

n e w O D F の V o l u m e F r a c t i o n

2023年01月28日

HelperTex Office

1. 概要

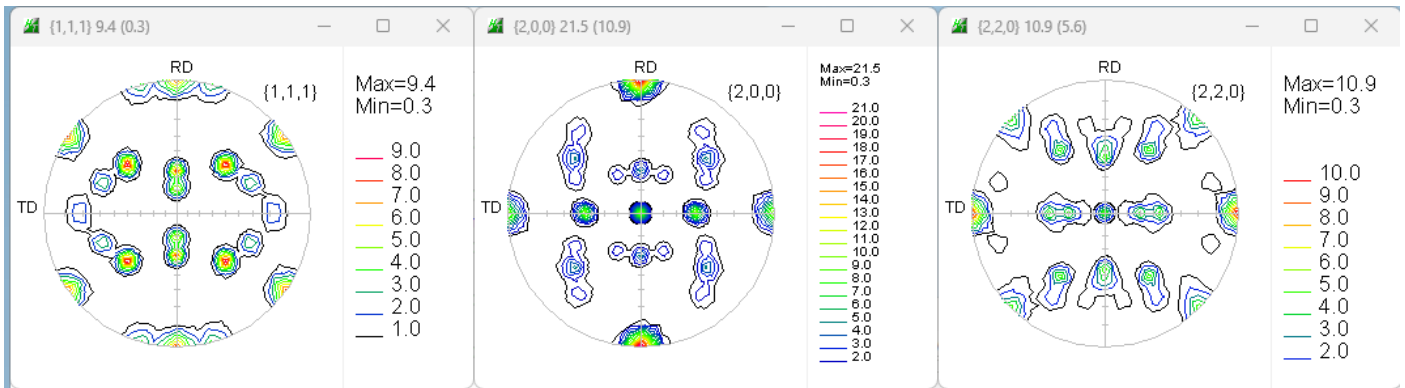
randomと方位に関して調べていると、newODFの挙動に不安がある事が分かり本資料を纏めます。

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

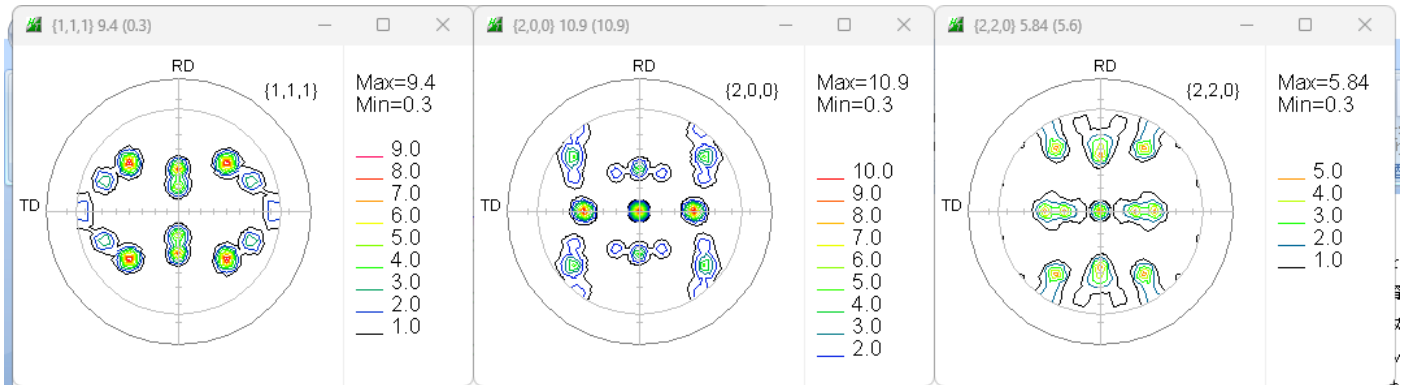
2. 入力データ

資料「randomと方位の関係」と同一

MTEXによる $0.7 * (\text{cube} + \text{Goss} + \text{copper} + \text{S}) + 0.3 * \text{random}$ から作成した極点図

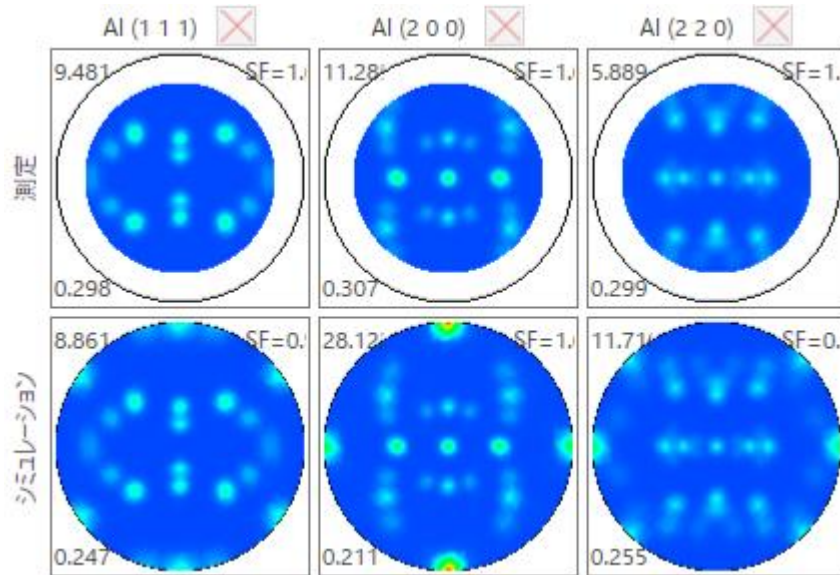


反射極点図



3. newODFによる解析

3. 1 WIMVによる解析



ODF計算

計算方式: WIMV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

ODFグリッド

φ₁ステップ(°): 5.00

Φステップ(°): 5.00

φ₂ステップ(°): 5.00

パラメータ

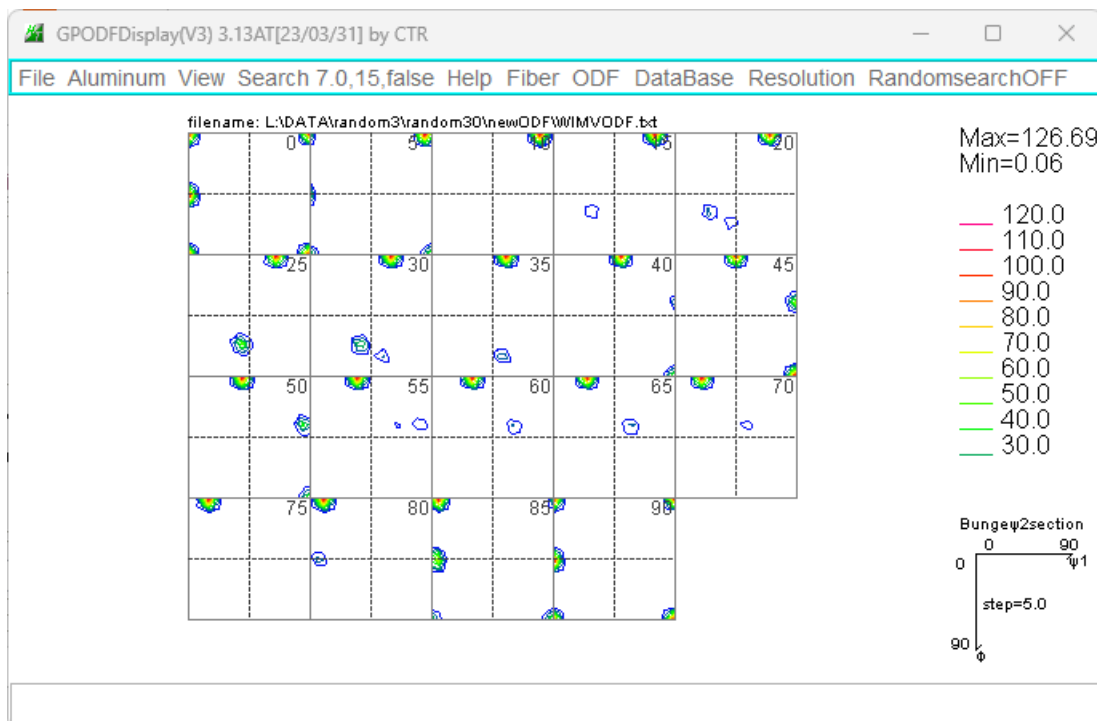
結晶相: Al

最大繰り返し数: 10

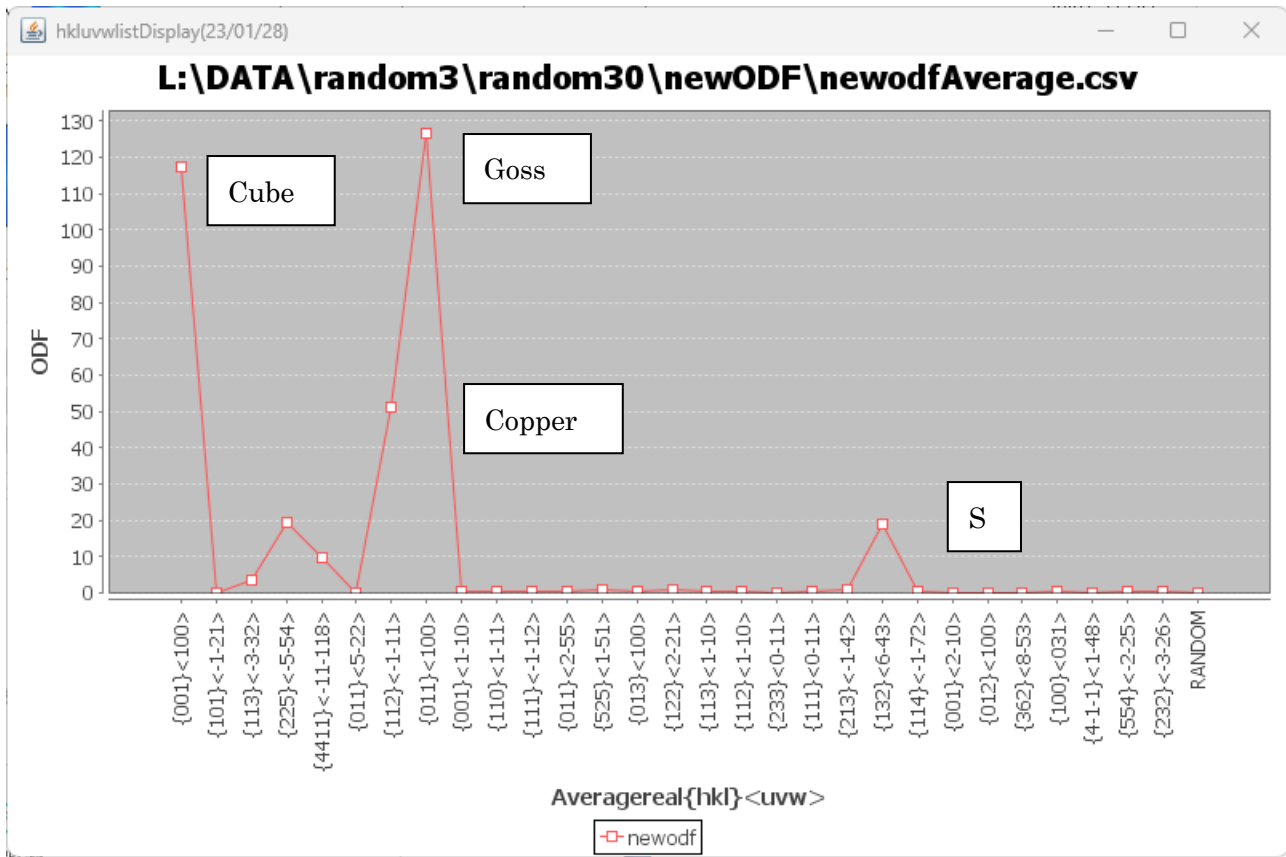
ε = 0.0100

バックグラウンドをフィッティング:

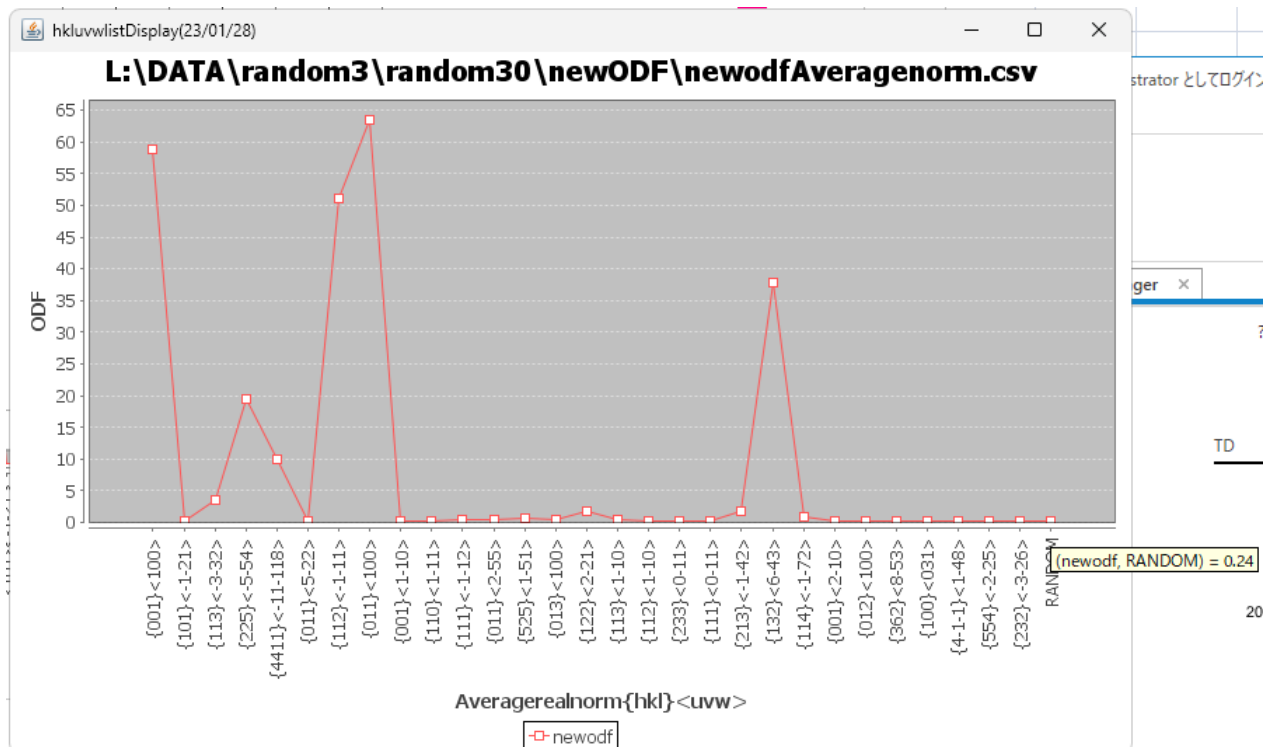
RP因子=3.98 ステータス: 十分な数の測定極点図から計算



方位密度



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

ODFを計算
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

ODFグリッド

φ_1 ステップ(°): 5.00

Φ ステップ(°): 5.00

φ_2 ステップ(°): 5.00

パラメーター

結晶相: Al

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 χ^2 : 0.1

重み: 50.00 クロスオーバー: 50.00

ODFをシミュレート

RP因子=0.13 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 of 分率 0.30 最小: 0.00 最大: 1.00 フィッティング:

体積分率 (%): 9.09

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	<input checked="" type="checkbox"/>	(0 1 1) [1 0 0]	30.30
2	ピーク	Copper	#FFC	<input checked="" type="checkbox"/>	(1 2 1) [1 -1 1]	30.30
3	ピーク	Cube	#FF8\$	<input checked="" type="checkbox"/>	(0 0 1) [1 0 0]	30.30

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	1.00	0.00	1.00	<input checked="" type="checkbox"/>
FWHM (°)	10.00	1.00	40.00	<input checked="" type="checkbox"/>
φ_1 (°)	0.00	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>
Φ (°)	45.00	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>
φ_2 (°)	0.00	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>

重要：煩雑であるが全ての方位に同一の指定を行う

解析結果

ODFを計算

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

ODFグリッド

φ_1 ステップ(°): 5.00

Φ ステップ(°): 5.00

φ_2 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 χ^2 : 0.1

重み: 50.00

クロスオーバー: 50.00

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	<input checked="" type="checkbox"/>	(0 1 1) [1 0 0]	19.20
2	ピーク	Copper	#FFC	<input checked="" type="checkbox"/>	(1 2 1) [1 -1 1]	23.60
3	ピーク	Cube	#FF8	<input checked="" type="checkbox"/>	(0 0 1) [1 0 0]	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	フィッティング
分率	0.19	0.00	1.00	<input checked="" type="checkbox"/>
FWHM (°)	9.91	1.00	40.00	<input checked="" type="checkbox"/>
φ_1 (°)	0.00	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>
Φ (°)	45.00	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>
φ_2 (°)	0.00	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>

70 / 4 = 17.5%ではない

4. 2cube, goss, copper, Sで解析条件

ODFを計算
ODF図をエクスポート

計算方式: コンポーネントセアル

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(°): 5.00

Φステップ(°): 5.00

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=- ステータス: 計算されませんでした

コンポーネント定義

ランダム分率 0.00 最小: 0.00 最大: 1.00 フィッティング:

体積分率 (%): 0.00

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	<input checked="" type="checkbox"/>	(0 1 1)[1 0 0]	25.00
2	ピーク	Copper	#FFC	<input checked="" type="checkbox"/>	(1 2 1)[1 -1 1]	25.00
3	ピーク	Brass	#FFA	<input checked="" type="checkbox"/>	(0 1 1)[2 -1 1]	25.00
▶ 4	ピーク	S	#FF95	<input checked="" type="checkbox"/>	(1 3 2)[6 -4 3]	25.00

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	1.00	0.00	1.00	<input checked="" type="checkbox"/>
FWHM (°)	10.00	1.00	40.00	<input checked="" type="checkbox"/>
φ ₁ (°)	27.03	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>
Φ (°)	57.69	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>
φ ₂ (°)	18.44	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>

重要：煩雑であるが全ての方位に同一の指定を行う

解析後

ODFを計算
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

ODFフィット

φ₁ステップ(°): 5.00

Φステップ(°): 5.00

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=0.13 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

ランダム分率 0.30 最小: 0.00 最大: 1.00 フィッティング:

体積分率 (%): 30.00

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

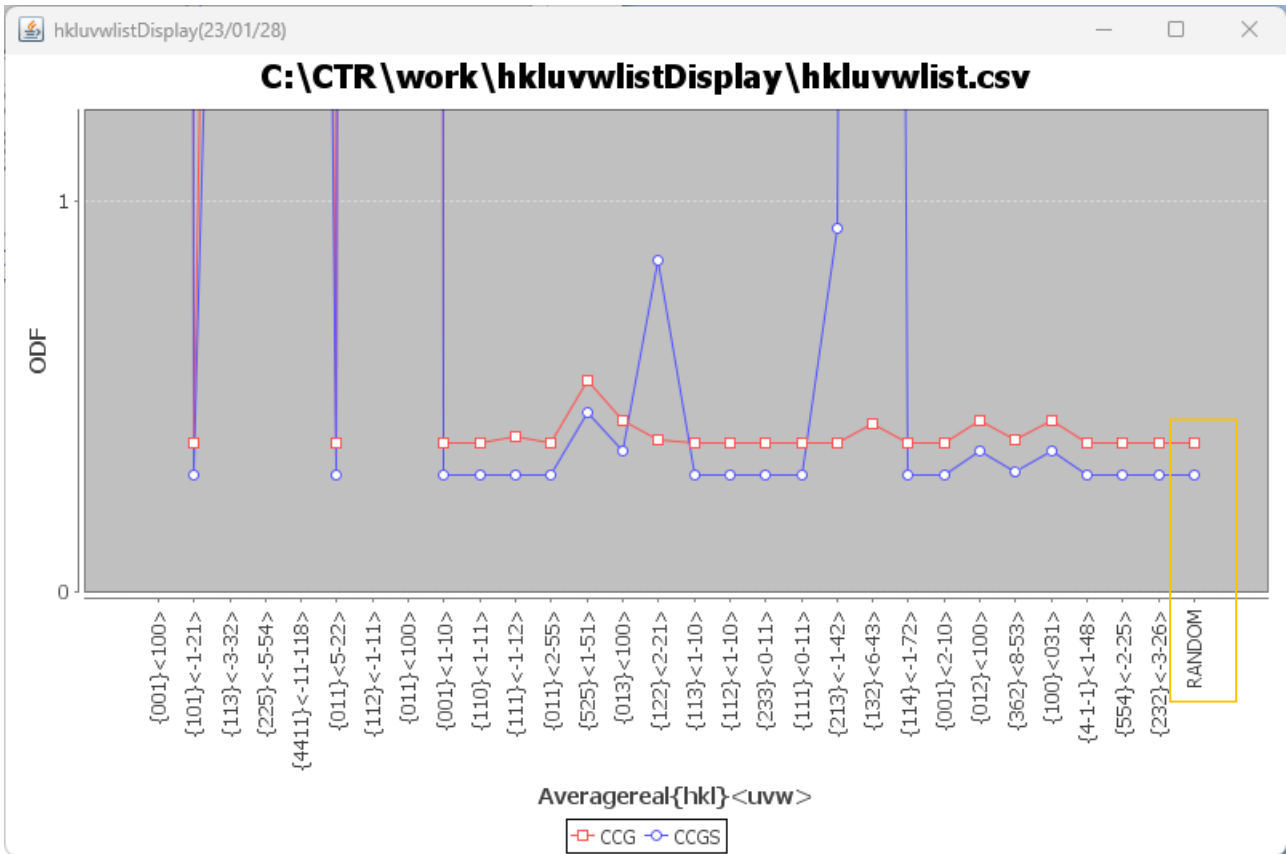
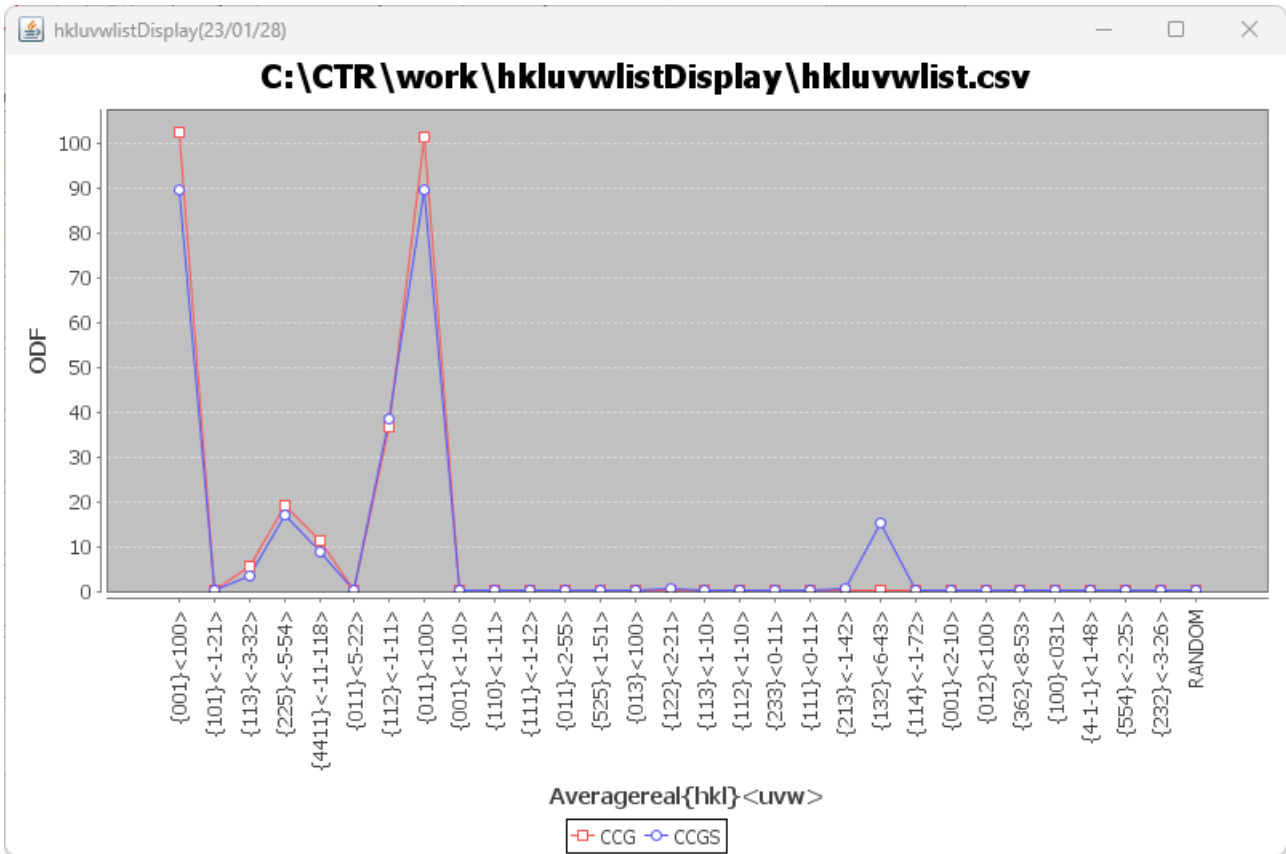
N	タイプ	名称	色	極点図上に表示	方位	体積分率(%)
▶ 1	ピーク	Goss	#FFC0CB	<input checked="" type="checkbox"/>	(0 1 1)[1 0 0]	17.50
2	ピーク	Copper	#FFC080	<input checked="" type="checkbox"/>	(1 2 1)[1 -1 1]	17.50
3	ピーク	S	#FF9966	<input checked="" type="checkbox"/>	(1 3 2)[6 -4 3]	17.50
4	ピーク	Cube	#FF8C00	<input checked="" type="checkbox"/>	(0 0 1)[1 0 0]	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	<input checked="" type="checkbox"/>
FWHM (°)	10.01	1.00	40.00	<input checked="" type="checkbox"/>
φ ₁ (°)	0.00	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>
Φ (°)	45.00	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>
φ ₂ (°)	0.00	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>

$V F \% = 70 / 4 = 17.5\%$ 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Volume Fraction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 randomに含まれる。

6. 方位を多めに登録すると

ODFを計算 ODF図をエクスポート

α解析開始角度(°): 0.00 φ₂ステップ(°): 5.00

α解析終了角度(°): 90.00

パラメータ

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=1.33 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

ランダム分率 0.22 最小: 0.00 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		<input checked="" type="checkbox"/>	(0 1 1)[1 0 0]	17.40
2	ピーク	Copper		<input checked="" type="checkbox"/>	(1 2 1)[1 -1 1]	17.50
3	ピーク	S		<input checked="" type="checkbox"/>	(1 3 2)[6 -4 3]	17.10
4	ピーク	Cube		<input checked="" type="checkbox"/>	(0 0 1)[1 0 0]	15.90
5	ピーク	Taylor		<input checked="" type="checkbox"/>	(4 11 4)[11 -8 11]	3.90
6	ピーク	RW		<input checked="" type="checkbox"/>	(0 0 1)[1 0 0]	1.90
▶ 7	ピーク	Brass		<input checked="" type="checkbox"/>	(0 1 1)[2 -1 1]	4.30

コンポーネントプロパティ

パラメータ	値	最小	最大	フィッティング
分率	0.04	0.00	1.00	<input checked="" type="checkbox"/>
FWHM (°)	39.83	1.00	40.00	<input checked="" type="checkbox"/>
φ ₁ (°)	35.26	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>
Φ (°)	45.00	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>
φ ₂ (°)	0.00	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>

合計は78%

残りをrandom30%→22%

7. 比率を変えて評価

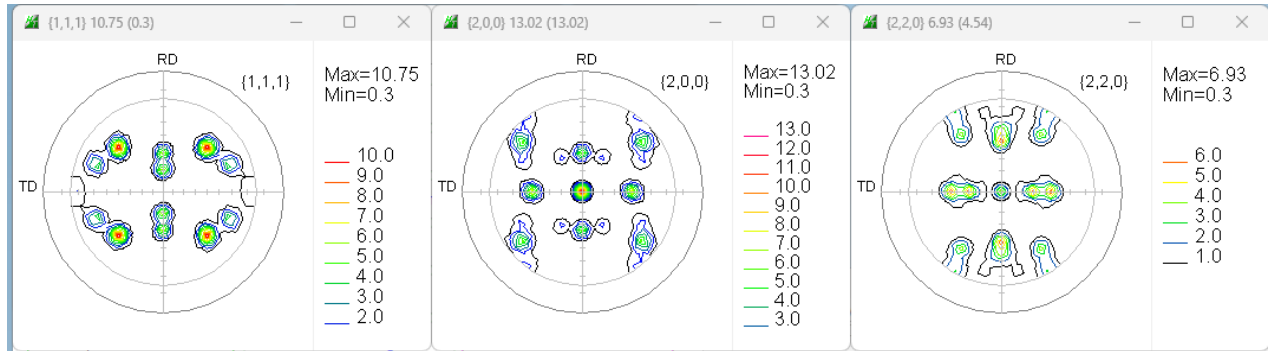
$$\text{ODF} = 0.3 * \text{unimodalODF}(\text{Ori1}, \text{psi}) + 0.3 * \text{unimodalODF}(\text{Ori2}, \text{psi}) + \\ 0.2 * \text{unimodalODF}(\text{Ori3}, \text{psi}) + 0.2 * \text{unimodalODF}(\text{Ori4}, \text{psi})$$

$$\text{odf} = 0.7 * \text{ODF} + 0.3 * \text{randomODF}$$

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

$$\text{rpf} = \text{calcPoleFigure}(\text{odf}, h)$$

Export後、Orthorhombic、反射極点処理



このデータは、

C u b e , G o s s 2 1 %

c o p p e r , S 1 4 %

r a n d o m 3 0 %

解析結果

ODFを計算

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

ODFフリット

ϕ_1 ステップ(°): 5.00

Φ ステップ(°): 5.00

ϕ_2 ステップ(°): 5.00

パラメータ

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 χ^2 : 0.1

重み: 50.00 クロスオーバー: 50.00

RP因子=0.15 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

ランダム分率: 0.30 最小: 0.00 最大: 1.00 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	Goss		<input checked="" type="checkbox"/>	(0 1 1)[1 0 0]	14.00
2	ピーク	Copper		<input checked="" type="checkbox"/>	(1 2 1)[1 -1 1]	21.00
3	ピーク	S		<input checked="" type="checkbox"/>	(1 3 2)[6 -4 3]	14.00
4	ピーク	Cube		<input checked="" type="checkbox"/>	(0 0 1)[1 0 0]	21.00

コンポーネントプロパティ

パラメータ	値	最小	最大	フィッティング
分率	0.14	0.00	1.00	<input checked="" type="checkbox"/>
FWHM (°)	10.01	1.00	40.00	<input checked="" type="checkbox"/>
ϕ_1 (°)	0.00	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>
Φ (°)	45.00	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>
ϕ_2 (°)	0.00	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>

8. Brassを追加した場合

ODFを計算 ODF図をエクスポート

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

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 χ^2 : 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: 十分な数の測定極点図から計算

コンポーネント定義

ランダム分率: 0.28 最小: 0.00 最大: 1.00 フィッティング:

体積分率 (%): 27.70

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		<input checked="" type="checkbox"/>	(0 1 1)[1 0 0]	14.10
2	ピーク	Copper		<input checked="" type="checkbox"/>	(1 2 1)[1 -1 1]	21.20
3	ピーク	S		<input checked="" type="checkbox"/>	(1 3 2)[6 -4 3]	14.10
4	ピーク	Brass		<input checked="" type="checkbox"/>	(0 1 1)[2 -1 1]	1.60
5	ピーク	Cube		<input checked="" type="checkbox"/>	(0 0 1)[1 0 0]	21.30

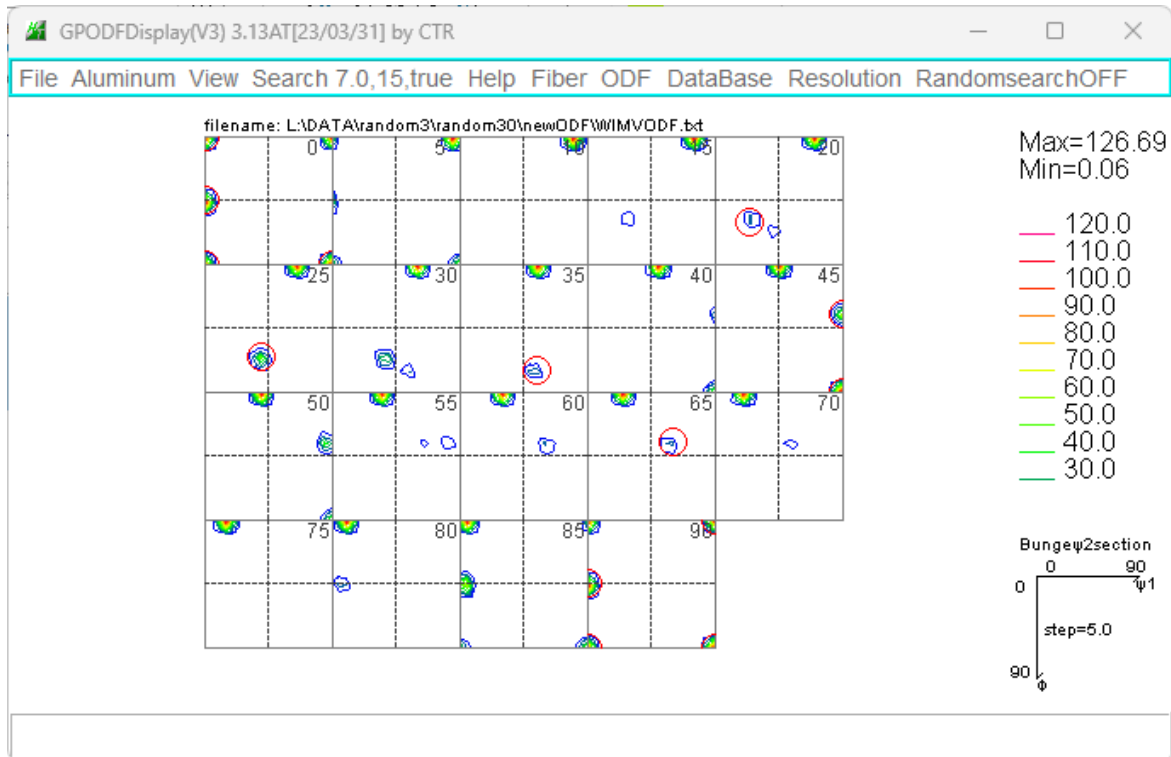
コンポーネントプロパティ

パラメーター	値	最小	最大	フィッティング
分率	0.14	0.00	1.00	<input checked="" type="checkbox"/>
FWHM (°)	10.01	1.00	40.00	<input checked="" type="checkbox"/>
φ_1 (°)	0.00	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>
Φ (°)	45.00	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>
φ_2 (°)	0.00	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>

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

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。



TextDisplay 1.14S C:\CTR\work\GPODFDisplay\CALCHKLUVW.TXT

File Help

f1	F	f2	ODF	calcF1	calcF	calcF2	ODF(real)	hkluvw	EqualDirection
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	
MAXODF= 126.69		MINIODF= 0.06							

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。