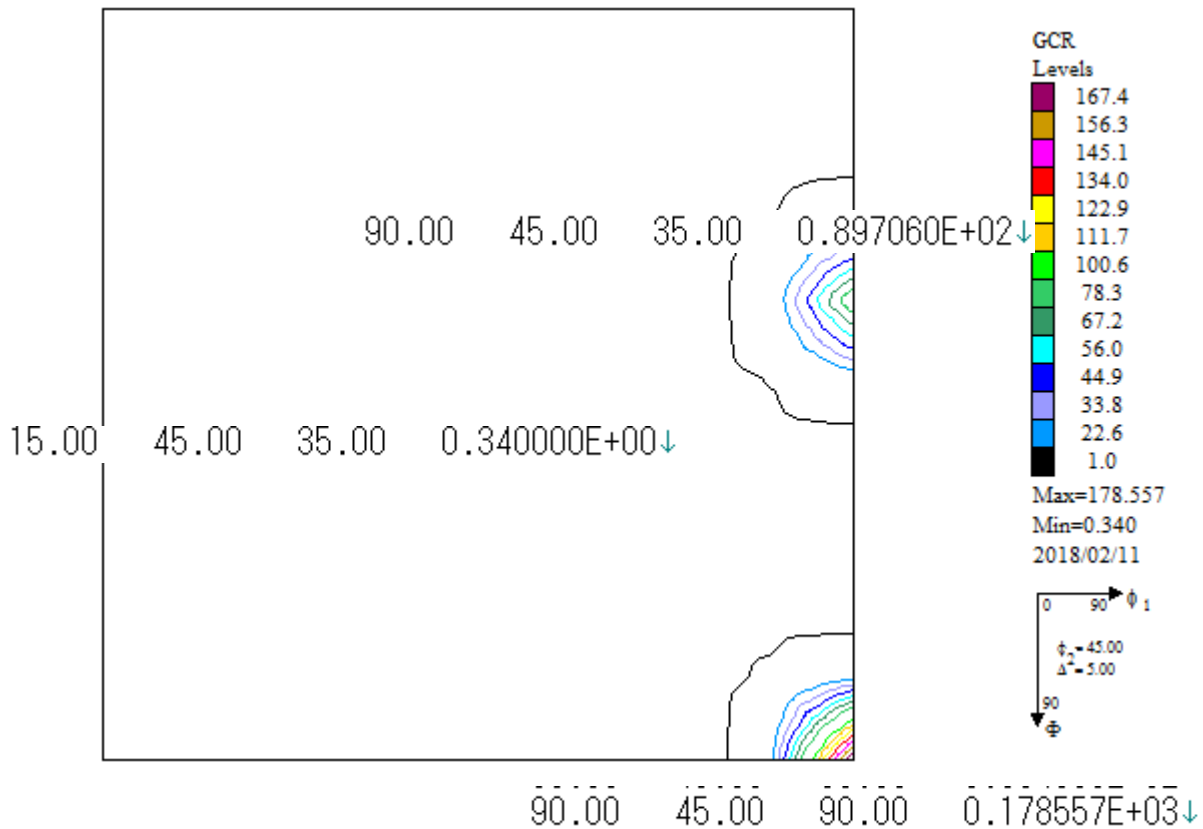
これは、極点図からODF計算時、

unimodalODF()と calcODF()の計算が異なる事が原因と考えられる。

LaboTexのADC法とGauss関数も若干異なるが、これほど大きな差にはならない

LaboTexの場合

Goss=33% copper=33% random=34%の場合

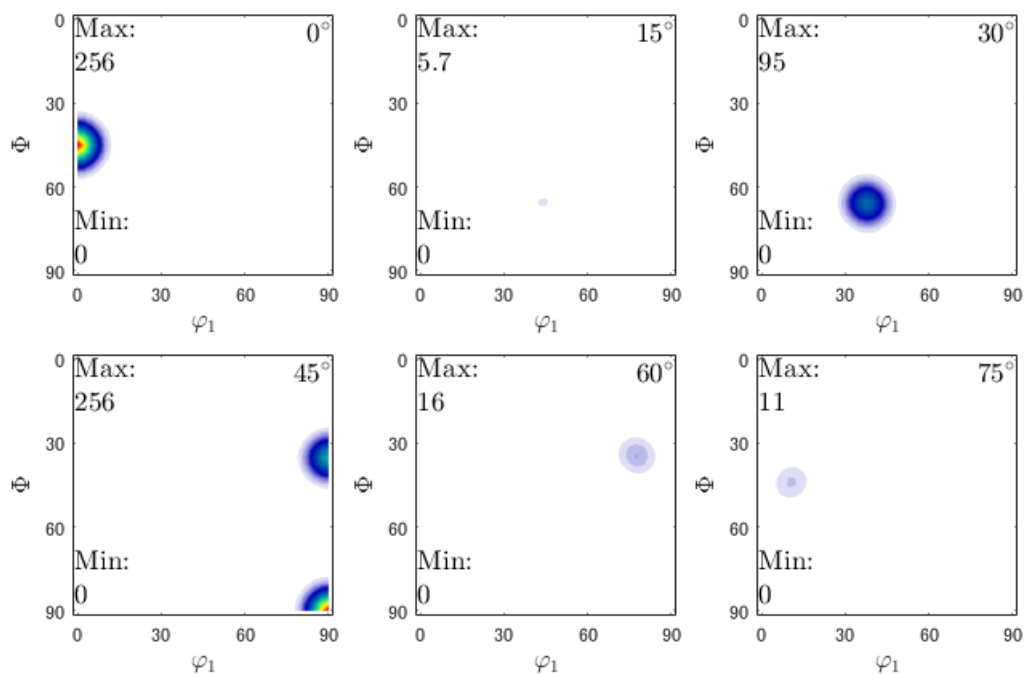


$$\text{goss} : \text{copper} = 178.5 : 89.9 \div 2$$

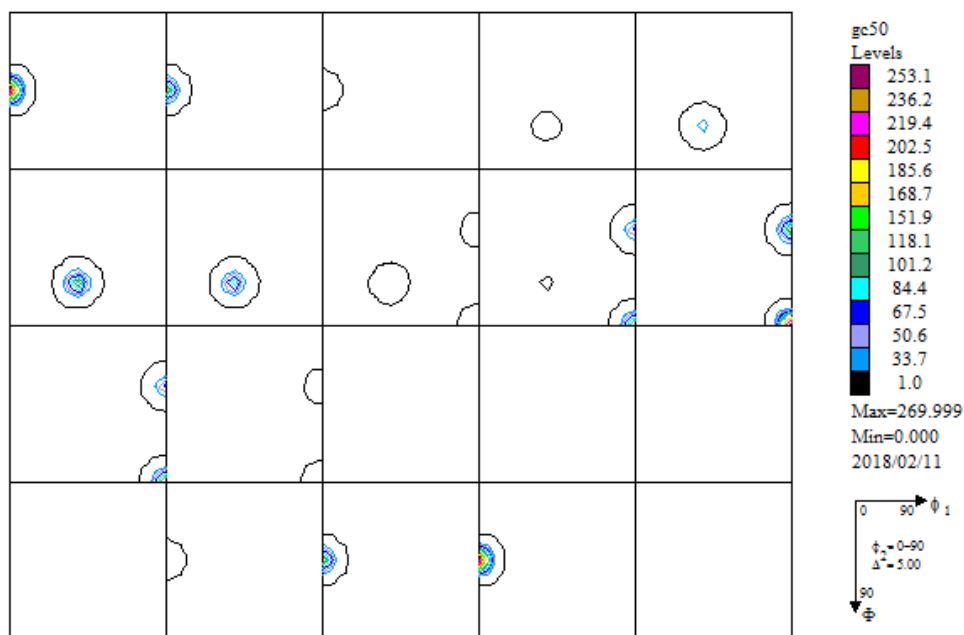
odf/3の値はLaboTexによるgauss関数半価幅10degに近い値になる。

よって、uniformODF()はLaboTexに近い計算を行うが、
calcODF()はHemonicで計算されている違いと考えられる。

unimodalODF()により半価幅 5 d e g で作成したODF 図と LaboTex の半価幅 10degODF 図を比較
 $odf=(odfg+odfc)/2$

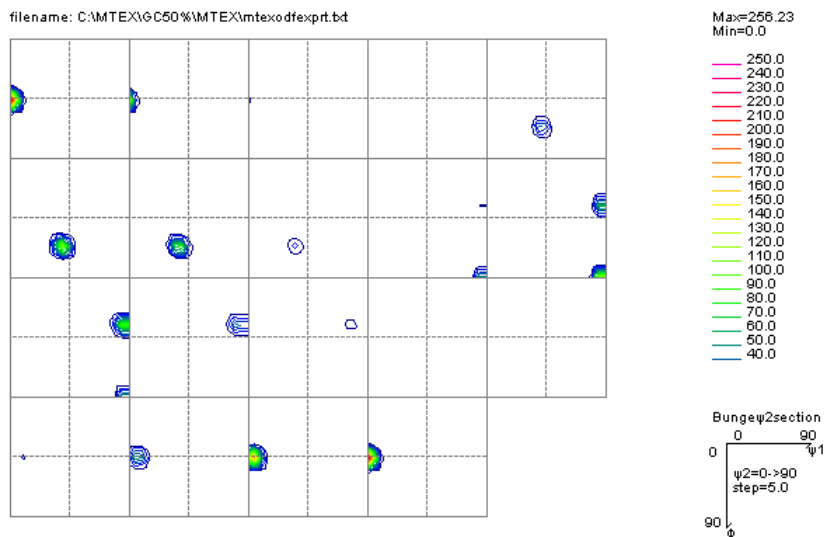


LaboTex で goss50% copper50%

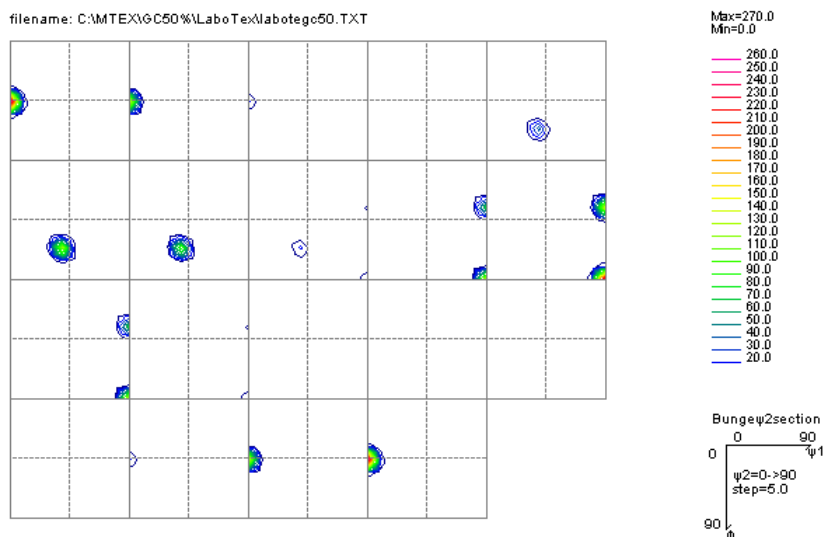


Exportし比較する。

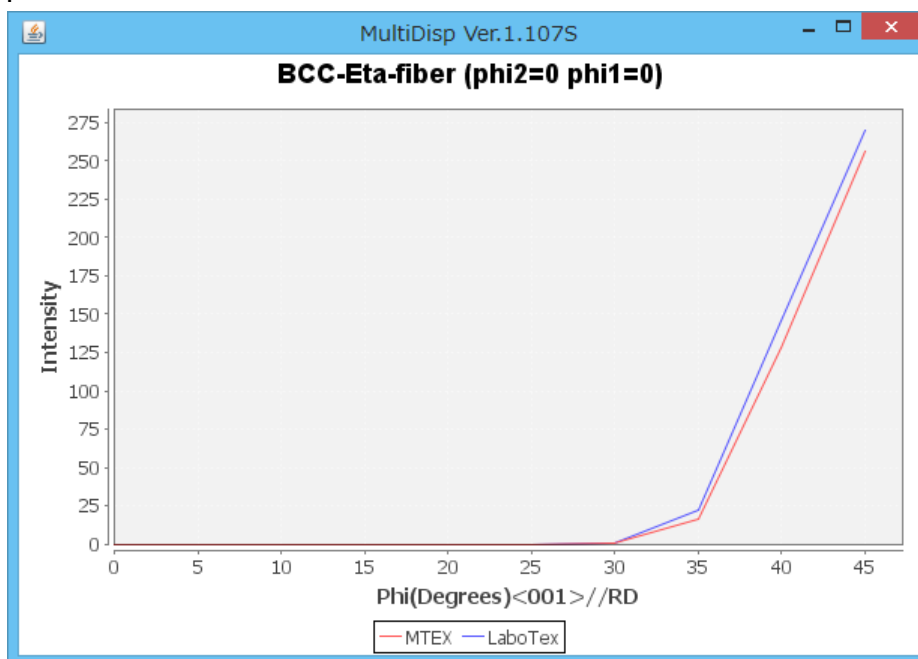
MTEX (MTEX の 1/4 対称では $\phi = 90$ のデータが存在しない)



LaboTex



BCCの η -Fiber で比較(GPODFDisplay の Fiber 解析で euler 角度の広がり进行比较)



ほぼ一致する。