newODFOVolumeFraction

2023年01月28日 HelperTex Office

1. 概要

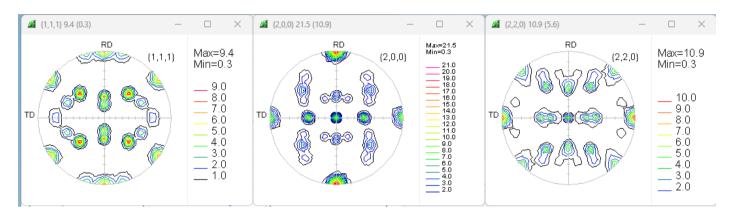
r a n d o m と 方位 に 関して 調べている と , n e w O D F の 挙動に 不安がある 事が分かり 本資料を 纏めます。

newODFのバージョンが古いため、動作に不安があるが、最新バージィンで改善されていると思われる。

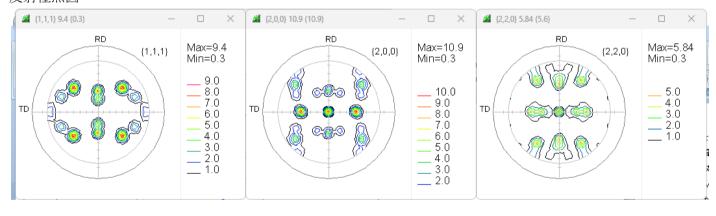
2. 入力データ

資料「randomと方位の関係」と同一

MTEXによる0. 7* (cube+Goss+copper+S) +0. 3*random から作成した極点図

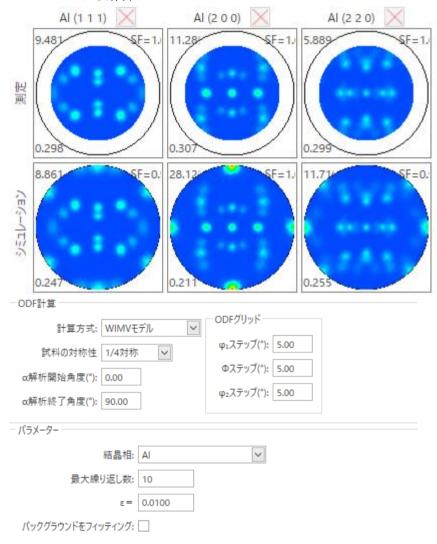


反射極点図

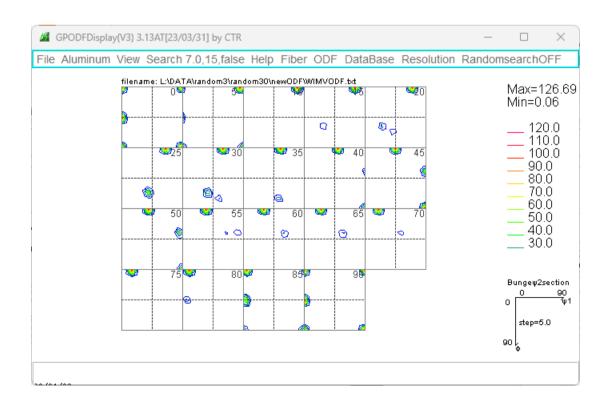


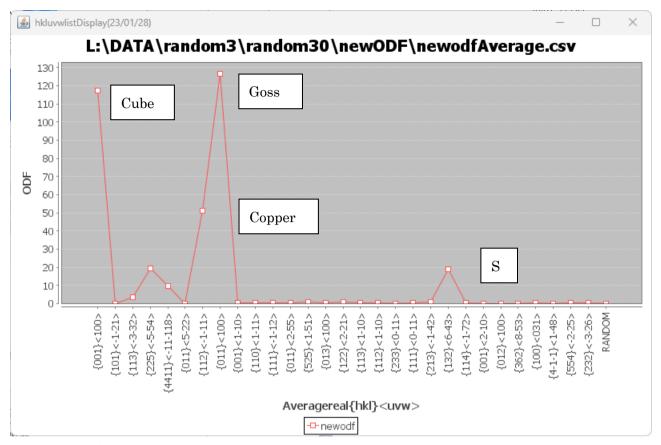
3. newODFによる解析

3. 1 WIMVによる解析

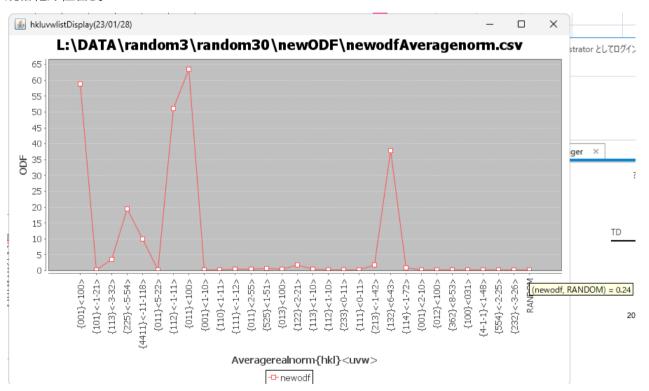


RP因子=3.98 ステータス: 十分な数の測定極点図から計算





規格化方位密度



ほぼ解析結果は妥当と思われます。しかし、random=30%が24%と計算されている。

- 4. コンポーネント解析
- 4. 1 cube, goss, copperで解析



重要: 煩雑であるが全ての方位に同一の指定を行う

ODF図をエクスポート			
計算方式: コンポーネントモデル	ル V ODFグリッド ―		
試料の対称性 1/4対称 🗸	φ ₁ ステップ(°): [5.00	
54.行(7,5)1小(主 174,5)1小()	Φステップ(°):	5.00	
α解析開始角度(°): 0.00	φ ₂ ステップ(°):		
α解析終了角度(°): 90.00	φ2ΑΣ97(): [5.00	
パラメーター	'	<u>'</u>	
結晶相: Al	✓ ODFをシミ	コレート	
最小化アルゴリズム: 遺伝的アルゴリズム	4		
母集団: 50 個体数: 100	0 ターゲットχ²: 0.1		
重み: 50.00 クロスオーバー: 50.	100		
RP因子=20.41	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			
ランダムの分率 0.38 最小: 0.	.00 最大: 1.00	フィッティング: 🗸	
体積分率 (%): 38.00			
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 ピーク ∨ Goss	#FFFC 🗸	(0 1 1)[1 0 0]	19.20
2 ピーク C Copper	#FFCI	(121)[1-11]	23.60
3 ピーク V Cube	#FF89 🗸	(001)[100]	19.20
コンポーネントプロパティ			
パラメーター 値	最小	最大フ	イッティング
分率 0.19	0.00	1.00	✓
FWHM (°) 9.91	1.00	40.00	✓
φ1 (°)	0.00	90.00	
Ф (°) 45.00	0.00	90.00	

0.00

90.00

70/4 = 17.5%ではない

0.00

φ₂ (°)

4. 2 cube, goss, copper, Sで解析条件

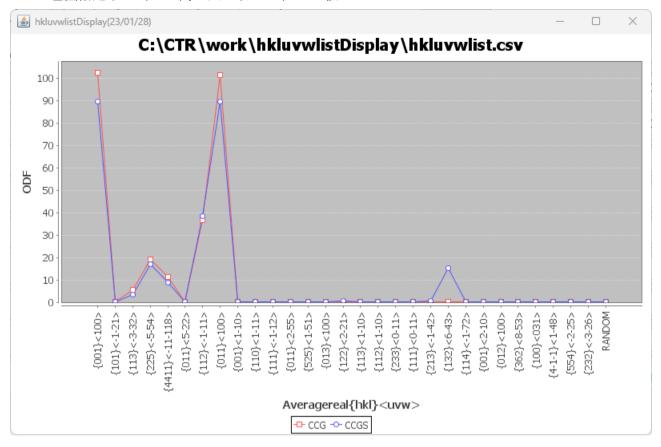
ODFを計算	図をエクスポート				
計算万式: 試料の対称性 1 α解析開始角度(°): 0 α解析終了角度(°): 9 パラメーター 結晶相: A 最小化アルゴリズム: 3 母集団: 50	コンボーネントモテル [1/4対称 V] 0.00 00.00	 Ψ1ステップ(°): Φステップ(°): φ2ステップ(°): ODFをシミ ターゲットχ²: 0.1 	5.00		
コンポーネント定義 ランダムの分率 0.00 体積分率 (%): 0.00	最小: 0.00	計算されませんでした 最大: 1.00	フィッティング: ✔ コンポーネントをDBに		
N タイプ	名称 色	極点図上に表示	方位	体積分率(%)	
		FFF(V	(0 1 1)[1 0 0		
	Copper #	FFCI 🗸	(1 2 1)[1 -1		
		FFA:	(0 1 1)[2 -1		
▶ 4 L°-7 V	S #	FF9:	(1 3 2)[6 -4		
コンポーネントプロパテ	1				
パラメーター	値	最小	最大	フィッティング	
分率	1.00	0.00	1.00	✓	
FWHM (°)	10.00	1.00	40.00	✓	
φ ₁ (°)	27.03	0.00	90.00		
Ф (°)	57.69	0.00	90.00		
φ₂ (°)	18.44	0.00	90.00		

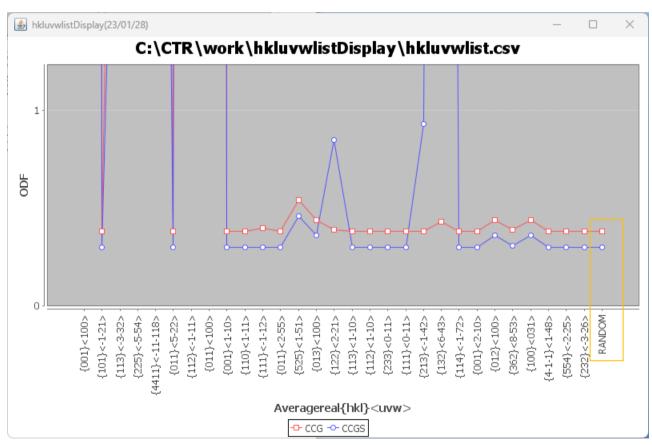
重要: 煩雑であるが全ての方位に同一の指定を行う

ODF図をエクスポート 計算方式: コンポーネントモデル [試料の対称性 1/4対称 ✓ α解析開始角度(°): 0.00 α解析終了角度(°): 90.00	Φ1ステップ(°):Φステップ(°):φ2ステップ(°):	5.00	
パラメーター			
結晶相: AI	∨ ODFをシミ	ニュレート	
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=0.13 ステータ	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 ランダムの分率 0.30 最小: 0.00 体積分率 (%): 30.00	最大: 1.00 をDBから読み込む	フィッティング: ✓ コンポーネントをDBに	
N タイプ 名称 色	極点図上に表示	方位 方位	体積分率(%)
▶ 1 ピーク ∨ Goss #	FFF(🗸	(0 1 1)[1 0 0	17.50
2 ピーク ∨ Copper #	FFCI 🗸	(121)[1-1	1] 17.50
3 ピ−ク ∨ S ■#	FF95	(1 3 2)[6 -4	3] 17.50
	FF89	(001)[100	17.50
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	
FWHM (°) 10.01	1.00	40.00	
φ ₁ (°) 0.00	0.00	90.00	
Φ (°) 45.00 φ ₂ (°) 0.00	0.00	90.00	
1-17			

VF% = 70/4 = 17.5%が求まる

5. S包囲指定なし (CCG)、あり (CCGS) の比較





含まれる全ての方位計算を行わないと正しいV o l u m e F r a c t i o n が得られない。全ての方位指定をないとその他の(S 方位)が r a n d o m に含まれる。

6. 方位を多めに登録すると

ODFを計算 OD α解析開始角度(°): [α解析終了角度(°): [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	プロスオーバー: 50.00			
	RP因子=1.33 ステー	タス: 十分な数の測算	自極点図から計算	
─ コンポーネント定義 ─				
ランダムの分率 0.22		最大: 1.00	フィッティング: ▶	
体積分率 (%): 22.00)			
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DBI	に保存
N タイプ	名称 色 極	点図上に表示	方位	体積分率(%)
1 ピーク 💙	Goss	✓ (0 1	1)[100]	17.40
2 ピーク 💙	Copper	✓ (1 2	2 1)[1 -1 1]	17.50
3 ピーク 🔻	S	✓ (1 3	2)[6 -4 3]	17.10
4 ピーク 🔻	Cube	✓ (0 0	1)[100]	15.90
5 ピーク 🔻	Taylor	✓ (4 1	1 4)[11 -8 11]	3.90
6 ピーク 💟	RW	✓ (0 0	1)[100]	1.90
	Brass	✓ (0 1	1)[2 -1 1]	4.30
コンポーネントプロパ	71			
パラメーター	値	最小	最大	フィッティング
分率	0.04	0.00	1.00	✓
FWHM (°)	39.83	1.00	40.00	✓
φ ₁ (°)	35.26	0.00	90.00	
Φ (°)	45.00	0.00	00.00	

0.00

90.00

合計は78%

φ₂ (°)

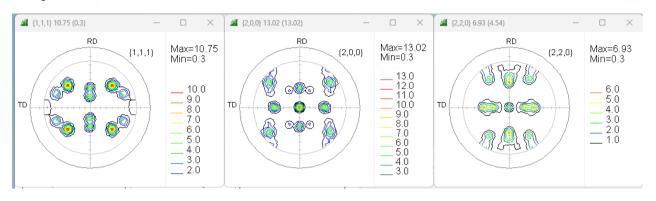
残りをrandom30%->22%

0.00

7. 比率を変えて評価

$$\begin{split} ODF=&0.3*\ unimodalODF(Ori1,psi)+0.3*\ unimodalODF(Ori2,psi)+\\ &0.2*\ unimodalODF(Ori3,psi)+0.2*\ unimodalODF(Ori4,psi)\\ odf=&0.7*ODF+0.3*randomODF\\ h=&\{Miller(1,1,1,CS),Miller(2,0,0,CS),Miller(2,2,0,CS)\}\\ rpf=&calcPoleFigure(odf,h) \end{split}$$

Export後、Orthorhombic、反射極点処理



このデータは、

Cube, Goss 21% copper, S 14% random 30%

ODFを計算)F図をエクスポート			
試料の対称性	コンポーネントモデル 1/4対称 V 0.00 90.00	□ ODFクリット φ₁ステップ(Φステップ(φ₂ステップ((°): 5.00	
パラメーター				
結晶相:	Al	∨ ODF€	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	プロスオーバー: 50.0			
		⁻ タス: 十分な数の測	中極上回れた社質	
┌ コンポーネント定義 =				
ランダムの分率 0.30 体積分率 (%): 30.00		0 最大: 1.00 ントをDBから読み込む		
ランダムの分率 0.30 体積分率 (%): 30.00	コンポーネ			
ランダムの分率 0.30 体積分率 (%): 30.00 コンポーネント N タイプ	コンポーネ	ントをDBから読み込む	コンポーネントをロ	DBに保存
ランダムの分率 0.30 体積分率 (%): 30.00 コンポーネント N タイプ ▶ 1 ピーク ∨	D + - コンポーネ 名称 色	ントをDBから読み込む 極点図上に表示 【】 (C	コンポーネントを0	DBに保存 体積分率(%)
ランダムの分率 0.30 体積分率 (%): 30.00 コンポーネント N タイプ ▶ 1 ピーク ∨	A称 色 Goss Copper S	ントをDBから読み込む 極点図上に表示 ✓ (c	コンポーネントを「 方位) 1 1)[1 0 0]	DBに保存 体積分率(%) 14.00
ランダムの分率 0.30 体積分率 (%): 30.00 コンポーネント N タイプ ▶ 1 ピーク 2 ピーク 3 ピーク 4 ピーク 4 ピーク	名称 色 Goss Copper Cube	ントをDBから読み込む 極点図上に表示 ② (0 ② (1	コンポーネントを「 方位) 1 1)[1 0 0] 2 1)[1 -1 1]	DBに保存 体積分率(%) 14.00 21.00
ランダムの分率 0.30 体積分率 (%): 30.00 コンポーネント N タイプ ▶ 1 ピーク ∨ 2 ピーク ∨ 3 ピーク ∨ 4 ピーク ∨	名称 色 Goss Copper Cube	ントをDBから読み込む 極点図上に表示 ✓ (0 ✓ (1 ✓ (1	プロンポーネントを「 方位) 1 1)[1 0 0] 2 1)[1 -1 1] 3 2)[6 -4 3]	DBに保存 体積分率(%) 14.00 21.00 14.00 21.00
ランダムの分率 0.30 体積分率 (%): 30.00 コンポーネント N タイプ ▶ 1 ピーク ∨ 2 ピーク ∨ 3 ピーク ∨ 4 ピーク ∨ 「コンポーネントプロパ	名称 色 Goss Copper Cube	ントをDBから読み込む 極点図上に表示 ② (1 ② (1 ② (1	プロンポーネントを「 方位) 1 1)[1 0 0] 2 1)[1 -1 1] 3 2)[6 -4 3]	DBに保存 体積分率(%) 14.00 21.00 14.00 21.00
ランダムの分率 0.30 体積分率 (%): 30.00 コンポーネント N タイプ 1 ピーク 2 ピーク 3 ピーク 4 ピーク コンポーネントプロパ パラメーター	A称 色 Goss Copper Cube Total Control	ントをDBから読み込む 極点図上に表示 ② (1 ② (1 ② (1 ② (0 最小 0.00	方位 方位) 1 1)[1 0 0] 2 1)[1 -1 1] 3 2)[6 -4 3] 0 0 1)[1 0 0] 最大 1.00	DBに保存 体積分率(%) 14.00 21.00 14.00 21.00
ランダムの分率 0.30 体積分率 (%): 30.00 コンポーネント N タイプ ▶ 1 ピーク ∨ 2 ピーク ∨ 3 ピーク ∨ 4 ピーク ∨ コンポーネントプロパ パラメーター 分率 FWHM (°)	A称 色 Goss Copper Cube	ントをDBから読み込む 極点図上に表示 ン (0 ン (1 シ (0 最小 0.00 1.00	方位 方位) 1 1)[1 0 0] 2 1)[1 -1 1] 3 2)[6 -4 3]) 0 1)[1 0 0] 最大 1.00 40.00	DBに保存 体積分率(%) 14.00 21.00 14.00 21.00
ランダムの分率 0.30 体積分率 (%): 30.00 コンポーネント N タイプ ト 1 ピーク マ 2 ピーク マ 4 ピーク マ イ ピーク マ イ ピーク マ ト コンポーネントプロパ パラメーター 分率 FWHM (°)	A称 色 Goss Copper S Cube 元イ 値 0.14 10.01 0.00	ントをDBから読み込む 極点図上に表示 ② (1 ② (1 ② (1 ② (0 最小 0.00 1.00 0.00	方位 方位) 1 1)[1 0 0] 2 1)[1 -1 1] 3 2)[6 -4 3]) 0 1)[1 0 0] 最大 1.00 40.00 90.00	DBに保存 体積分率(%) 14.00 21.00 14.00 21.00
ランダムの分率 0.30 体積分率 (%): 30.00 コンポーネント N タイプ ▶ 1 ピーク ∨ 2 ピーク ∨ 3 ピーク ∨ 4 ピーク ∨ コンポーネントプロパ パラメーター 分率 FWHM (°)	A称 色 Goss Copper Cube	ントをDBから読み込む 極点図上に表示 ン (0 ン (1 シ (0 最小 0.00 1.00	方位 方位) 1 1)[1 0 0] 2 1)[1 -1 1] 3 2)[6 -4 3]) 0 1)[1 0 0] 最大 1.00 40.00	DBに保存 体積分率(%) 14.00 21.00 14.00 21.00

8. Brassを追加した場合

ODF図をエクスポート

ODFを計算

試料の対称性 1/4対称 ✓ α解析開始角度(°): 0.00 α解析終了角度(°): 90.00	φ ₁ ステップ(°): 5.00 Φステップ(°): 5.00 φ ₂ ステップ(°): 5.00	
結晶相: Al	∨ ODFをシミュレー	k
最小化アルゴリズム: 遺伝的アルゴリズム	V	
版小化アルコリスム: 遺伝的アルコリスム		7
母集団: 50 個体数: 100 分	'ーゲットχ²: 0.1	
重み: 50.00 クロスオーバー: 50.00		
RP因子=0.75 ステータス:	十分な数の測定極占	づから計算
□ コンポーネント定義	. Je sometime (2011)	
ランダムの分率 0.28 最小: 0.00	最大: 1.00	フィッティング: 🗸
体積分率 (%): 27.70	致人. 1.00	717) 127. 🗷
コンポーネント + - コンポーネントをロ	ひよいこうキャンス キャー・コック	
37% 171	8から読み込む コン	ポーネントをDBに保存
		ボーネントをDBに保存 方位 体積分率(%)
	図上に表示	
N タイプ 名称 色 極点	図上に表示	方位 体積分率(%)
N タイプ 名称 色 極点 ▶ 1 ピーク ∨ Goss	図上に表示 V (0 1 1) V (1 2 1)	方位 体積分率(%) [1 0 0] 14.10
N タイプ 名称 色 極点 ▶ 1 ピーク ∨ Goss 2 ピーク ∨ Copper	図上に表示 (0 1 1) (1 2 1) (1 3 2)	方位 体積分率(%) [1 0 0] 14.10 [1 -1 1] 21.20
N タイプ 名称 色 極点 1 ピーク ∨ Goss 2 ピーク ∨ Copper □ 3 ピーク ∨ S □ 4 ピーク ∨ Brass □ 5 ピーク ∨ Cube □	図上に表示 (0 1 1) (1 2 1) (1 3 2) (0 1 1)	方位 体積分率(%) [1 0 0] 14.10 [1 -1 1] 21.20 [6 -4 3] 14.10
N タイプ 名称 色 極点 1 ピーク V Goss 2 ピーク V Copper 3 ピーク V S 4 ピーク V Brass	図上に表示 (0 1 1) (1 2 1) (1 3 2) (0 1 1)	方位 体積分率(%) [1 0 0] 14.10 [1 -1 1] 21.20 [6 -4 3] 14.10 [2 -1 1] 1.60
N タイプ 名称 色 極点 1 ピーク ∨ Goss 2 ピーク ∨ Copper ■ 3 ピーク ∨ S ■ 4 ピーク ∨ Brass ■ 5 ピーク ∨ Cube	図上に表示 (0 1 1) (1 2 1) (1 3 2) (0 1 1) (0 0 1)	方位 体積分率(%) [1 0 0] 14.10 [1 -1 1] 21.20 [6 -4 3] 14.10 [2 -1 1] 1.60
N タイプ 名称 色 極点 1 ピーク V Goss 2 ピーク V Copper 3 ピーク V S 4 ピーク V Brass 5 ピーク V Cube	図上に表示 (0 1 1) (1 2 1) (1 3 2) (0 1 1) (0 0 1) 最小 最小	方位 体積分率(%) [1 0 0] 14.10 [1 -1 1] 21.20 [6 -4 3] 14.10 [2 -1 1] 1.60 [1 0 0] 21.30 大 フィッティング 00 ✓
N タイプ 名称 色 極点 1 ピーク V Goss 2 ピーク V Copper 3 ピーク V Brass 5 ピーク V Cube コンポーネントプロパティ パラメーター 値	図上に表示 V (0 1 1) V (1 2 1) V (1 3 2) V (0 1 1) V (0 0 1) 最小	方位 体積分率(%) [1 0 0] 14.10 [1 -1 1] 21.20 [6 -4 3] 14.10 [2 -1 1] 1.60 [1 0 0] 21.30

Brassも計算されるが、その他の方位のVF%が微増する。randomが侵食されている

90.00

90.00

0.00

0.00

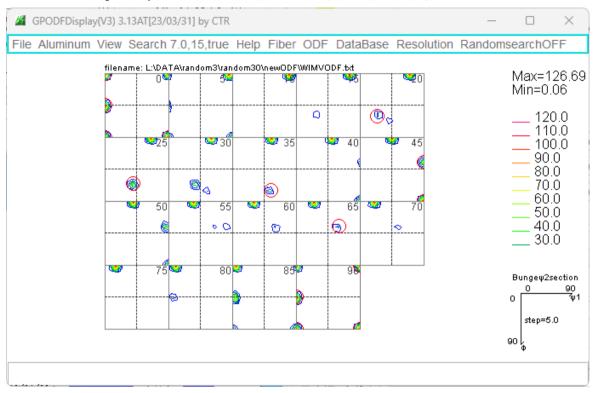
45.00

0.00

φ₂ (°)

まとめ

現在のバージョンでは、WIMV解析ではMTEXデータと相性が悪く、random検出が難しい。 更に、コンポーネント法ではeuler角度をFixしないと方位が発散してしまい解析が難しい。 このような条件下で正確なVolumeFractionno計算は、含まれる全ての方位の指定が重要。GPODFDisplayのODFの極方位サーチの併用を勧めます。



File Help										
f1	F	f2	ODF	calcf1	calcF	calcf2	ODF(real)	hkluvw	EqualDire	ction
0.0	0.0	0.0	117.59	0.0	0.0	0.0	117.25	(0 0 1)[1 0	0] cube	6
0.0	45.0	0.0	126.69	0.0	45.0	0.0	126.69	(0 1 1)[1 0	0] goss	3
39.93	65.49	26.1	62.27	39.23	65.91	26.57	48.03	(1 2 1)[1 -1	1] copper	2
52.87	74.5	33.69	26.2	52.87	74.5	33.69	(2 3 1)[3 -4	6]S	1	
52.87 MAXODF=		33.69 MINIODF=		52.87	74.5	33.69	(2 3 1)[3 -4	6]S	1	

WIMV法で計算したODF図から主たる方位を検出しコンポーネントで指定する。