

MTEXシュミレーションデータからVolume Fraction評価

2023年01月30日

HelperTex Office

1. 概要
2. データ作成
 2. 1 極点図
3. データ処理極点図
 3. 1 バックグラウンド処理なし、defocus 処理済
 3. 2 バックグラウンド処理あり、defocus 処理なし
 3. 3 バックグラウンド処理あり、defocus 処理済
4. MTEX処理
 4. 1 バックグラウンド処理なし、defocus 処理済
 4. 2 バックグラウンド処理あり、defocus 処理なし
 4. 3 バックグラウンド処理あり、defocus 処理済
 4. 4 MTEXまとめ
5. LaboTex処理
 5. 1 バックグラウンド処理なし、defocus 処理済
 5. 2 バックグラウンド処理あり、defocus 処理なし
 5. 3 バックグラウンド処理あり、defocus 処理済
 5. 4 LaboTexまとめ
6. newODF処理
 6. 1 バックグラウンド処理なし、defocus 処理済
 6. 2 バックグラウンド処理あり、defocus 処理なし
 6. 3 バックグラウンド処理あり、defocus 処理済
 6. 4 newODFまとめ
7. LaboTexVolumeFraction
 7. 1 バックグラウンド処理なし、defocus 処理済
 7. 2 バックグラウンド処理あり、defocus 処理なし
 7. 3 バックグラウンド処理あり、defocus 処理済
 7. 3. 1 全て（4方位）の方位指定
 7. 2. 2 3方位指定
 7. 3. 3 5方位指定
8. newODFVolumeFraction
 8. 1 バックグラウンド処理なし、defocus 処理済
 8. 2 バックグラウンド処理あり、defocus 処理なし
 8. 3 バックグラウンド処理あり、defocus 処理済
 8. 3. 1 全て（4方位）の方位指定
 8. 2. 2 3方位指定
 8. 3. 3 5方位指定

1. 概要

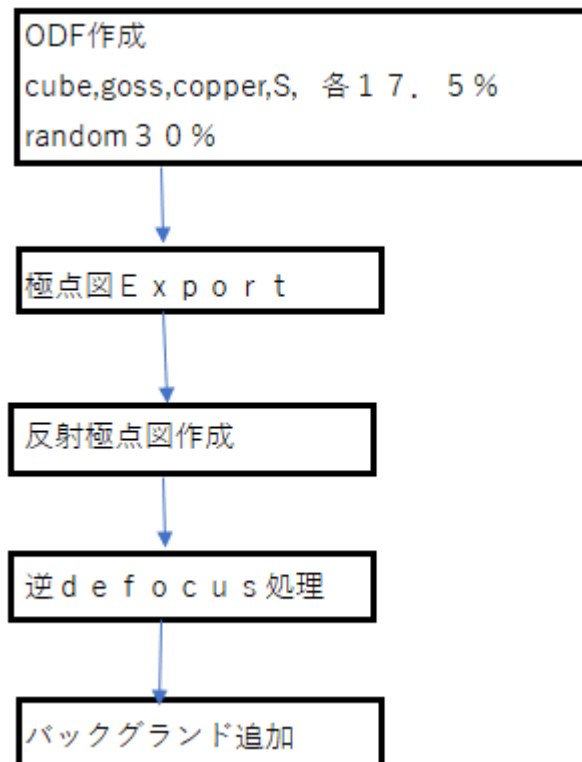
極点図から、方位密度や方位の定量（VF%）を行う事が増えています。

この機能を把握するため、極点処理におけるバックグラウンド除去、defocus処理が方位密度や定量に及ぼす影響や、VF%時指定方位数が足りない場合の影響をテストデータで評価しました。

2. データ作成

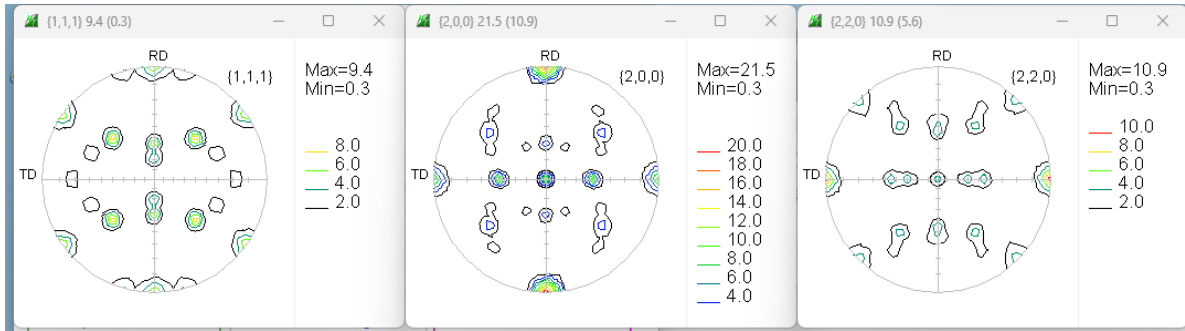
MTEXにより極点図作成

```
CS= crystalSymmetry('cubic')
SS = specimenSymmetry('1')
randomODF = uniformODF(CS,SS)
psi = vonMisesFisherKernel('HALFWIDTH',5*degree)
Ori1 = orientation.byMiller([1 0 0],[0 0 1],CS)
Ori2 = orientation.byMiller([1 1 2],[-1 -1 1],CS)
Ori3= orientation.byMiller([1 1 0],[0 0 1],CS)
Ori4 = orientation.byMiller([1 3 2],[6 -4 3],CS)
ODF=0.25* unimodalODF(Ori1,psi)+0.25* unimodalODF(Ori2,psi)+
    0.25* unimodalODF(Ori3,psi)+ 0.25* unimodalODF(Ori4,psi)
odf=0.7*randomODF+0.3*ODF
h = {Miller(1,1,1,CS),Miller(2,0,0,CS),Miller(2,2,0,CS)}
rpf=calcPoleFigure(odf,h)
```

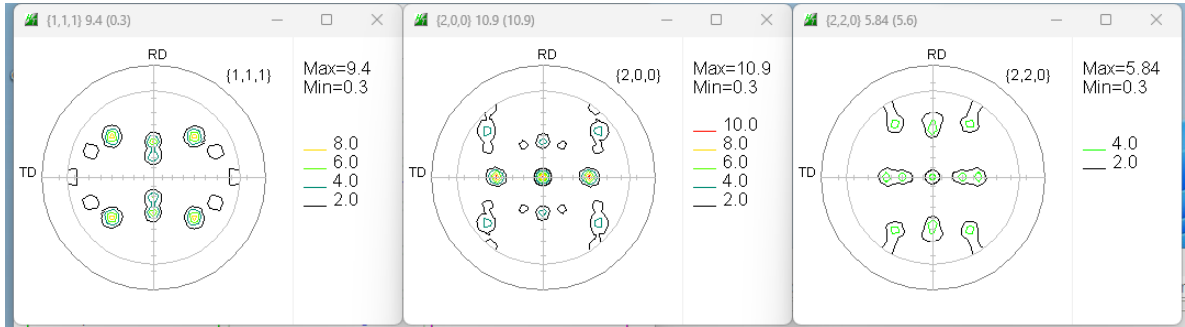


2. 1 極点図

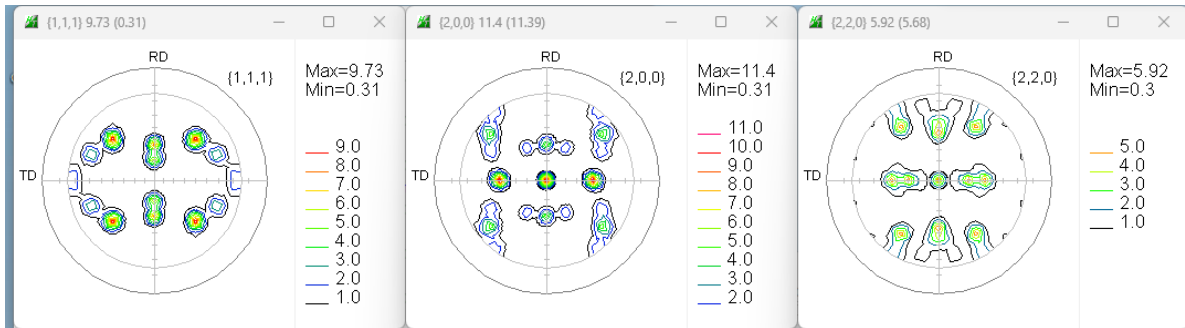
Exportされた極点図



反射極点図 (規格化なし)

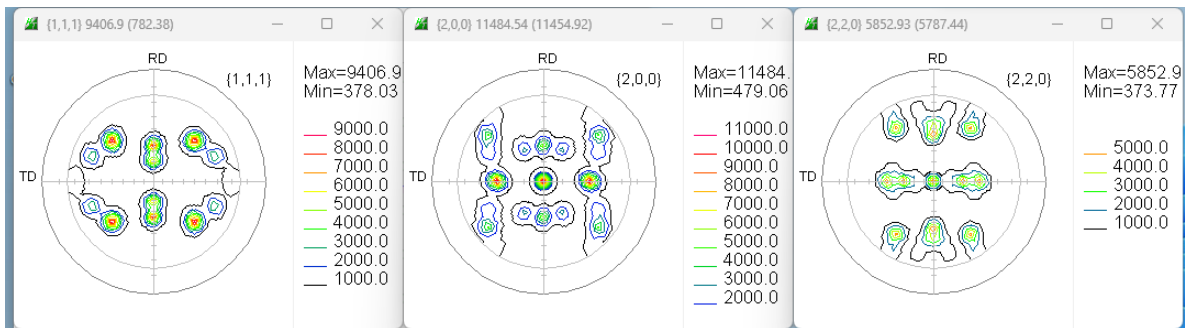


(規格化)



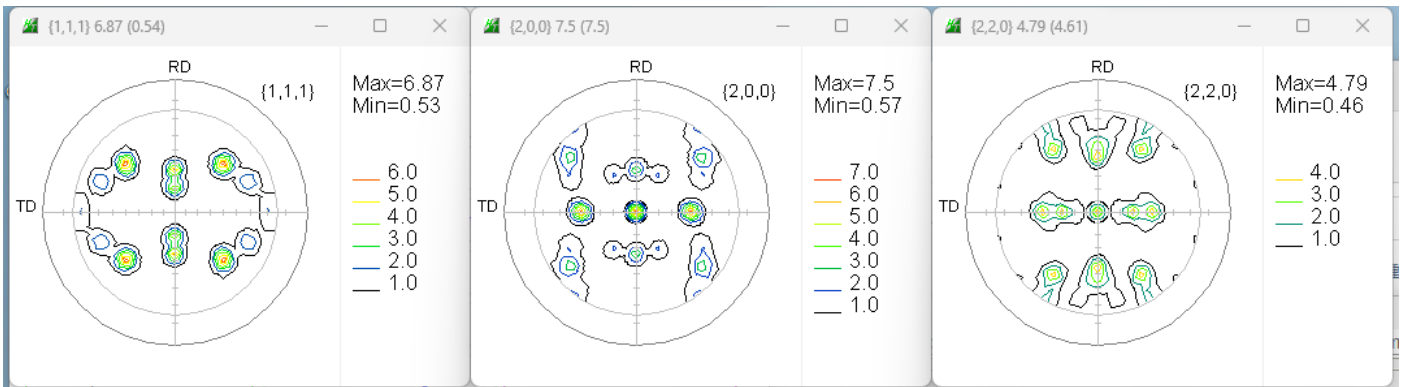
逆defocus+background追加 (規格化なし)

(解析に使用するデータ)

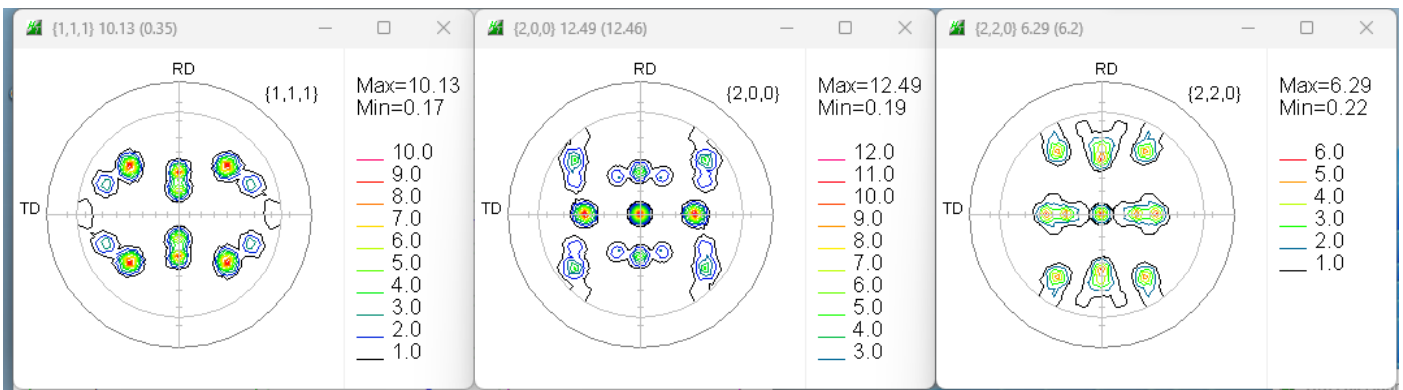


3. データ処理極点図 (規格化处理)

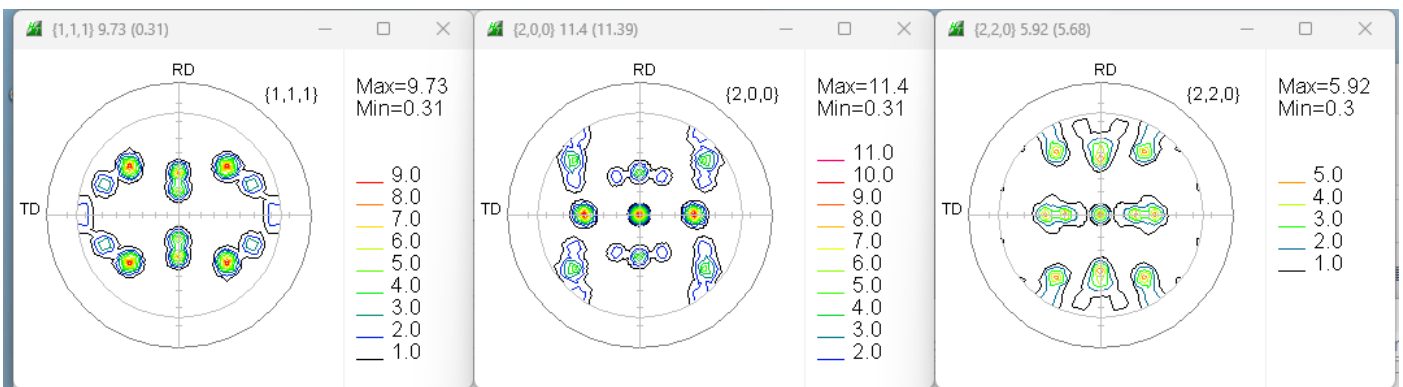
3. 1 バックグラウンド処理なし、defocus 処理済



3. 2 バックグラウンド処理あり、defocus 処理なし

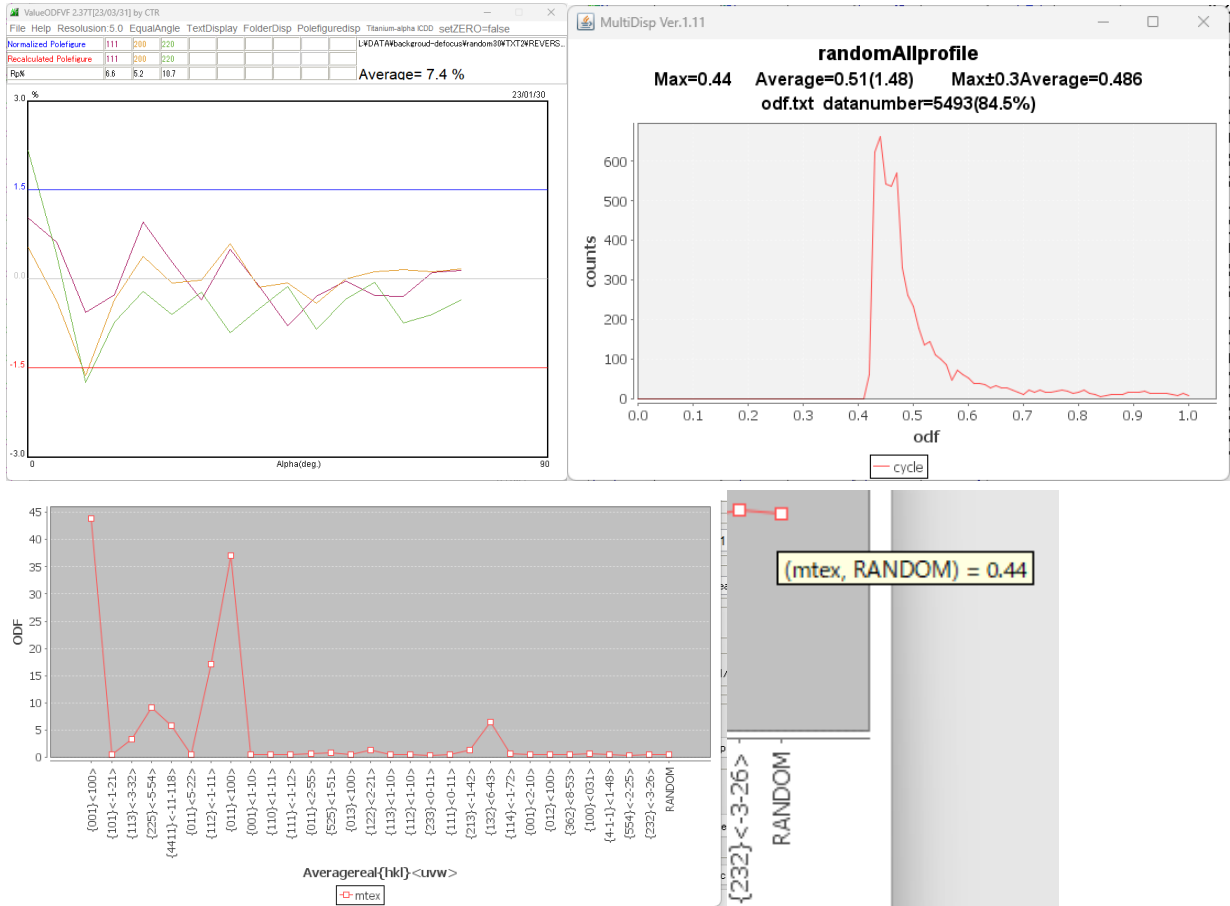


3. 3 バックグラウンド処理あり、defocus 処理済

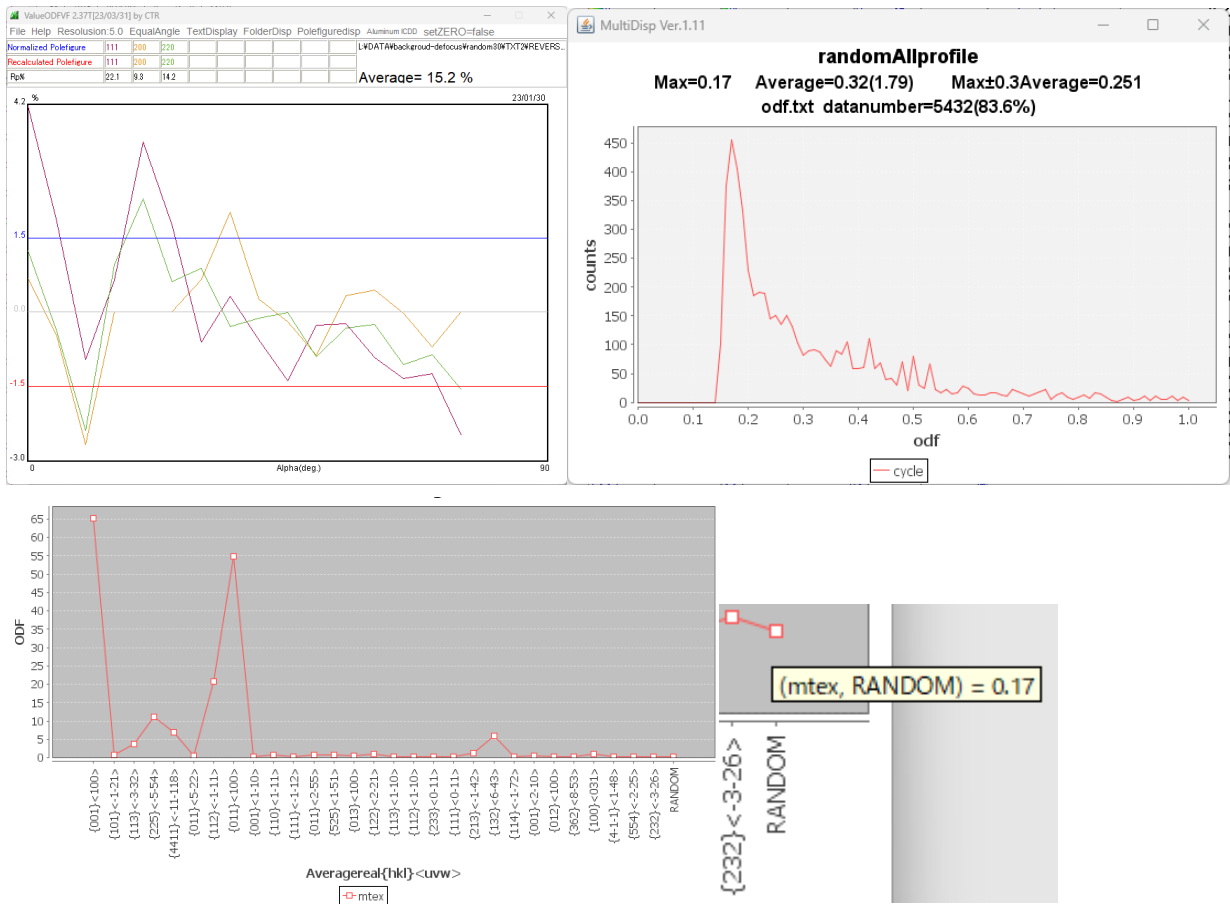


4. MTEX処理

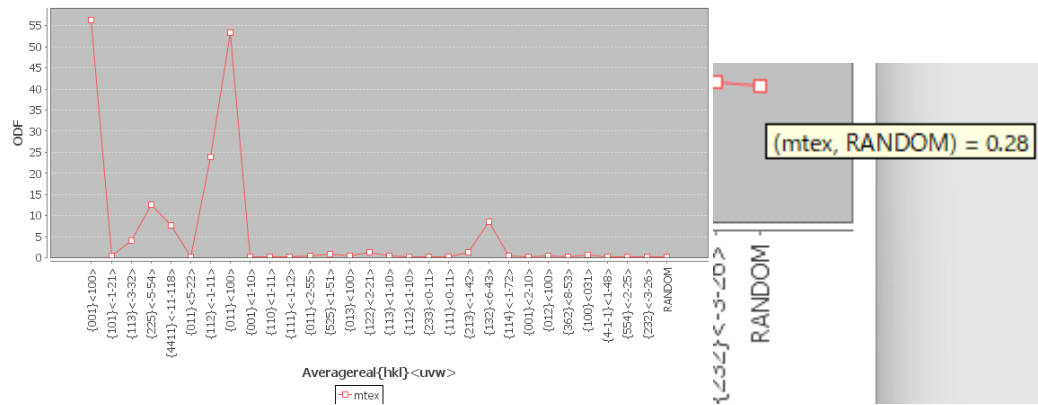
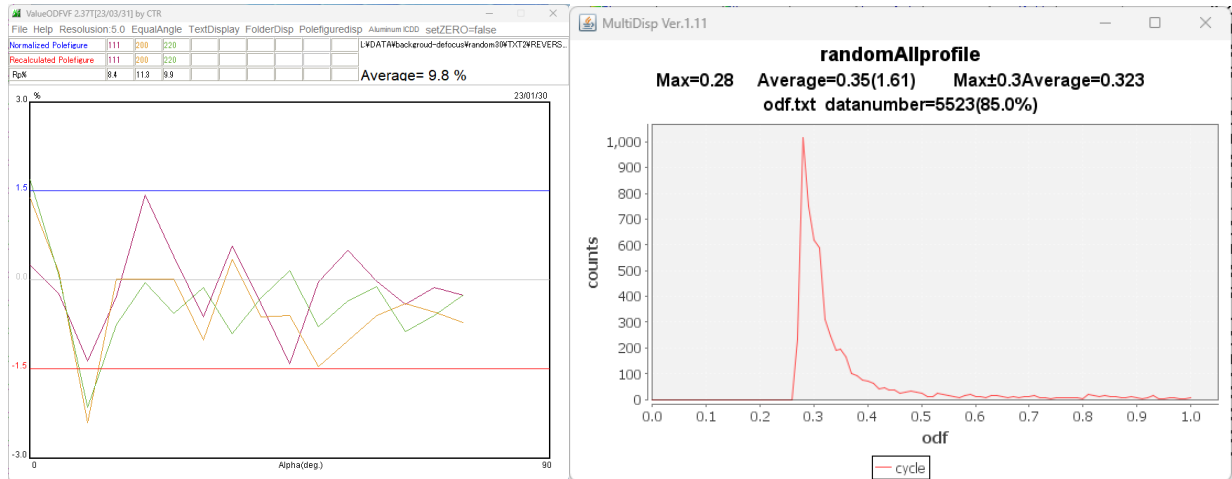
4.1 バックグラウンド処理なし、defocus処理済



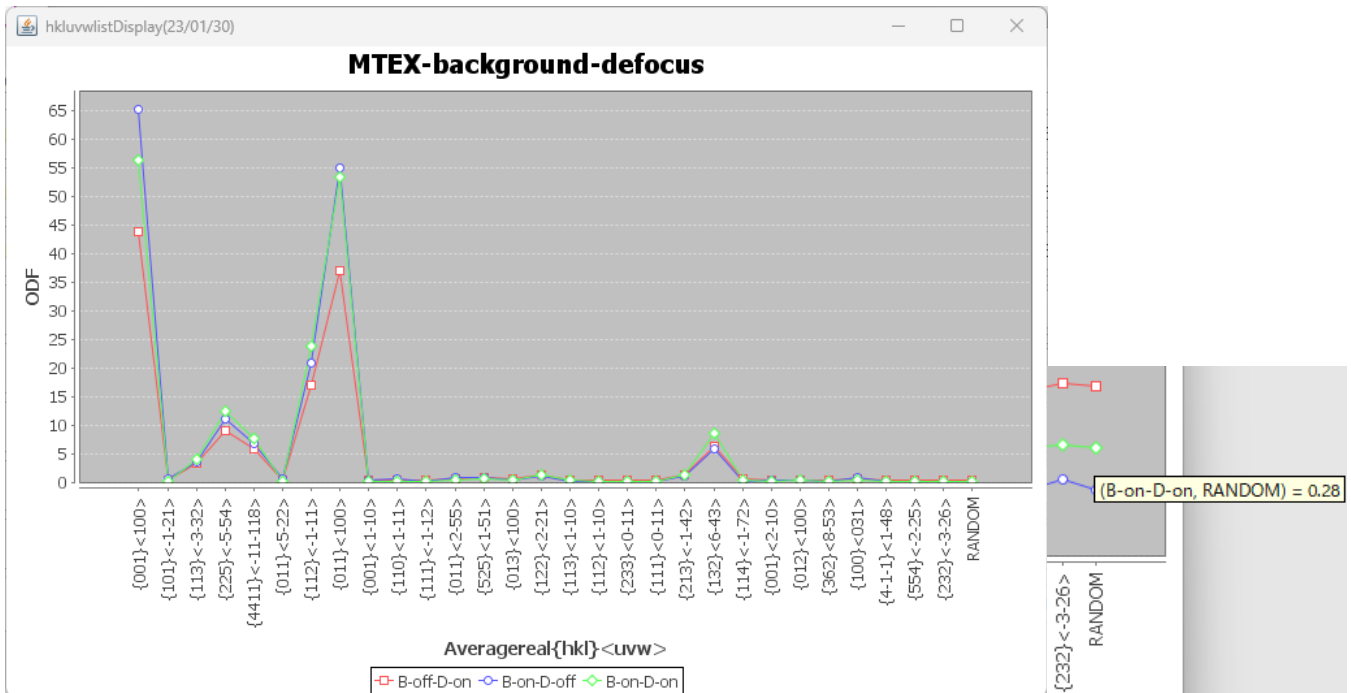
4.2 バックグラウンド処理あり、defocus処理なし



4. 3 バックグラウンド処理あり、defocus処理済



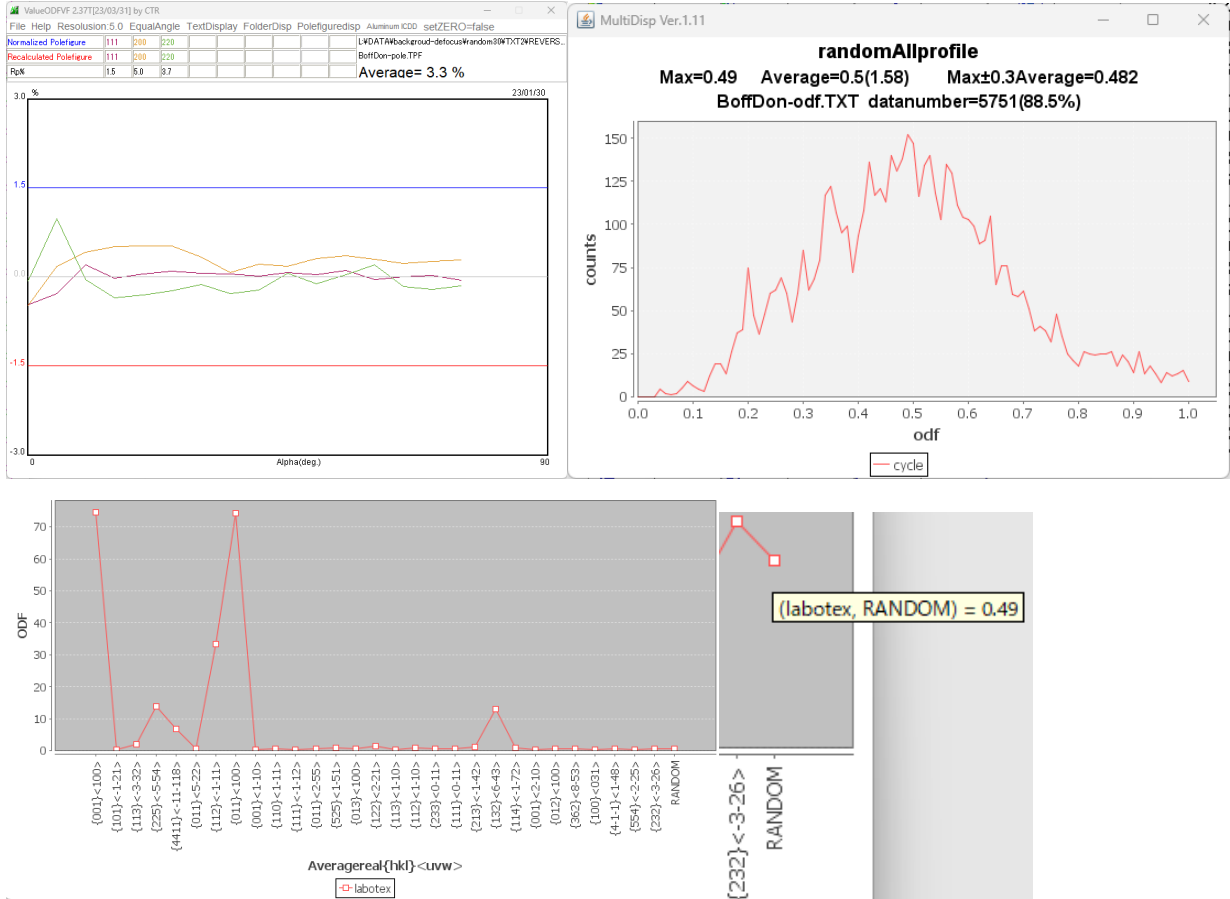
4. 4 MTEXまとめ



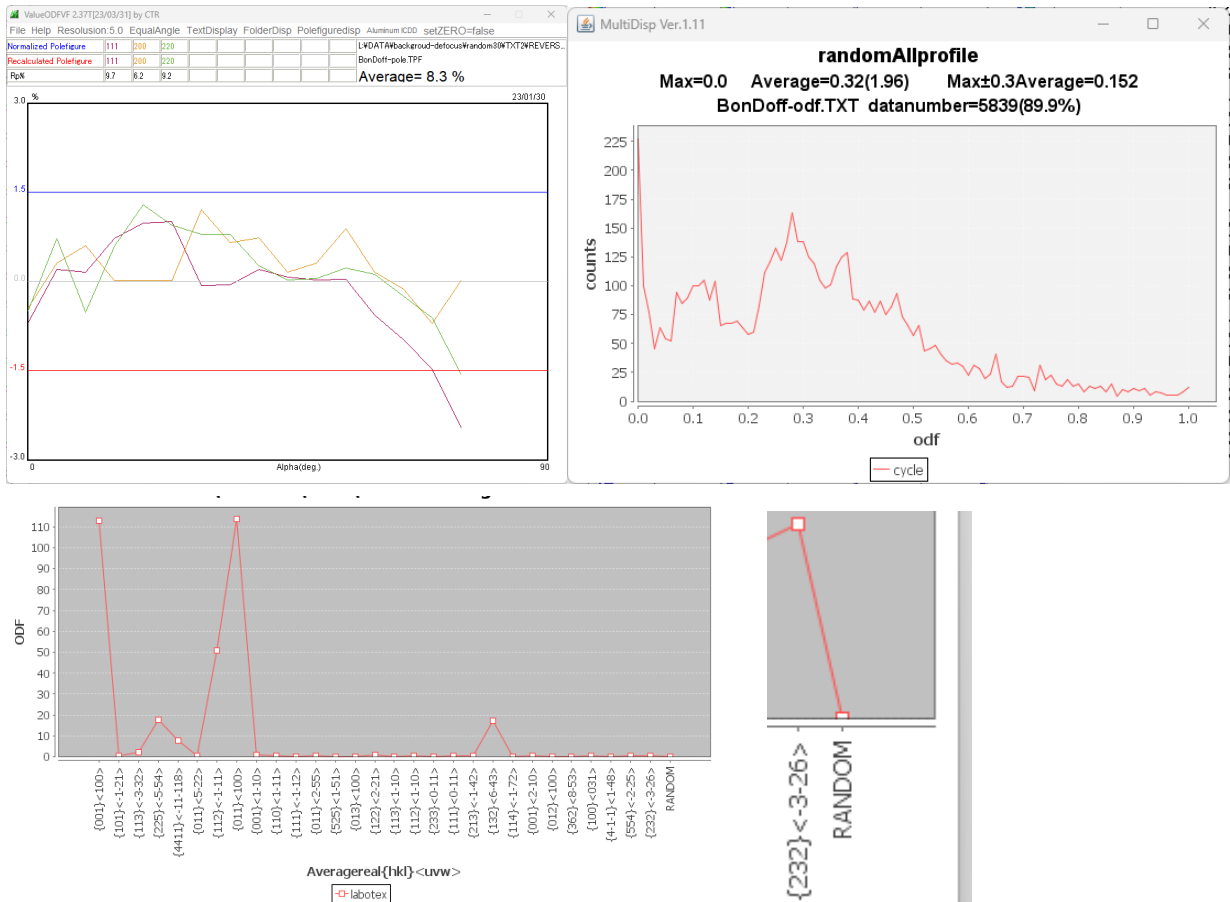
バックグラウンドは、方位密度と random%に大きく影響します。
 defocusは、cube方位とS方位へ大きく影響しています。

5. LaboTex処理

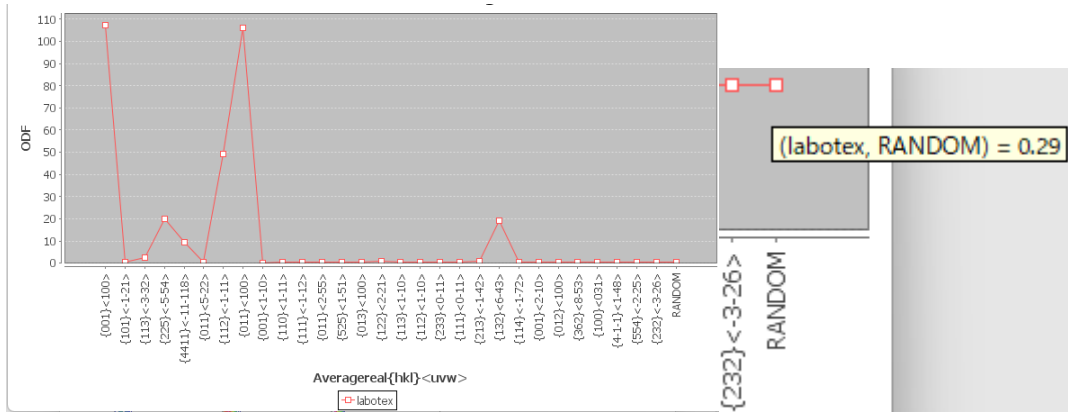
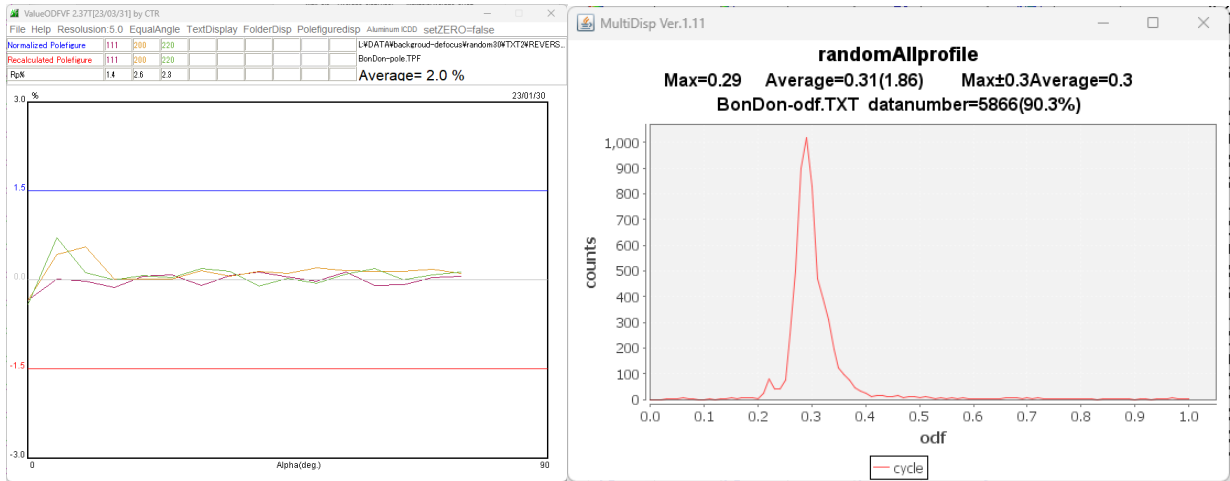
5.1 バックグラウンド処理なし、defocus処理済



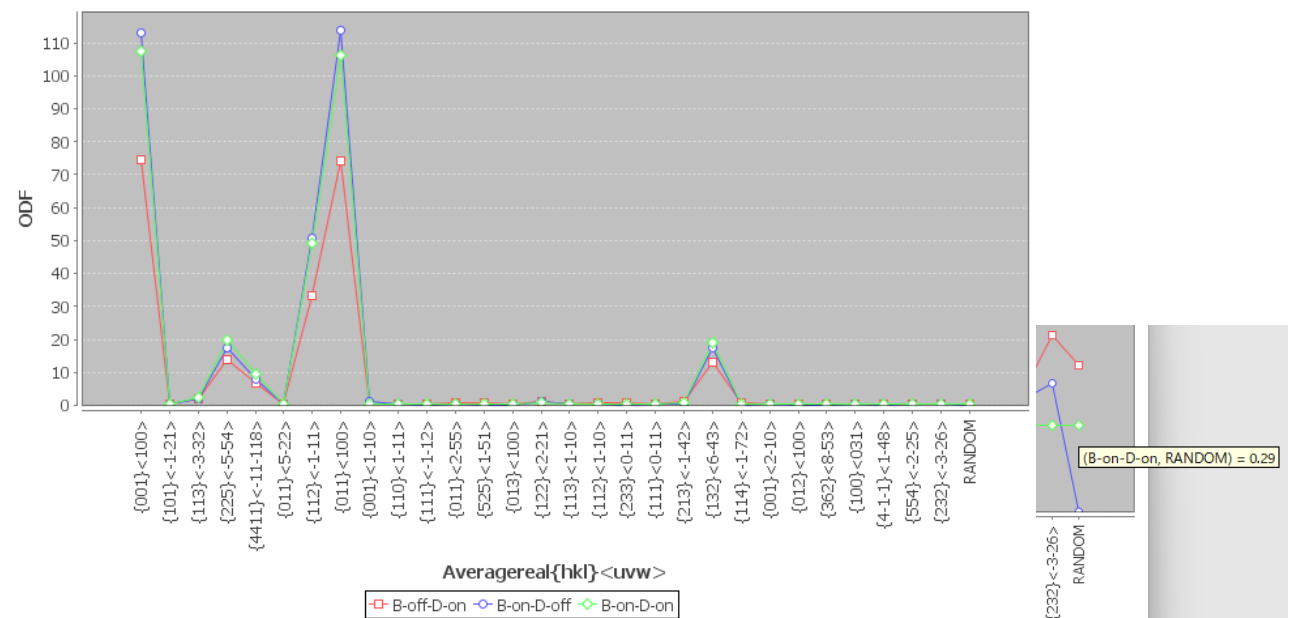
5.2 バックグラウンド処理あり、defocus処理なし



5.3 バックグラウンド処理あり、defocus 処理済



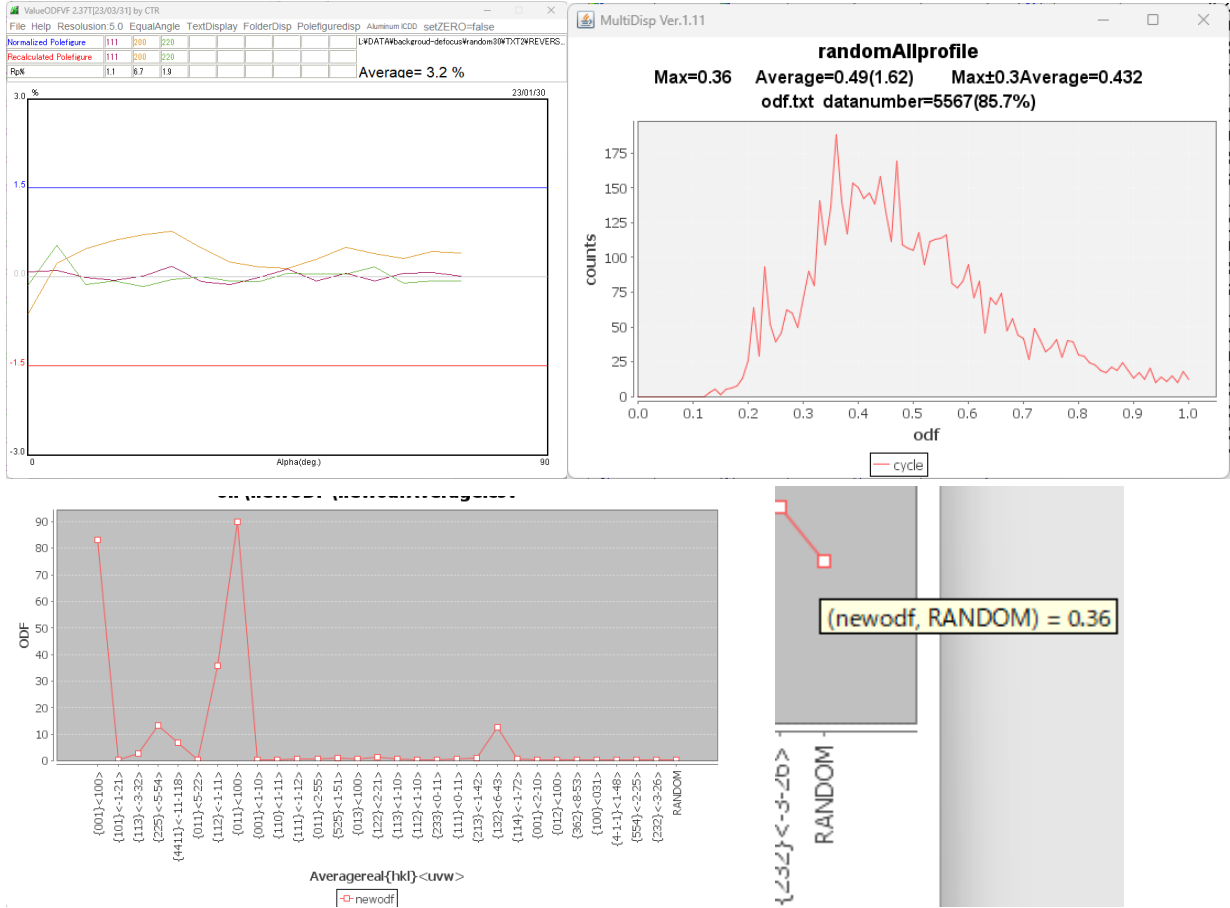
5.4 LaboTex まとめ



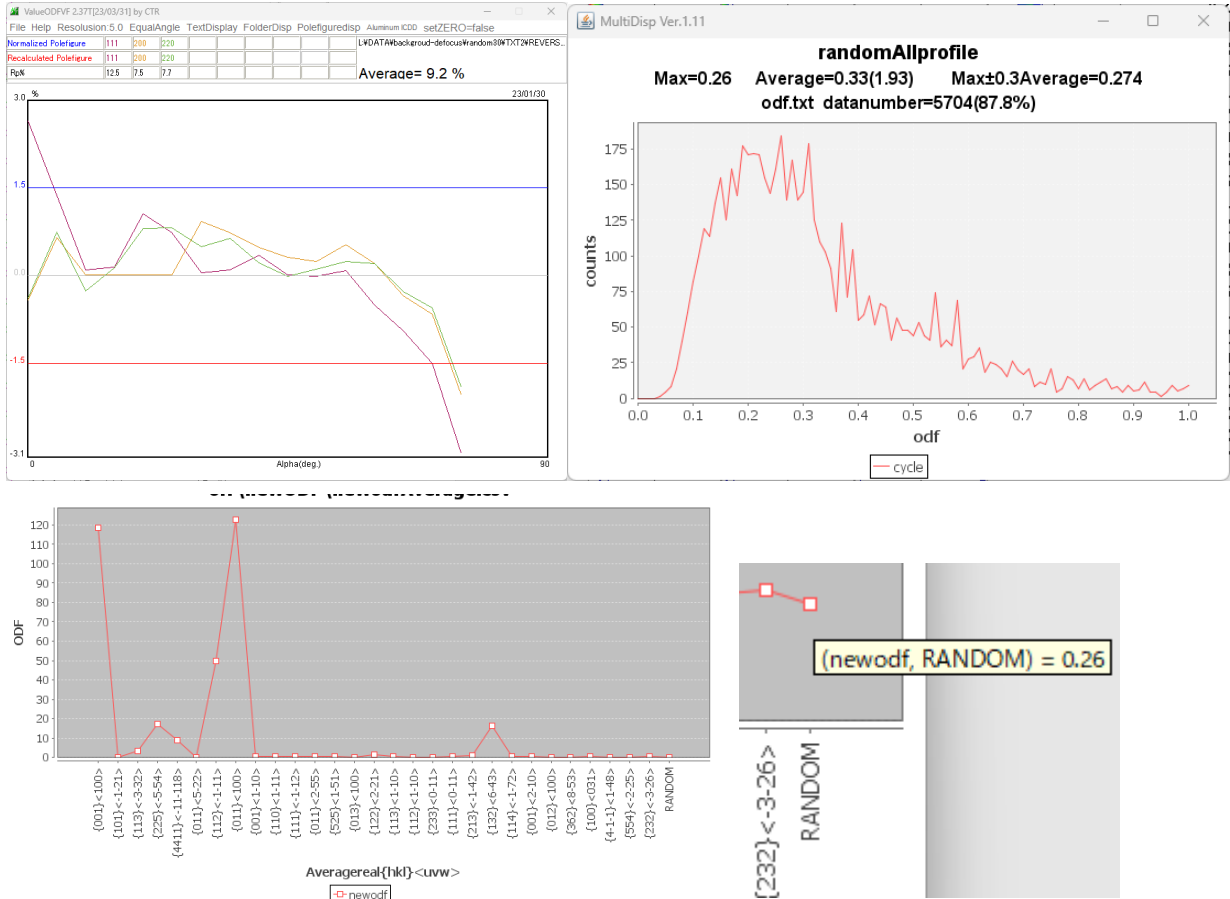
LaboTexでは、バックグラウンド除去あるいは、defocus 補正なしでは randomに大きく影響しています。

6. newODF 処理

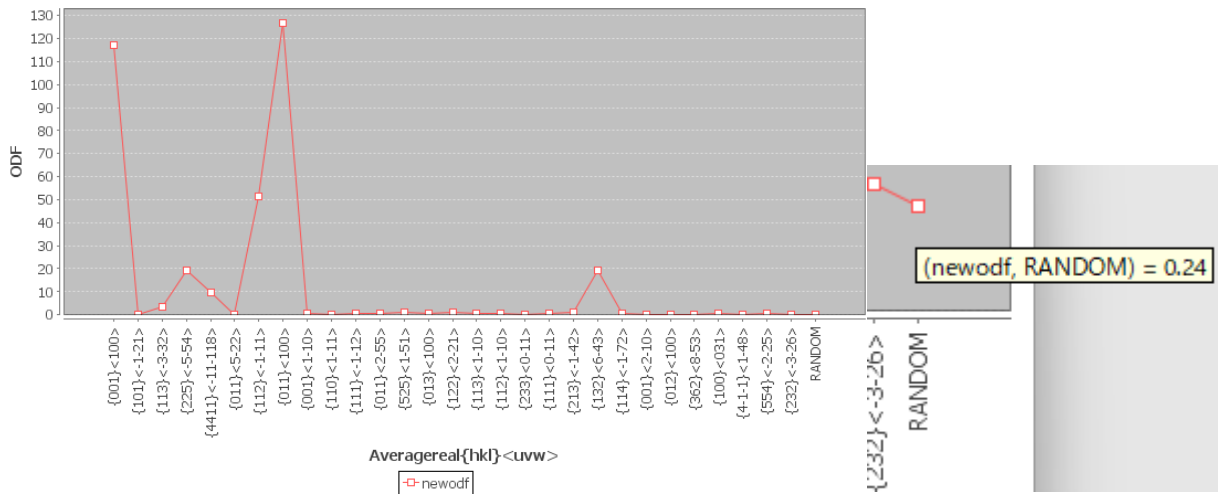
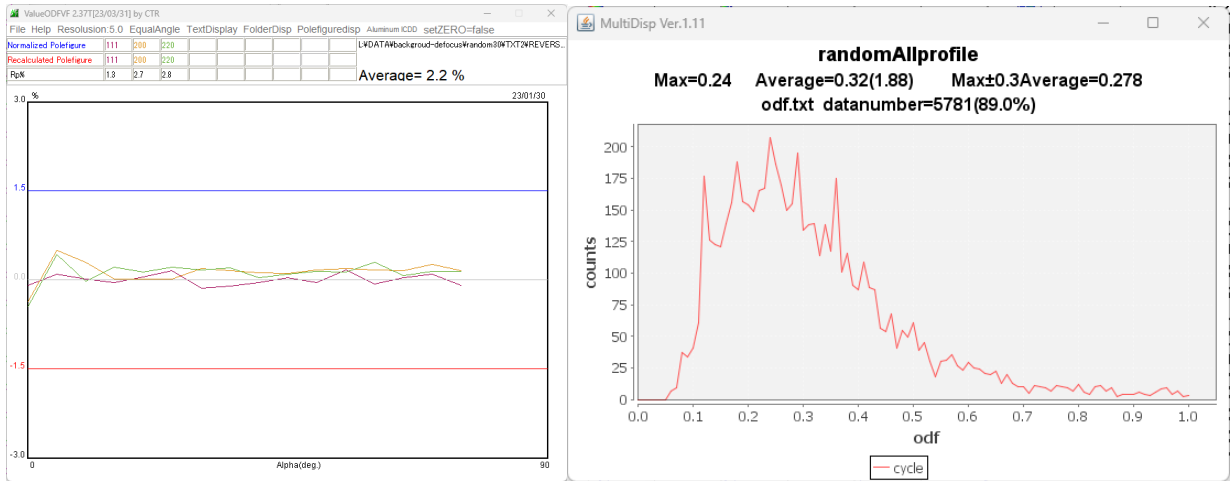
6.1 バックグラウンド処理なし、defocus 処理済



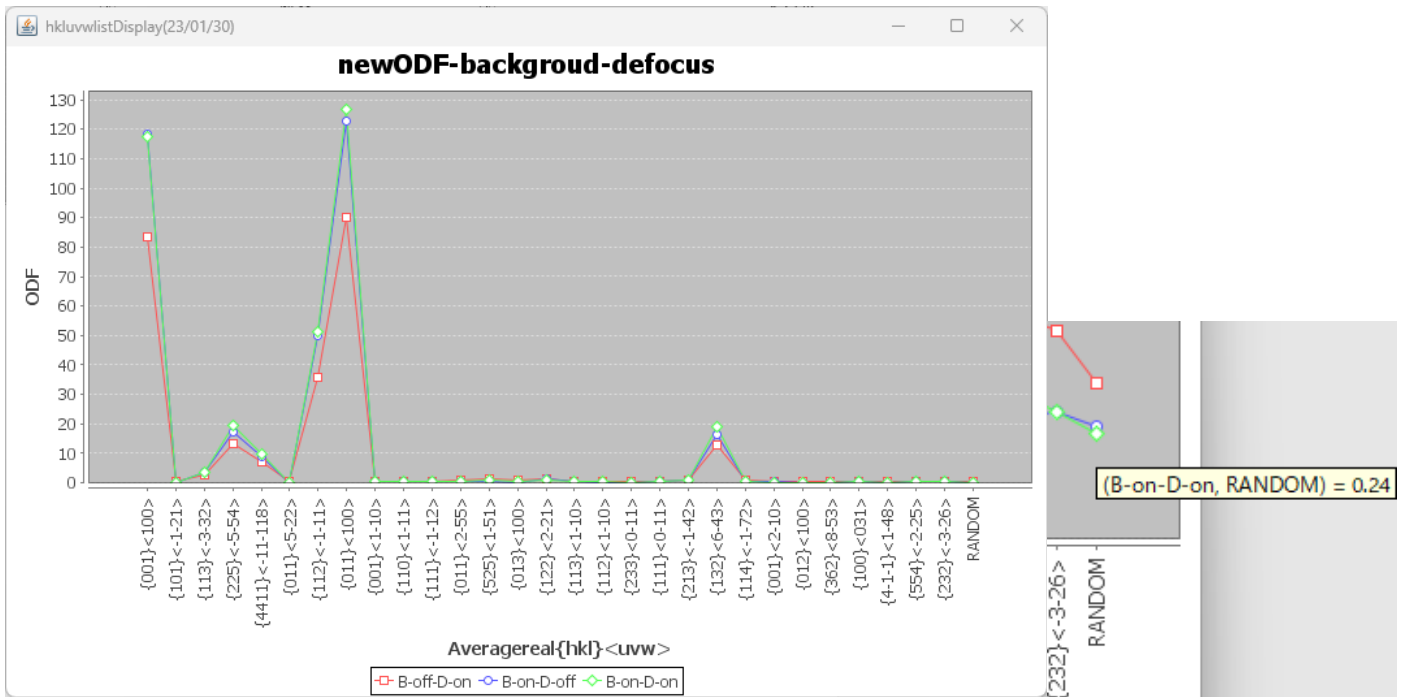
6.2 バックグラウンド処理あり、defocus 処理なし



6. 3 バックグラウンド処理あり、defocus 処理済



6. 4 newODF まとめ



randomlevelProfiledが安定しない
defocusの影響は少ないように思われる。

7. LaboTexVolumeFraction

7. 1 バックグラウンド処理なし、defocus処理済

Volume Fraction	FWHM Phi1	FWHM Phi	FWHM Phi2	Orientation
Component No 1	- Distribution :Gauss			
11.68	8.0	9.3	8.5	{ 0 0 1 } < 1 0 0 > cube
Component No 2	- Distribution :Gauss			
10.09	8.8	9.2	9.0	{ 1 1 0 } < 0 0 1 > goss
Component No 3	- Distribution :Gauss			
11.31	9.7	8.7	9.7	{ 1 1 2 } < 1 1 -1 > copper
Component No 4	- Distribution :Gauss			
0.70	17.7	20.8	21.8	{ 2 1 3 } < -3 -6 4 > S-3
Component No 5	- Distribution :Gauss			
7.58	7.1	8.7	8.4	{ 1 3 2 } < 6 -4 3 > S-1
Component No 6	- Distribution :Gauss			
5.34	18.3	9.5	16.1	{ 2 3 1 } < 3 -4 6 > S-2
Component No 7	- Distribution :Gauss			
0.19	21.8	13.1	12.7	{ 2 3 1 } < -3 -4 -6 > S-4
53.11	Background Volume Fraction			

L:\DATA\background-defocus#random30#TXT2#REVERS...
BoffDon-pole.TPF / BoffDon-VFODF-POle.TPF
Average= 2.3 %

7. 2 バックグラウンド処理あり、defocus処理なし

Volume Fraction	FWHM Phi1	FWHM Phi	FWHM Phi2	Orientation
Component No 1	- Distribution :Gauss			
10.50	9.2	9.2	9.0	{ 1 1 0 } < 0 0 1 > goss
Component No 2	- Distribution :Gauss			
11.86	8.0	9.4	8.5	{ 0 0 1 } < 1 0 0 > cube
Component No 3	- Distribution :Gauss			
11.38	9.5	8.7	9.5	{ 1 1 2 } < 1 1 -1 > copper
Component No 4	- Distribution :Gauss			
3.14	14.6	9.7	8.2	{ 2 3 1 } < 3 -4 6 > S-2
Component No 5	- Distribution :Gauss			
2.92	11.0	11.1	13.2	{ 2 3 1 } < -3 -4 -6 > S-4
Component No 6	- Distribution :Gauss			
3.23	11.7	9.3	12.2	{ 2 1 3 } < -3 -6 4 > S-3
Component No 7	- Distribution :Gauss			
4.00	11.9	11.4	12.8	{ 1 3 2 } < 6 -4 3 > S-1
52.97	Background Volume Fraction			

L:\DATA\background-defocus#random30#TXT2#REVERS...
BonDoff-pole.TPF / BonDoff-VFODF.TPF
Average= 19.0 %

7. 3 バックグラウンド処理あり、defocus処理済

7. 3. 1 全て（4方位）の方位指定

Volume Fraction	FWHM Phi1	FWHM Phi	FWHM Phi2	Orientation
Component No 1	- Distribution :Gauss			
16.89	8.3	9.0	8.4	{ 0 0 1 } < 1 0 0 > cube
Component No 2	- Distribution :Gauss			
15.60	9.3	9.3	9.2	{ 1 1 0 } < 0 0 1 > goss
Component No 3	- Distribution :Gauss			
16.14	9.3	8.6	9.0	{ 1 1 2 } < 1 1 -1 > copper
Component No 4	- Distribution :Gauss			
1.91	19.3	13.3	17.3	{ 2 1 3 } < -3 -6 4 > S-3
Component No 5	- Distribution :Gauss			
10.37	8.1	7.5	8.1	{ 1 3 2 } < 6 -4 3 > S-1
Component No 6	- Distribution :Gauss			
2.60	14.9	16.0	18.0	{ 2 3 1 } < 3 -4 6 > S-2
Component No 7	- Distribution :Gauss			
5.99	15.9	7.9	14.7	{ 2 3 1 } < -3 -4 -6 > S-4
30.49	Background Volume Fraction			

L:\DATA\background-defocus#random30#TXT2#REVERS...
BonDon-pole.TPF / BonDon-VFODF.TPF
Average= 2.7 %

7. 3. 2 3方位指定

Volume Fraction	FWHM Phi1	FWHM Phi	FWHM Phi2	Orientation
Component No 1	- Distribution :Gauss			
19.69	8.4	10.3	8.4	{ 0 0 1 } < 1 0 0 > cube
Component No 3	- Distribution :Gauss			
21.05	11.4	8.4	10.1	{ 1 1 2 } < 1 1 -1 > copper
Component No 4	- Distribution :Gauss			
5.80	11.1	5.5	11.4	{ 2 1 3 } < -3 -6 4 > S-3
Component No 5	- Distribution :Gauss			
5.40	20.6	8.6	13.8	{ 1 3 2 } < 6 -4 3 > S-1
Component No 6	- Distribution :Gauss			
10.06	9.1	8.8	8.8	{ 2 3 1 } < 3 -4 6 > S-2
Component No 7	- Distribution :Gauss			
5.80	16.5	10.5	18.6	{ 2 3 1 } < -3 -4 -6 > S-4
32.19	Background Volume Fraction			

L:\DATA\background-defocus#random30#TXT2#REVERS...
BonDon-pole.TPF / BonDonVFODF3.TPF
Average= 43.6 %

7. 3. 3 5方位指定

Component No 1	- Distribution :Gauss	16.92	8.3	9.1	8.5	{ 0 0 1}< 1 0 0>	cube
Component No 2	- Distribution :Gauss	15.65	9.3	9.3	9.1	{ 1 1 0}< 0 0 1>	goss
Component No 3	- Distribution :Gauss	16.05	9.4	8.5	8.9	{ 1 1 2}< 1 1 -1>	copper
Component No 4	- Distribution :Gauss	3.94	14.3	9.6	12.9	{ 2 1 3}< -3 -6 4>	S-3
Component No 5	- Distribution :Gauss	4.92	11.2	9.0	10.4	{ 1 3 2}< 6 -4 3>	S-1
Component No 6	- Distribution :Gauss	8.67	7.8	5.4	8.2	{ 2 3 1}< 3 -4 6>	S-2
Component No 7	- Distribution :Gauss	2.97	14.2	12.8	15.1	{ 2 3 1}< -3 -4 6>	S-4
Component No 8	- Distribution :Gauss	0.75	20.5	16.7	18.1	{ 1 1 0}< 1 -1 2>	brass
30.12	Background Volume Fraction						

L:\DATA\background-defocus\random30\TX\T2\REVERS...
 BonDon-pole.TPF / BonDon-VFOD\F5.TPF

Average= 2.2 %

8. newODFVolumeFraction

8. 1 バックグラウンド処理なし、defocus処理済

コンポーネント RP因子=3.15 ステータス: ●

N	タイプ	名称	色	極点図上に表示	方位	体積分率(%)
▶ 1	ピーク	S		<input checked="" type="checkbox"/>	(1 3 2)[6 -4 3]	11.81
2	ピーク	Goss		<input checked="" type="checkbox"/>	(0 1 1)[1 0 0]	13.51
3	ピーク	Cube		<input checked="" type="checkbox"/>	(0 0 1)[1 0 0]	10.91
4	ピーク	Copper		<input checked="" type="checkbox"/>	(1 2 1)[1 -1 1]	11.71

Average= 2.2 %

L:\DATA\background-defocus#random30#TXT2#REVERS...

8. 2 バックグラウンド処理あり、defocus処理なし

ランダム の分率 最小: 最大: フィッティング:

体積分率 (%): 32.00

コンポーネント

N	タイプ	名称	色	極点図上に表示	方位	体積分率(%)
▶ 1	ピーク	S		<input checked="" type="checkbox"/>	(1 3 2)[6 -4 3]	14.30
2	ピーク	Goss		<input checked="" type="checkbox"/>	(0 1 1)[1 0 0]	19.10
3	ピーク	Cube		<input checked="" type="checkbox"/>	(0 0 1)[1 0 0]	18.50
4	ピーク	Copper		<input checked="" type="checkbox"/>	(1 2 1)[1 -1 1]	16.10

Average= 2.2 %

RP因子=8.33 ステータス: ●

L:\DATA\background-defocus#random30#TXT2#REVERS...

8. 3 バックグラウンド処理あり、defocus処理済

8. 3. 1 全て (4方位) の方位指定

コンポーネント定義

ランダム の分率 最小: 最大: フィッティング:

体積分率 (%): 30.00

コンポーネント

N	タイプ	名称	色	極点図上に表示	方位	体積分率(%)
▶ 1	ピーク	S		<input checked="" type="checkbox"/>	(1 3 2)[6 -4 3]	17.50
2	ピーク	Goss		<input checked="" type="checkbox"/>	(0 1 1)[1 0 0]	17.50
3	ピーク	Cube		<input checked="" type="checkbox"/>	(0 0 1)[1 0 0]	17.50
4	ピーク	Copper		<input checked="" type="checkbox"/>	(1 2 1)[1 -1 1]	17.50

Average= 0.1 %

RP因子=0.18 ステータス: ●

L:\DATA\background-defocus#random30#TXT2#REVERS...

8. 2. 2 3方位指定

コンポーネント定義

ランダム の分率 最小: 最大: フィッティング:

体積分率 (%): 39.00

コンポーネント

N	タイプ	名称	色	極点図上に表示	方位	体積分率(%)
1	ピーク	S		<input checked="" type="checkbox"/>	(1 3 2)[6 -4 3]	20.10
2	ピーク	Cube		<input checked="" type="checkbox"/>	(0 0 1)[1 0 0]	20.30
▶ 3	ピーク	Copper		<input checked="" type="checkbox"/>	(1 2 1)[1 -1 1]	20.60

Average= 80.6 %

RP因子=14.94 ステータス: ●

L:\DATA\background-defocus#random30#TXT2#REVERS...

8. 3. 3 5方位指定

N	タイプ	名称	色	極点図上に表示	方位	体積分率(%)
1	ピーク	S		<input checked="" type="checkbox"/>	(1 3 2)[6 -4 3]	17.50
2	ピーク	Cube		<input checked="" type="checkbox"/>	(0 0 1)[1 0 0]	17.50
▶ 3	ピーク	Copper		<input checked="" type="checkbox"/>	(1 2 1)[1 -1 1]	17.50
4	ピーク	Goss		<input checked="" type="checkbox"/>	(0 1 1)[1 0 0]	17.50
5	ピーク	Brass		<input checked="" type="checkbox"/>	(0 1 1)[2 -1 1]	0.60

Average= 0.1 %

RP因子=0.23 ステータス: ●

L:\DATA\background-defocus#random30#TXT2#REVERS...

まとめ

	BG	Defocus	Cube	Goss	Copper	S	Brass	sum	random	CTRRp%
LaboTex		○	11.68	10.09	11.31	13.81		46.89	53.11	2.3
	○		11.86	10.5	11.38	13.29		47.03	52.97	19
	○	○	16.89	15.6	16.14	20.87		69.5	30.5	2.7
	○	○	19.69		21.05	27.06		67.8	32.2	43.6
	○	○	15.92	15.65	16.05	20.5	0.75	68.87	31.13	2.2
newODF		○	10.91	13.51	11.71	11.81		47.94	52.06	2.2
	○		18.5	19.1	16.1	14.3		68	32	2.2
	○	○	17.5	17.5	17.5	17.5		70	30	0.1
	○	○	20.3	20.6		20.1		61	39	80.6
	○	○	17.5	17.5	17.5	17.5	0.6	70.6	29.4	0.1

Volume Fraction解析では、バックグラウンド、defocusは重要である。

newODFは、バックグラウンド、defocus処理を行い、方位を全て指定出来れば、正解が計算出来る。但し、random量が予め判明していれば、Volume Fraction結果のrandomとRp%により正確に判断できるが、WIMVは6項の結果からrandom量の判定は難しい。

LaboTexやMTEXとの組み合わせが必要になる。

通常、指定できる方位数が足りない状況で定量が行われている。(上記データの赤い部分)

簡易的にLaboTex **Quantitative Analysis - Integration Methods**

