

各種 ODF 解析ソフトウェア

2023年06月09日

HelperTex Office

概要

XRD, EBSD測定データからODF解析が行われる。

本資料では、各種ODF解析ソフトウェアの紹介と特徴を比較してみます。

扱うODFソフトは、

LaboTex, MTEX, newODF, popLA, StandardODF, CTRODF

特徴

	LaboTex	MTEX	newODF		popLA (DOS)		StdODF	CTRODF
解析手法	ADC	Hermonic	WIMV	Component	Hermonic	WIMV	Hermonic	Hermonic
晶系	All	All	All	All	All	All	Cubic	Cubic
XRD	○	○	○	○	×	×	×	×
EBSD	○	○	×	×	×	×	×	×
Orthorhombic	○	○	○	○	○	○	○	○
Triclinic	○	○	△	△	△	△	×	×
Modelling	○	○	×	×	×	×	×	×
VF%	○	×	×	○	×	×	×	×
Fiber	○	○	×	×	×	×	×	×
Comparison	○	×	×	×	×	×	×	×
Schmid	×	○	×	×	×	×	×	×
料金	有料	無料	有料	有料	無料	無料	有料	無料

LaboTex

LaboSoft 社製、ゴーストの少ない解析であるが、費用が高い

MTEX

MATLAB の環境、無償で使用可能

newODF

rigaku-SmartLab 環境で使用可能

popLA

DOS 環境でコマンドによる計算、計算結果は、CTR ソフトウェアでサポート

StandardODF

日本国内で普及している。1 / 4 対称極点図に対応

CTRODF

ODF 解析の流れを理解するための練習用ソフトウェア

以下に MTEX で作成した極点図から各種 ODF 解析の比較を行います。

ODF 密度、再計算極点図最大値、Rp %、random レベル、VF%

MT E Xの極点図のシュミレーション

CS= crystalSymmetry('cubic')

SS = specimenSymmetry('1')

Ori1 = orientation.byMiller([1 0 0],[0 0 1],CS)

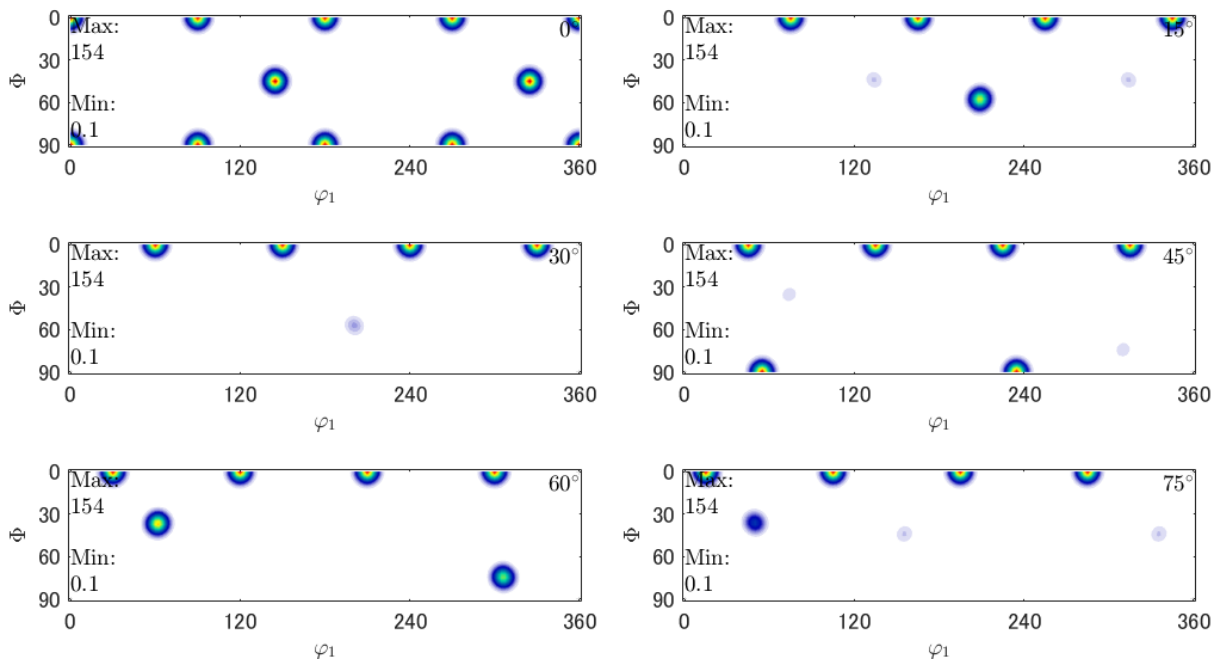
Ori2 = orientation.byMiller([1 1 0],[1 -1 2],CS)

Ori3 = orientation.byMiller([1 3 2],[6 -4 3],CS)

psi = vonMisesFisherKernel('HALFWIDTH',5*degree)

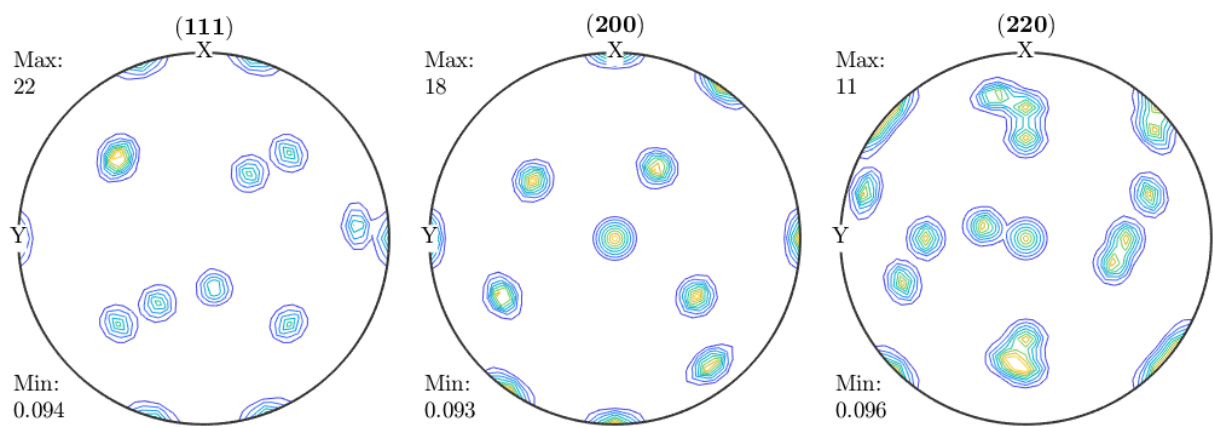
random = uniformODF(CS,SS)

odf=0.3* unimodalODF(Ori1,psi)+0.3* unimodalODF(Ori2,psi)+0.3* unimodalODF(Ori3,psi)+0.1*random

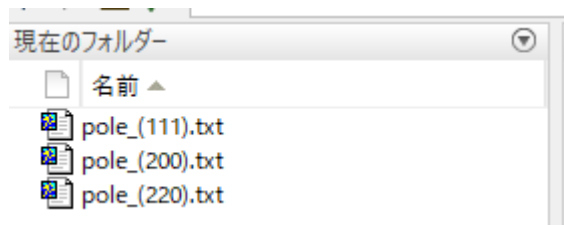


h = {Miller(1,1,1,CS),Miller(2,0,0,CS),Miller(2,2,0,CS)}

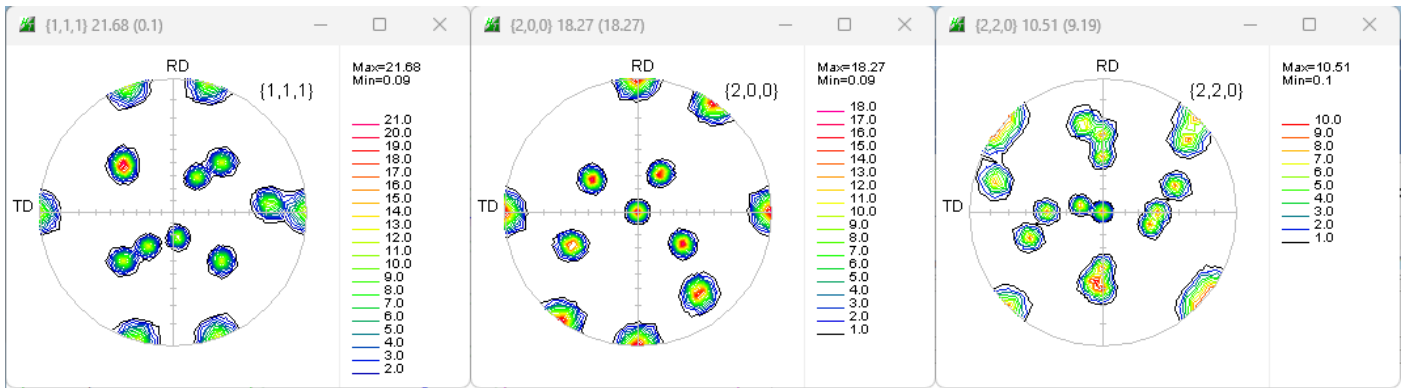
rpf=calcPoleFigure(odf,h)



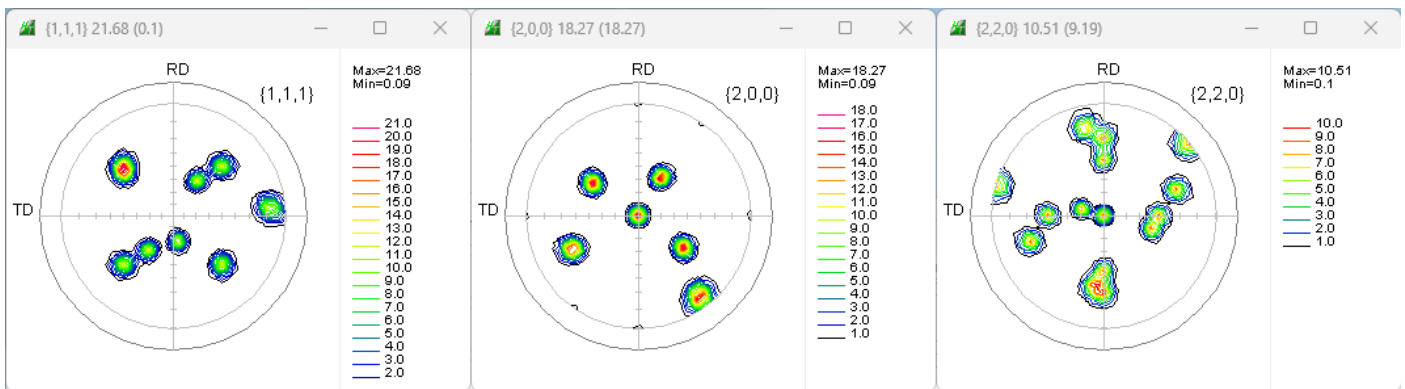
極点図を Export し、反射極点図として各種 ODF で解析



Export 極点図



反射極点図



比較結果

	LaboTex	MTEX	newODF		popLA		StandardODF
			WIMV	component	Herminic	WIMV	
ODFMax	188.5	105	218.9		50	350	72
PoleFigureMax	20.69	18	29.16		12.87	74.57	12.76
Rp%	2.70%	12.00%	2.40%				
random%(10%)	9%	2%	5%		1%	0%	-38%
VF%	Cube(30%)	29.56%			30.40%		
	Brass(30%)	34.31%			31.40%		
	S(30%)	26.29%			1.10%		
	random(10%)	9.85%			37.10%		

ODF 解析 (T R i c k i n i c) 対応は

L a b o T e x , M T E X , n e w O D F

p o p L A は M o n o c l i n i c (1 / 2) 解析が行われる

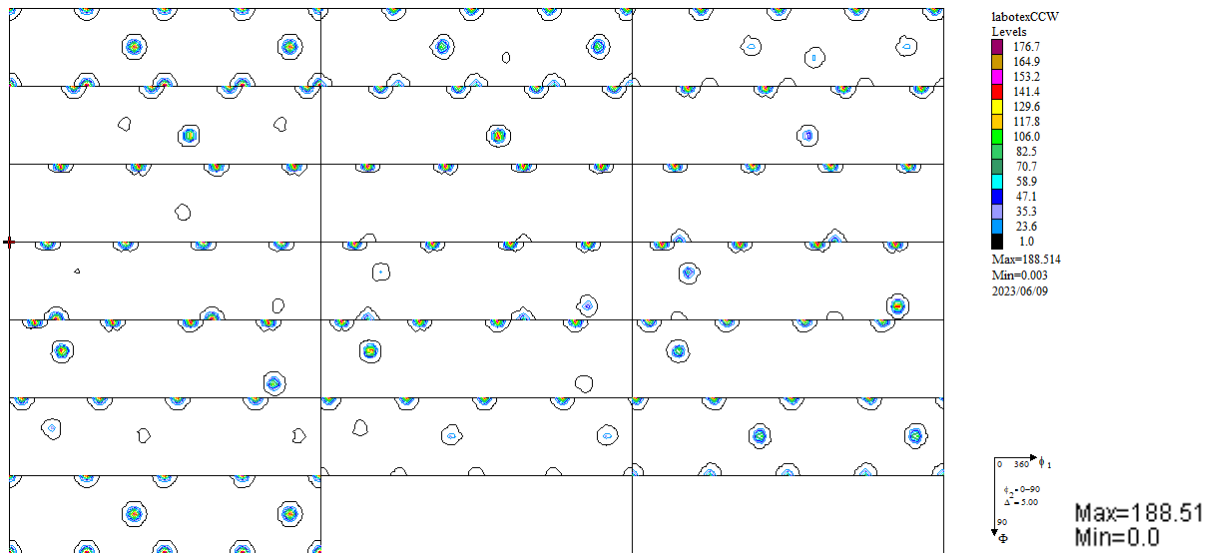
S T a n d a r d O D F は O r t h o r h o m b i c (1 / 4) 解析が行われる。

V F % では、n e w O D F のコンポーネントに S-1,S-2.S-3.S-4 指定が出来ない。

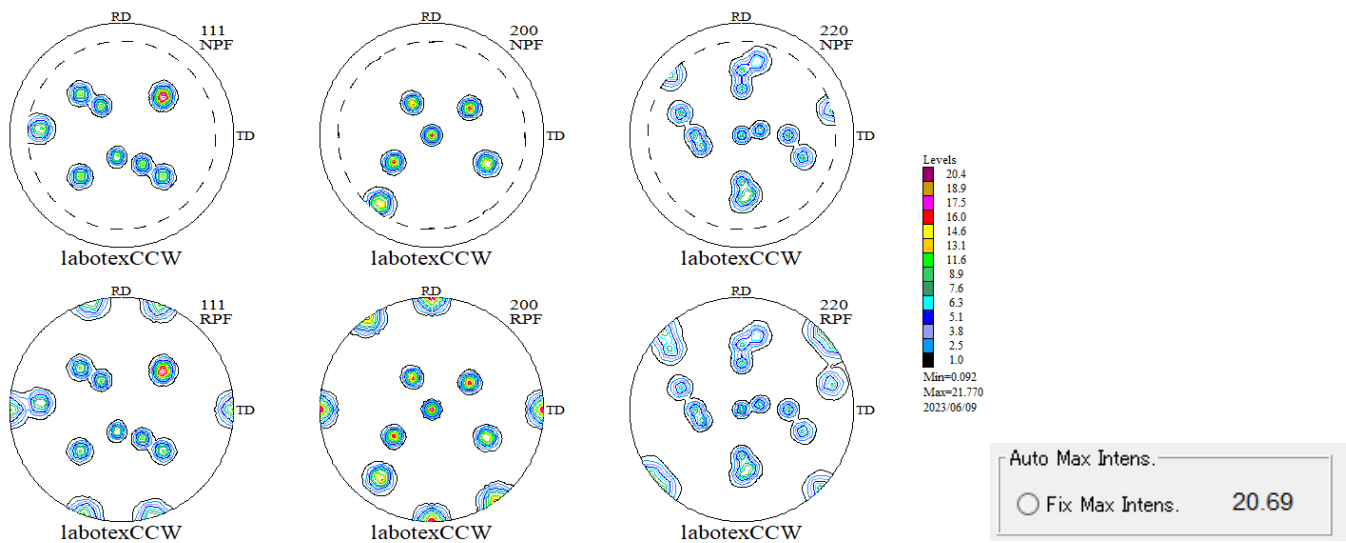
解析の詳細は以下に示す。

LaboTexによる解析

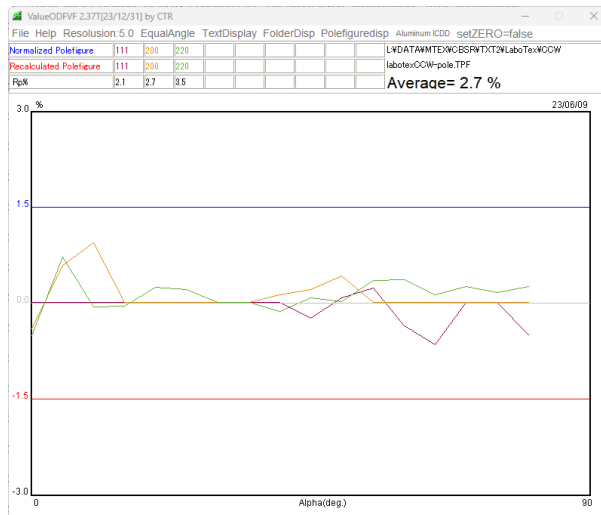
ODF 解析結果



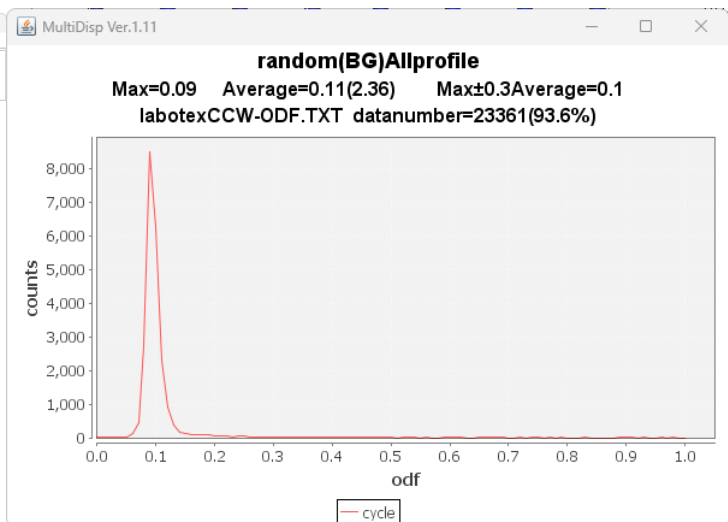
極点図比較



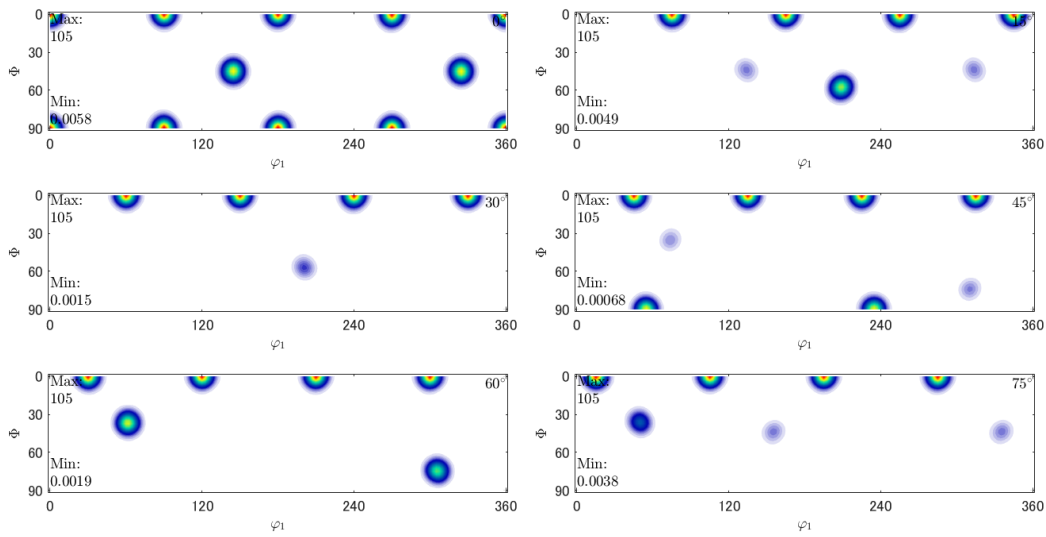
Rp%



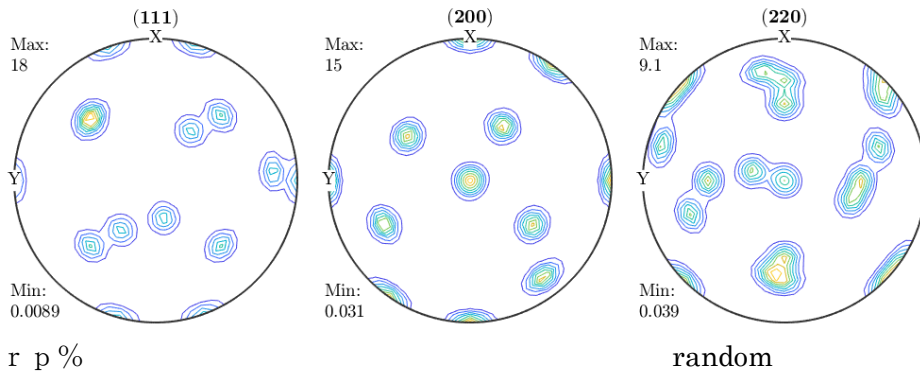
random



MTEXによる解析

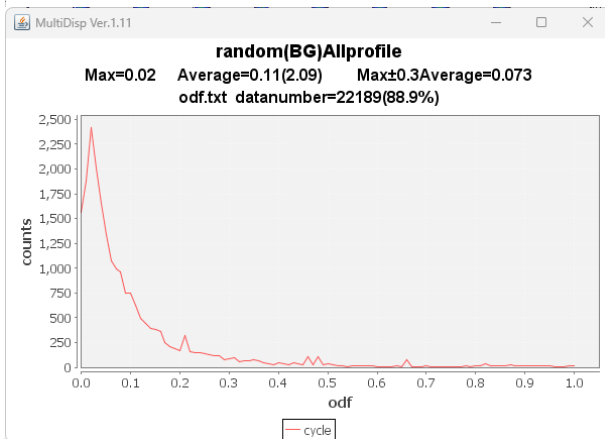
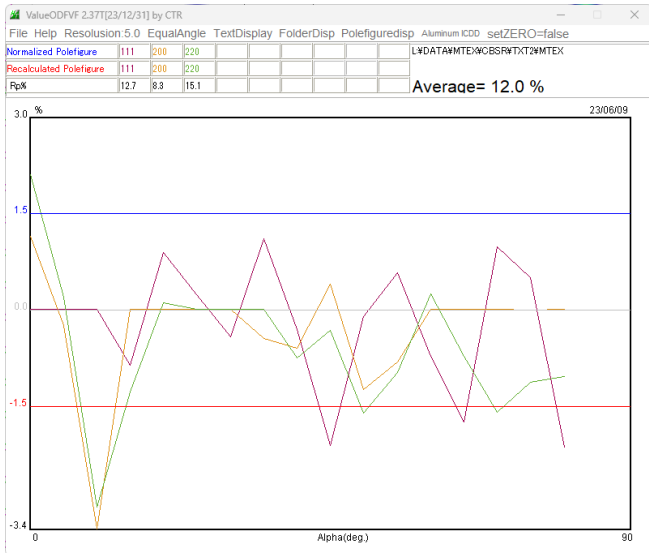


再計算極点図



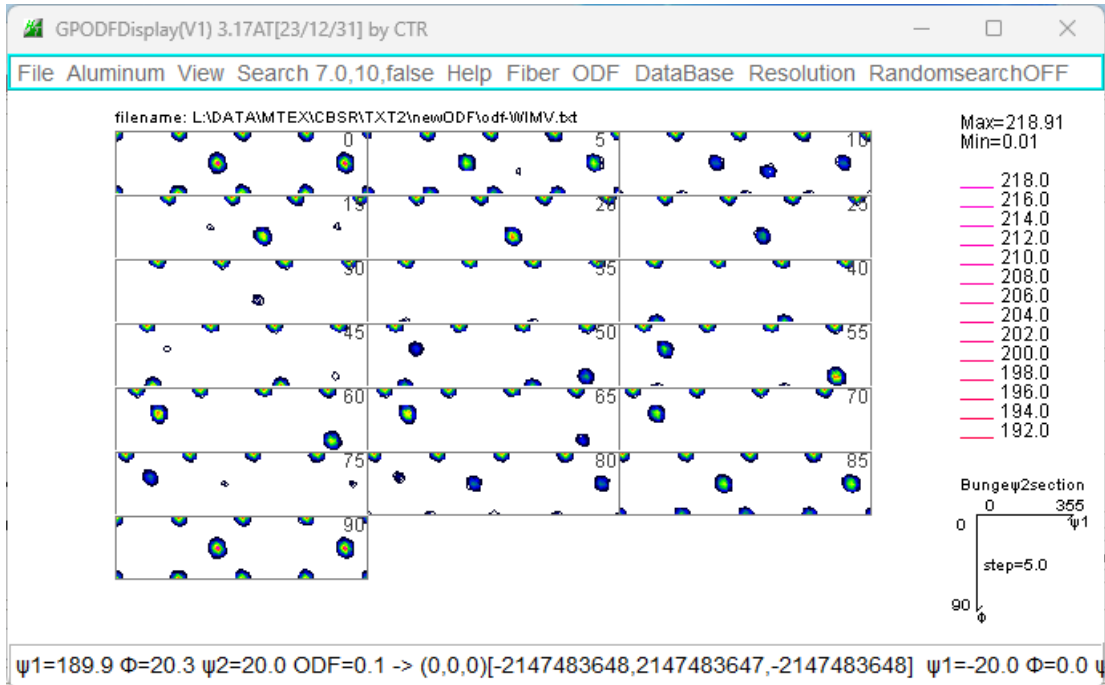
r p %

random

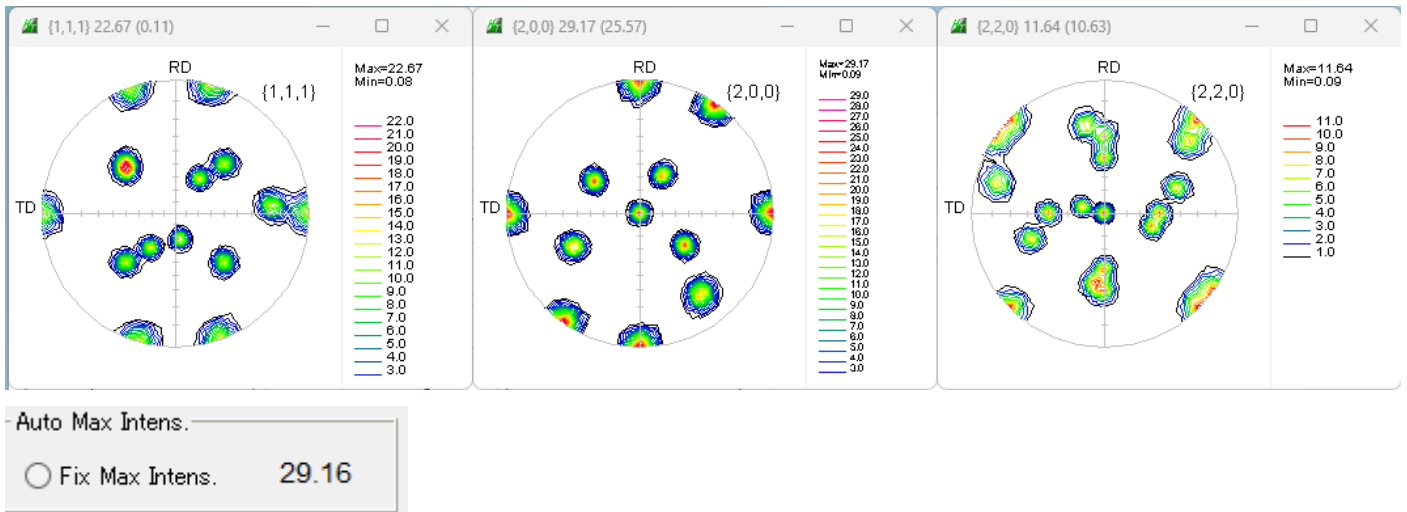


newODF

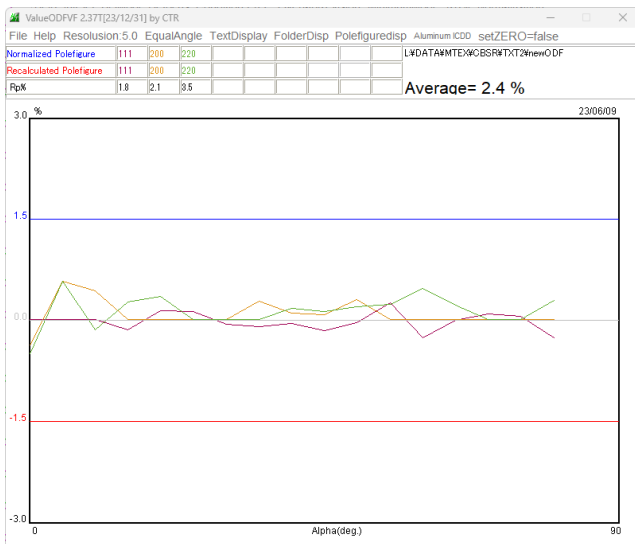
WIMV



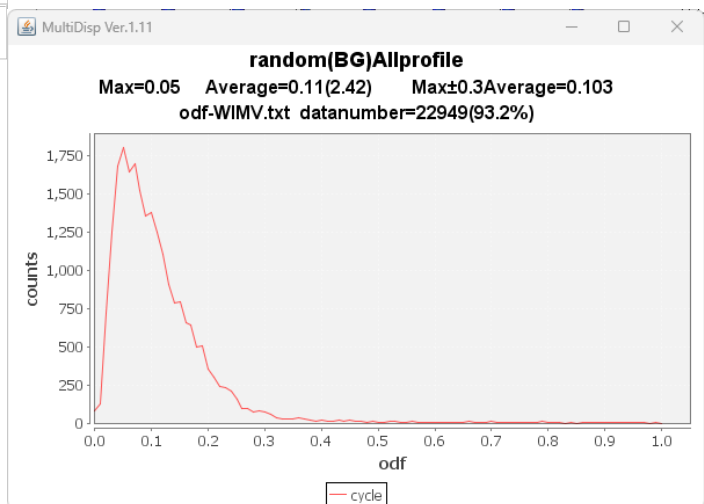
再計算極点図



Rp%



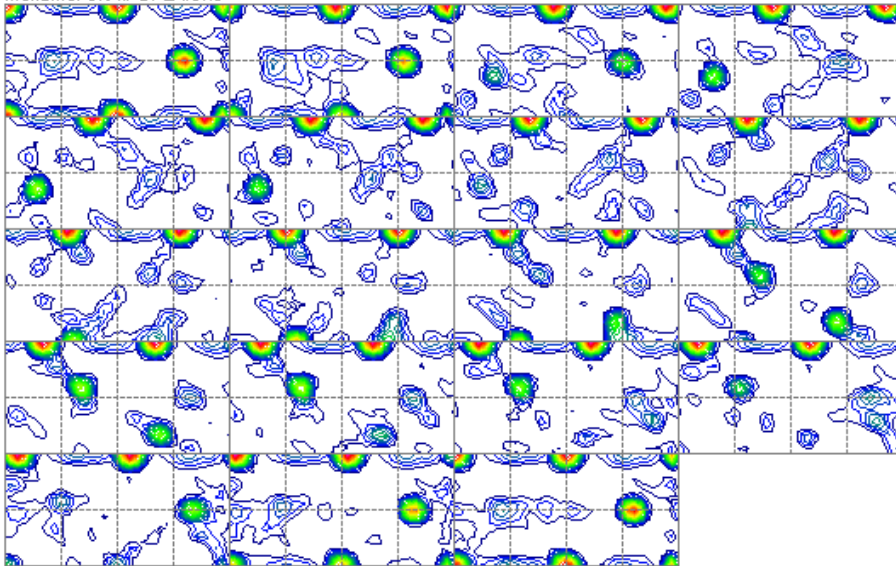
random



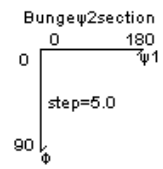
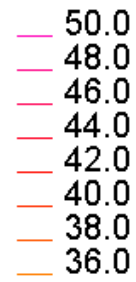
p o p L A

Hermonic

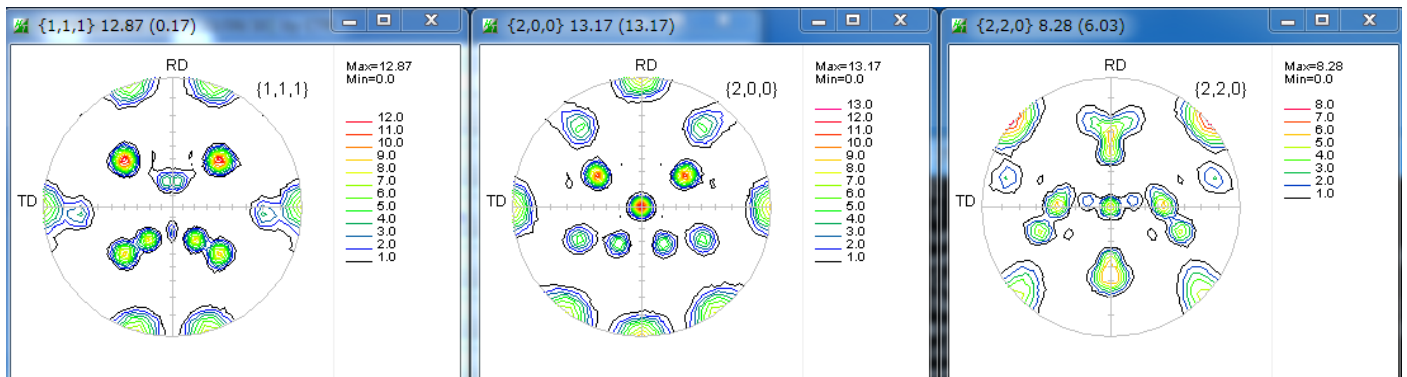
filename: C:\XIP\POPLA.SHD



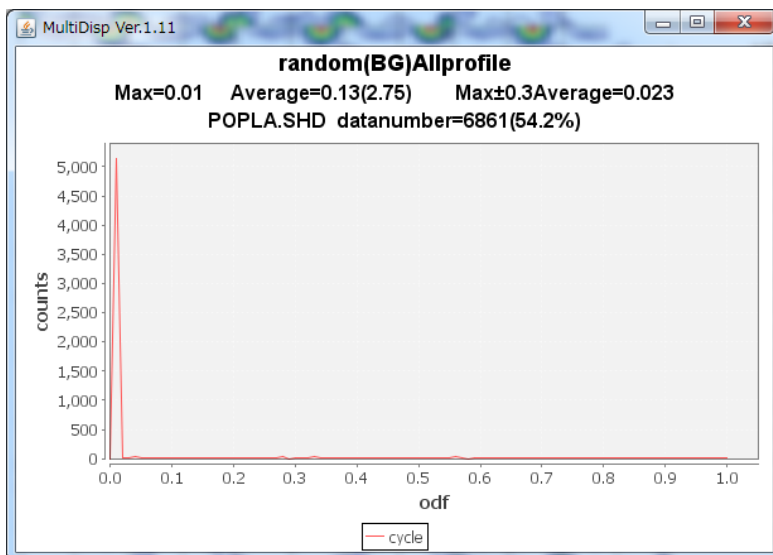
Max=50.0
Min=0.01



再計算極点図

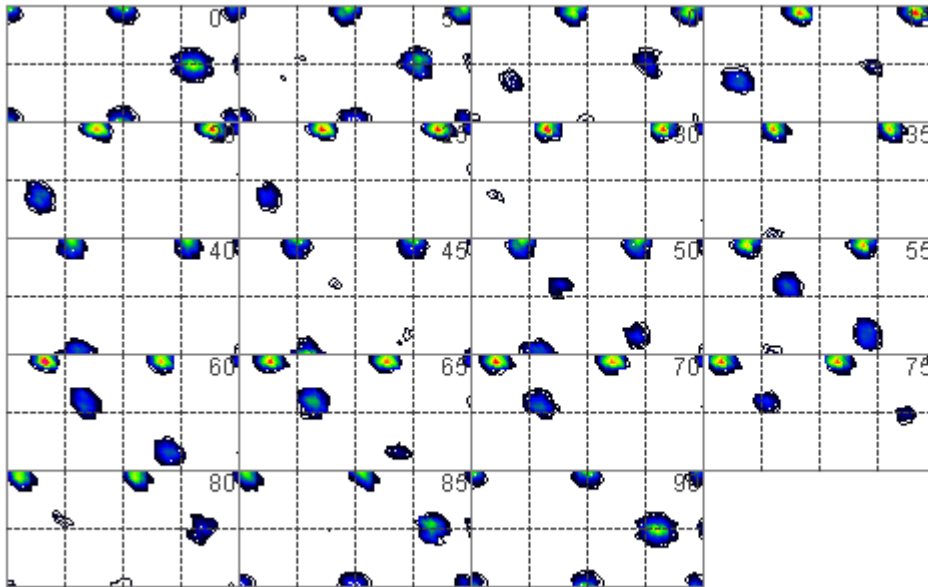


Random

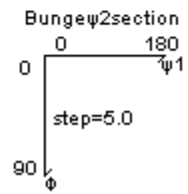
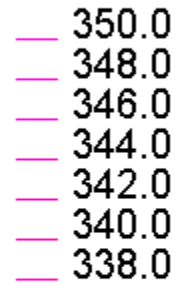


popLA
WIMV

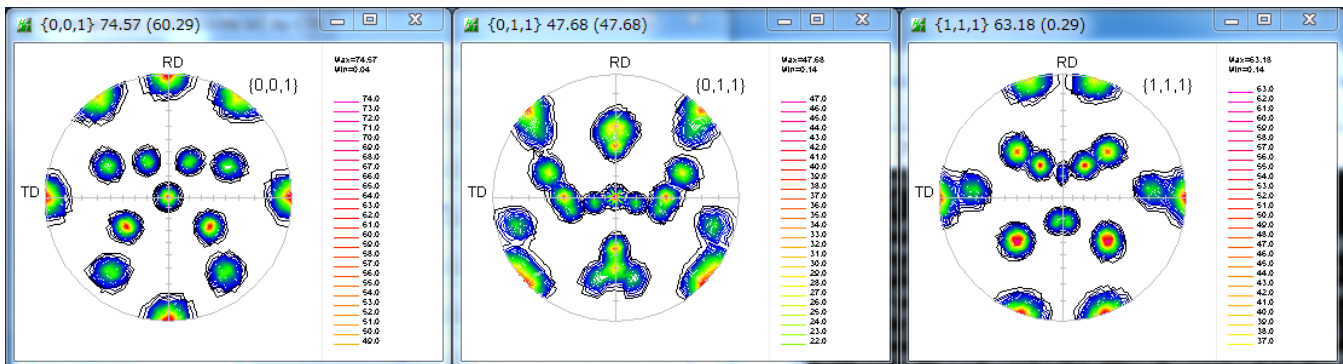
filename: C:\X\POPLA.SOD



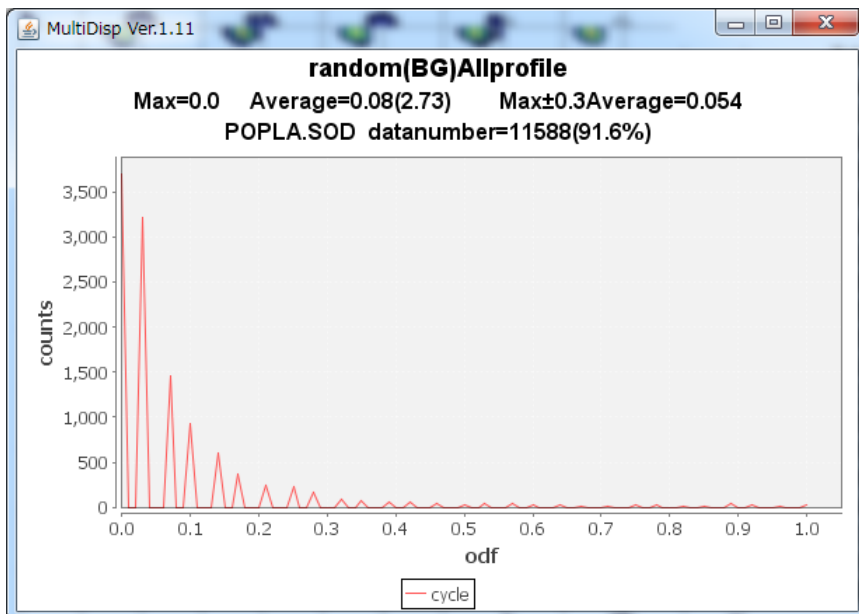
Max=350.0
Min=0.0



再計算極点図

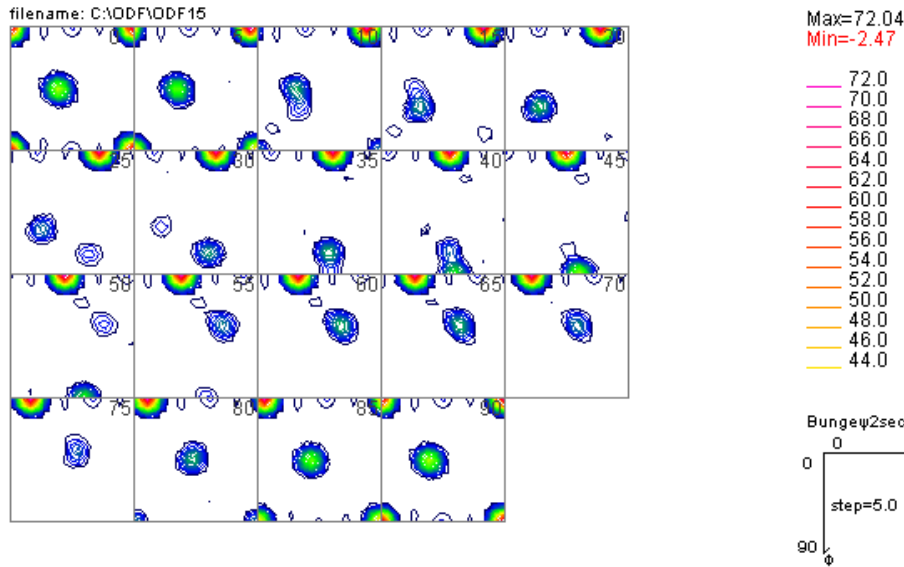


Random

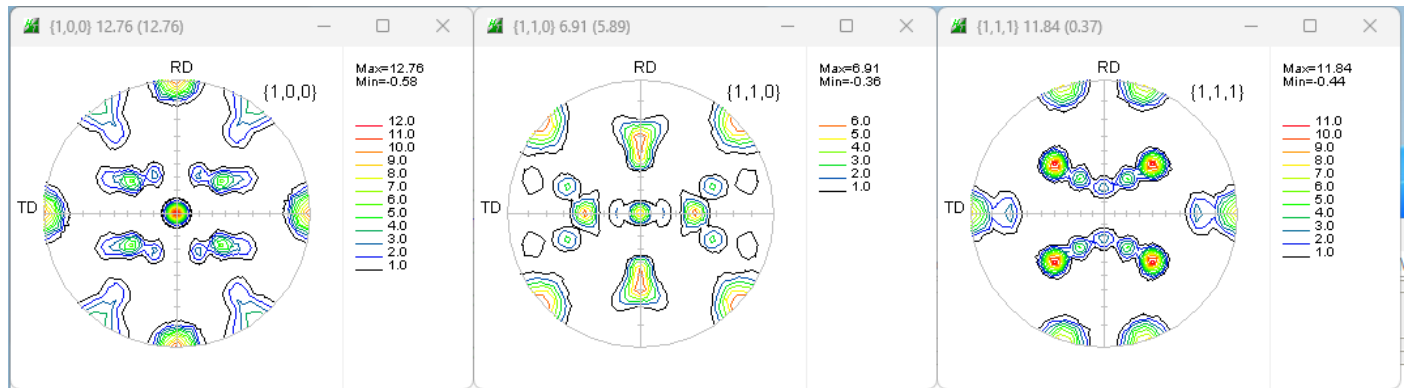


StandardODF(1/4)

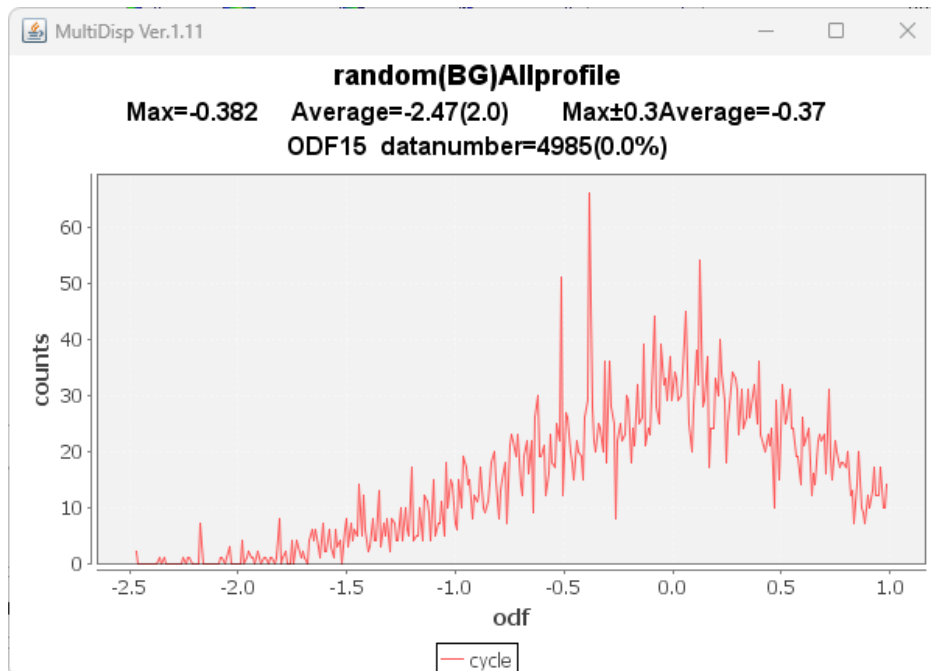
Triclinic 解析は出来なく、Orthorhombic で計算される。



再計算極点図

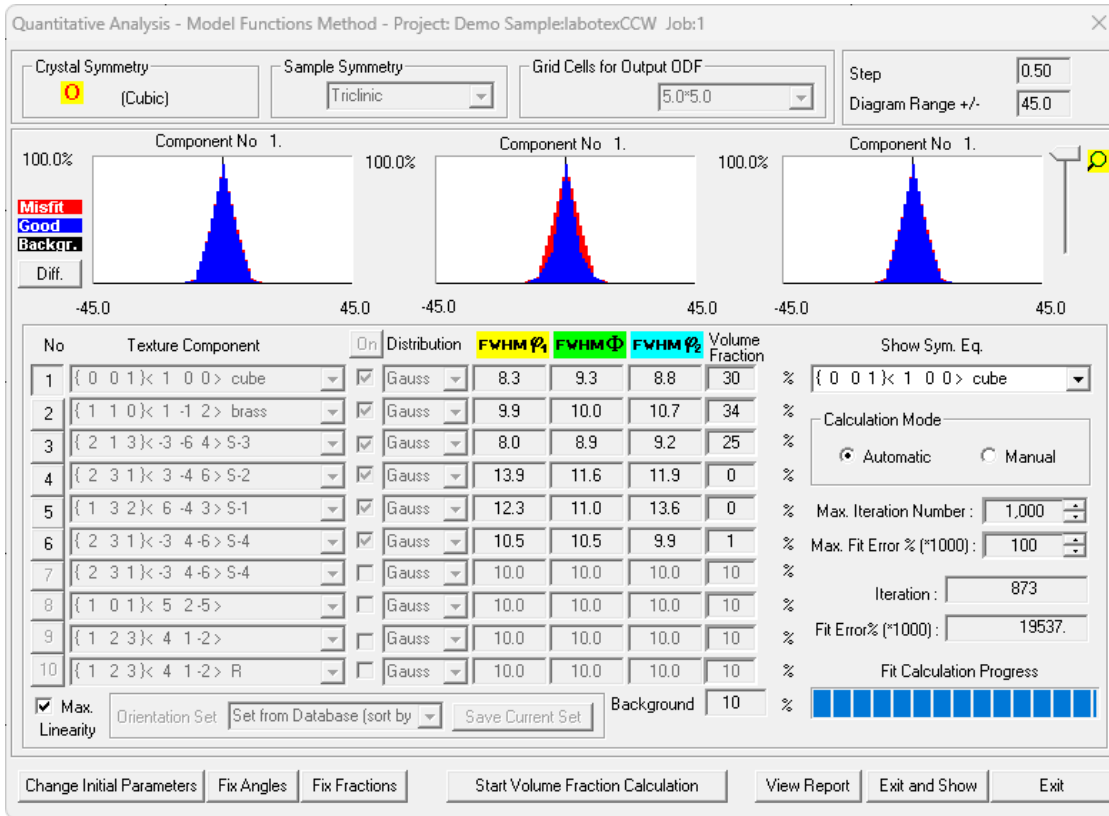


Random



VF %計算

LaboTex



No.	VF (%)	Phi1 (FWHM)	Phi (FWHM)	Phi2 (FWHM)	Orientation
1:	29.56	8.3	9.3	8.8	{ 0 0 1 } < 1 0 0 > cube
2:	34.31	9.9	10.0	10.7	{ 1 1 0 } < -1 -1 2 > brass
3:	25.08	8.0	8.9	9.2	{ 2 1 3 } < -3 -6 4 > S-3
4:	0.10	13.9	11.6	11.9	{ 2 3 1 } < 3 -4 6 > S-2
5:	0.12	12.3	11.0	13.6	{ 1 3 2 } < 6 -4 3 > S-1
6:	0.99	10.5	10.5	9.9	{ 2 3 1 } < -3 4 -6 > S-4
7:	9.85	Background Volume Fraction			

newODF

コンポーネントによるVF%計算

ODFを計算 ODF図をエクスポート

ODF計算

計算方式: コンポーネントモデル ODFグリッド

試料の対称性: 対称化なし

α解析開始角度(°): 0.00 φ₁ステップ(°): 5.00

α解析終了角度(°): 90.00 φ₂ステップ(°): 5.00

パラメーター

結晶相: Al ODFをシミュレート

最小化アルゴリズム: Nelder-Meadアルゴリズム

最大繰り返し数: 500 許容誤差: 1E-09

RP因子=51.33 ステータス: 十分な数の測定極点図から計算

コンポーネント定義

ランダムな分率 0.37 最小: 0.00 最大: 1.00 フィッティング:

体積分率 (%): 37.10

コンポーネント + - コンポーネントをDBから読み込む コンポーネントをDBに保存

N	タイプ	名称	色	極点図上に表示	方位	体積分率(%)
1	Cube		■	<input checked="" type="checkbox"/>	(0 0 1)[0 -1 0]	30.40
2	Brass		■	<input checked="" type="checkbox"/>	(1 1 0)[1 -1 2]	31.40
3	S		■	<input checked="" type="checkbox"/>	(1 2 3)[-7 -4 5]	1.10

コンポーネントプロパティ

パラメーター	値	最小	最大	フィッティング
分率	0.01	0.00	1.00	<input checked="" type="checkbox"/>
FWHM (°)	11.62	1.00	40.00	<input checked="" type="checkbox"/>
φ ₁ (°)	119.97	0.00	360.00	<input type="checkbox"/>
Φ (°)	36.43	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>
φ ₂ (°)	25.87	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>

ODFを計算 ODF図をエクスポート

ODF計算

計算方式: コンポーネントモデル ODFグリッド

試料の対称性: 対称化なし

α解析開始角度(°): 0.00 φ₁ステップ(°): 5.00

α解析終了角度(°): 90.00 φ₂ステップ(°): 5.00

パラメーター

結晶相: Al ODFをシミュレート

最小化アルゴリズム: 遺伝的アルゴリズム

母集団: 50 個体数: 100 ターゲットχ²: 0.1

重み: 50.00 クロスオーバー: 50.00

RP因子=40.47 ステータス: 十分な数の測定極点図から計算

コンポーネント定義

ランダムな分率 0.42 最小: 0.00 最大: 1.00 フィッティング:

体積分率 (%): 41.94

コンポーネント + - コンポーネントをDBから読み込む コンポーネントをDBに保存

N	タイプ	名称	色	極点図上に表示	方位	体積分率(%)
1	Cube		■	<input checked="" type="checkbox"/>	(0 0 1)[0 1 0]	16.02
2	Brass		■	<input checked="" type="checkbox"/>	(8 11 0)[0 0 1]	23.92
3	S		■	<input checked="" type="checkbox"/>	(1 2 3)[-6 -3 4]	18.12

コンポーネントプロパティ

パラメーター	値	最小	最大	フィッティング
分率	0.18	0.00	1.00	<input checked="" type="checkbox"/>
FWHM (°)	39.89	1.00	40.00	<input checked="" type="checkbox"/>
φ ₁ (°)	121.02	0.00	360.00	<input type="checkbox"/>
Φ (°)	36.70	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>
φ ₂ (°)	26.57	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>

コンポーネントに複数のS方位（例S-1, S-2, S-3, S-4）追加出来ない。
登録は出来るが、指定の際に指数が変化してしまう???

S-2	ピーク	(2 3 1)[3 -4 6]
b	軸	<1 0 0>
S-1	ピーク	(1 3 2)[6 -4 3]

N	タイプ	名称	色	極点図上に表示	方位	体積分率(%)
1	Cube		■	<input checked="" type="checkbox"/>	(0 0 1)[1 0 0]	33.33
2	Brass		■	<input checked="" type="checkbox"/>	(0 1 1)[2 -1 1]	33.33
3	S-1		■	<input checked="" type="checkbox"/>	(0 0 1)[1 0 0]	33.33