

r a n d o m と方位の関係

2023年01月27日

HelperTex Office

1. 概要
2. シミュレーションデータ
3. 使用したCTRソフトウェア
4. MTEXで作成されたODF
5. 方位密度を求める
6. 密度の 1 : 2 : 4 規格化
7. の解析を反射極点図から解析を行う
8. GPODFDisplayでピークサーチ
9. Randomの定量
10. LaboTexのODF解析時Rp% (入力極点図と再計算極点図から)
11. LaboTexによるVolumeFraction
12. S方位を除いたVF%
13. S方位を含んだ解析
14. cube, goss, copper, SのVolumeFractionから計算したODF図
15. VolumeFraction比較

1. 概要

方位を扱う場合、random方位値は重要である。

ODF解析時、方位のVolume Fraction (定量) を計算してもRp%が悪い場合があります。

原因は、未定量方位とrandomの存在があります。

全ODF = 既知方位 (VF%) + 未定量方位 + random方位になります。

予めrandom方位量を計算出来れば、未定量方位量が分かります。

本資料では、既知方位とrandom量の関係を説明します。

2. シミュレーションデータ

MTEXによりrandom100%、70%、30%、0%データ作成

```
CS= crystalSymmetry('cubic')
```

```
SS = specimenSymmetry('1')
```

```
randomODF = uniformODF(CS,SS)
```

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

```
Cube
```

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

```
Copper
```

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

```
Goss
```

```
Ori3= orientation.byMiller([1 1 0],[0 0 1],CS)
```

```
S
```

```
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)
```

```
Random100%
```

```
odf=randomODF
```

```
Random70%
```

```
odf=0.7*randomODF+0.3*ODF
```

```
Random30%
```

```
odf=0.3*randomODF+0.7*ODF
```

```
Random0%
```

```
Odf=ODF
```

3. 主に使用したCTRソフトウェア

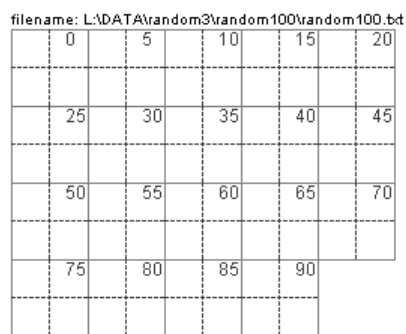
```
GPODFDisplay (Ver. 3. 13A)
```

```
hkluvwDisplay (1. 05)
```

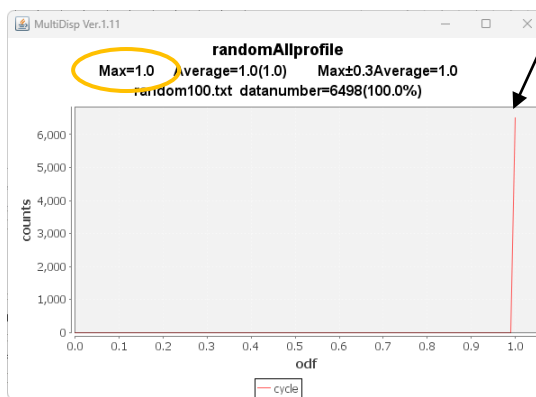
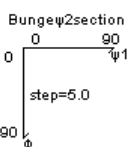
```
ValueODFVF (Ver. 2. 37)
```

4. M T E Xで作成された ODF

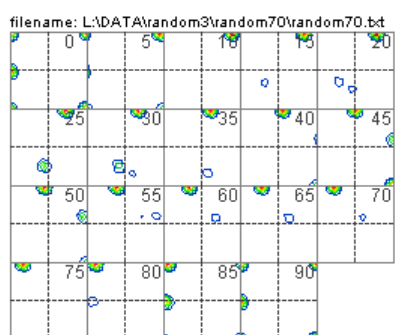
Random100%



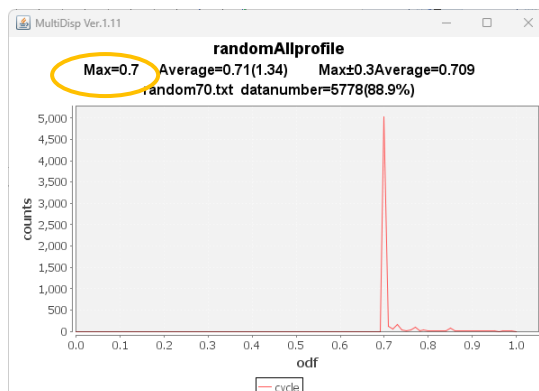
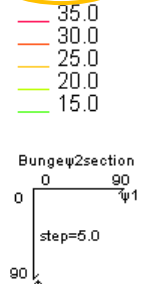
Max=1.0
Min=1.0



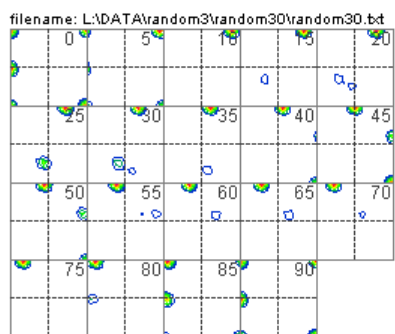
Random70%



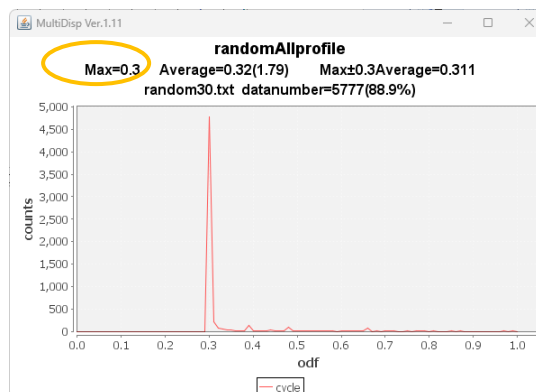
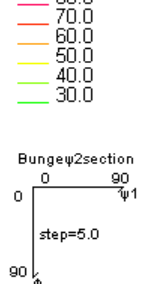
Max=39.13
Min=0.7



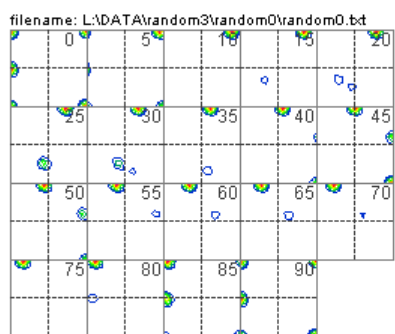
Random30%



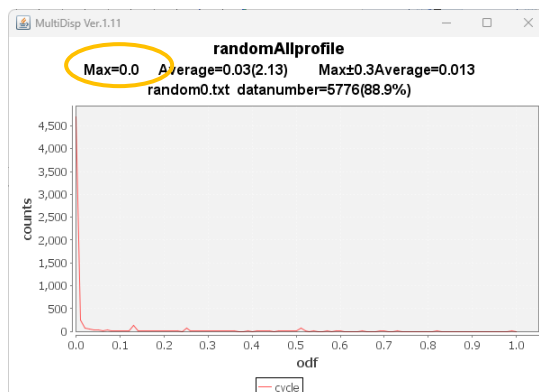
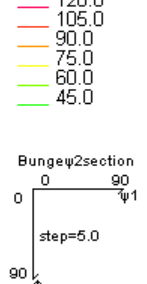
Max=89.98
Min=0.3



Random0%

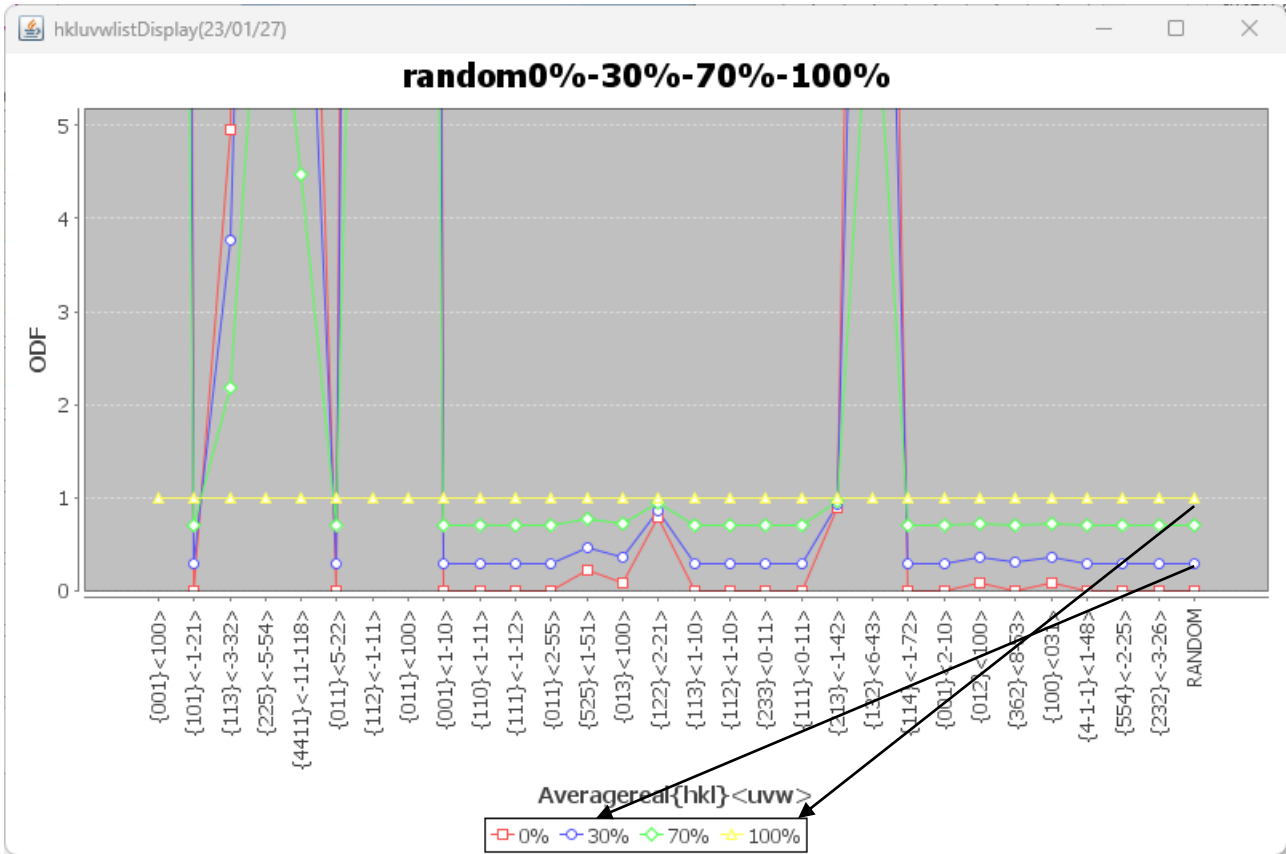
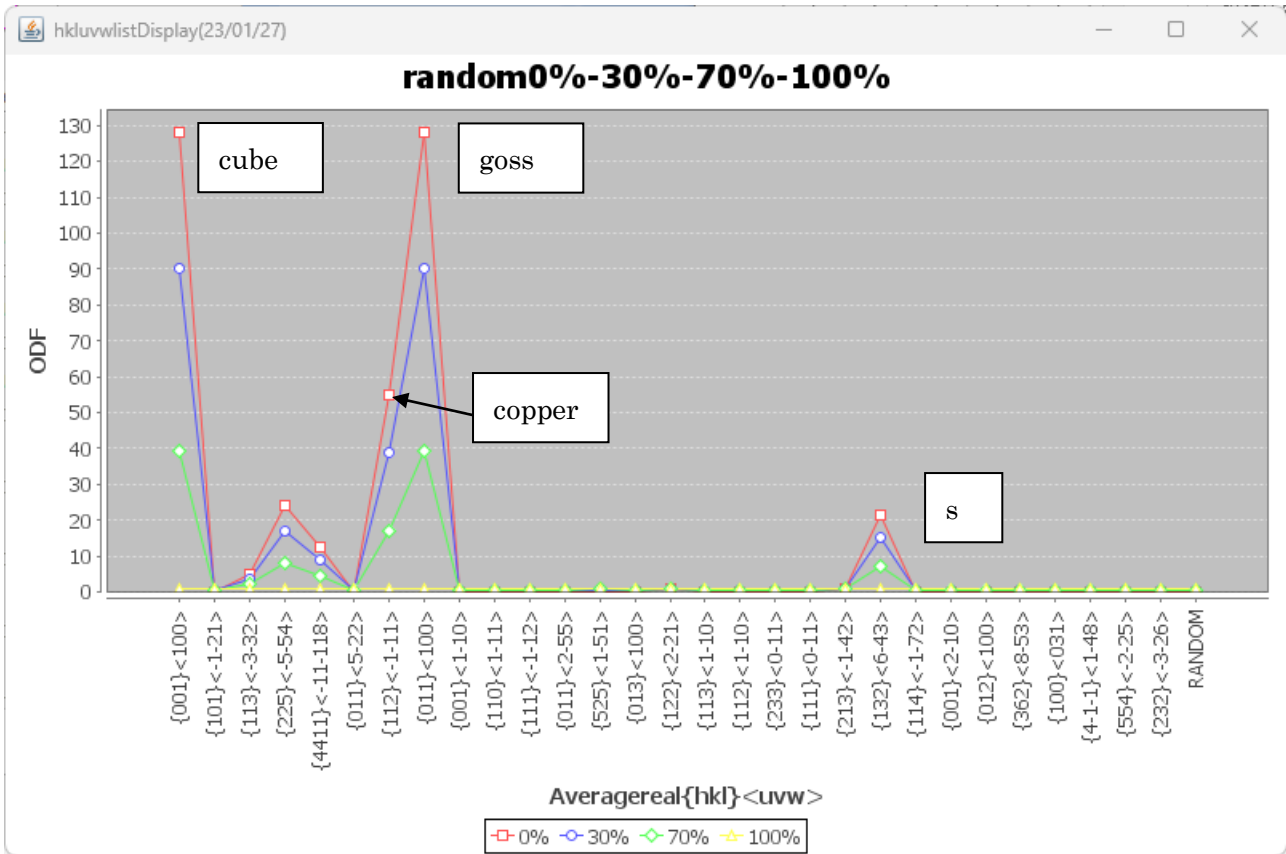


Max=120.12
Min=0.0



実データでは、乱れが発生するため、右図の RandomLevel 計算で求められます。

5. 方位密度を求める

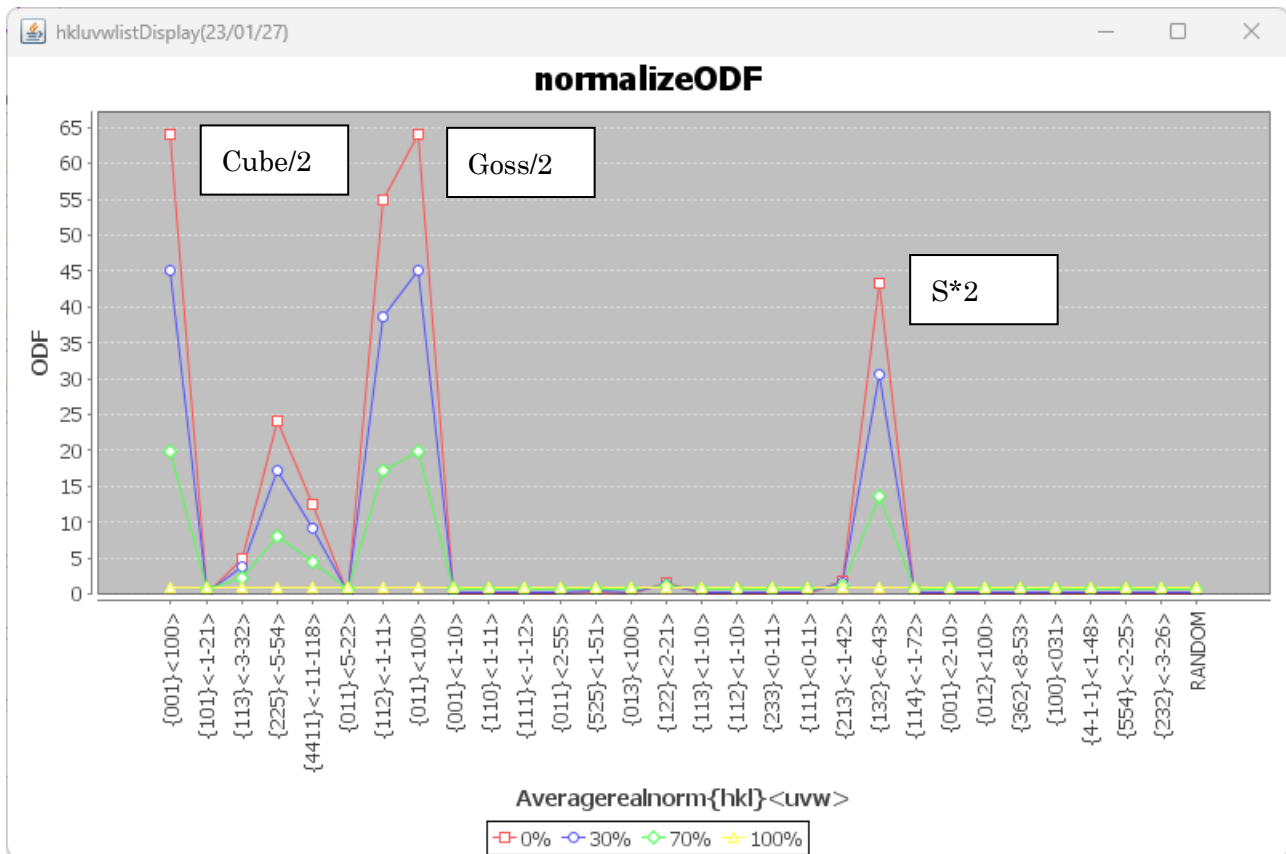


Random は最小方位 * 100% で検出されます。

実試料の場合、最小値ではなく、RandomLevel サーチにより最大頻度位置として計算されます。

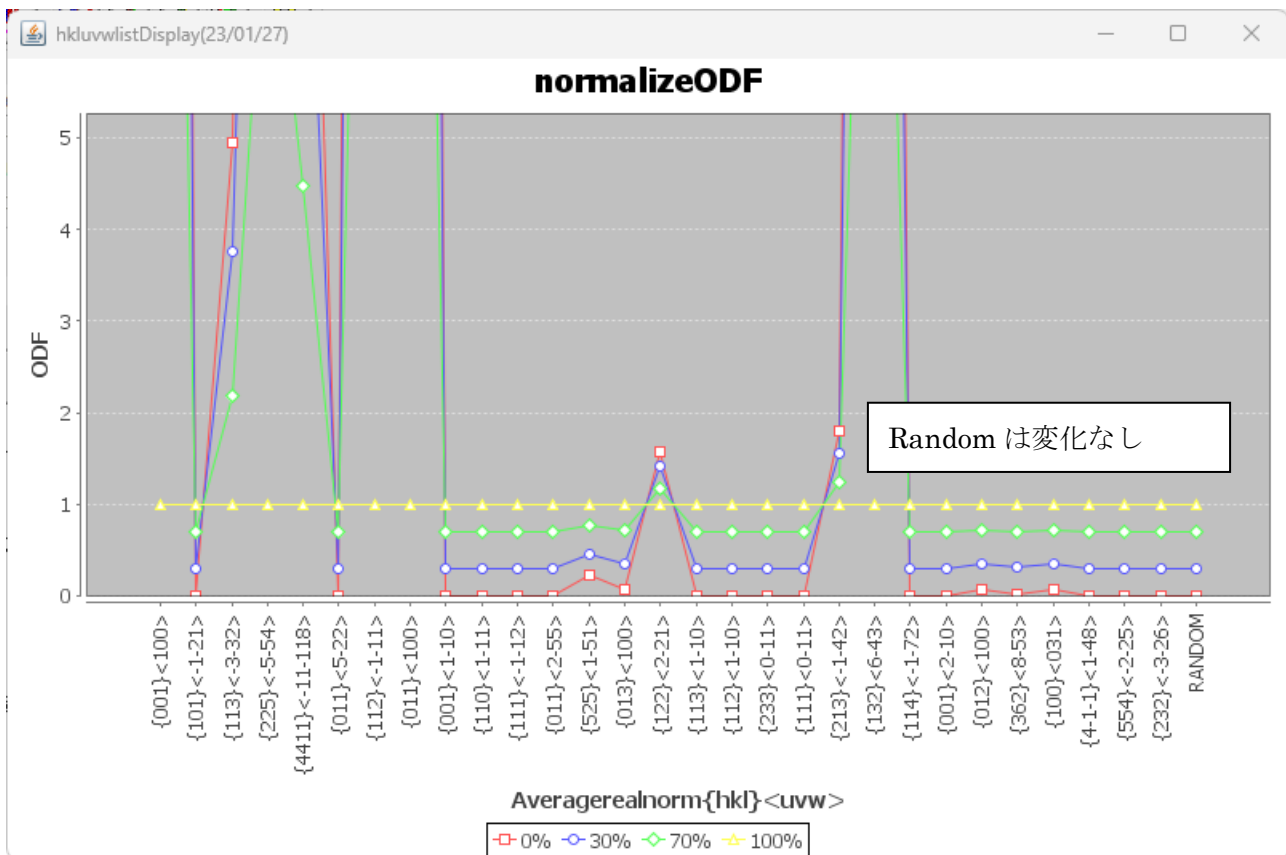
random が下がる割合で方位密度が高くなります。

6. 密度の 1 : 2 : 4 規格化



計算時, r a n d o m 方位を減算し、計算後、r a n d o m 方位を加算しています。

c o p p e r, S 方位は5度間隔の格子点を外れているため、規格化しても c u b e や G o s s と一致しない

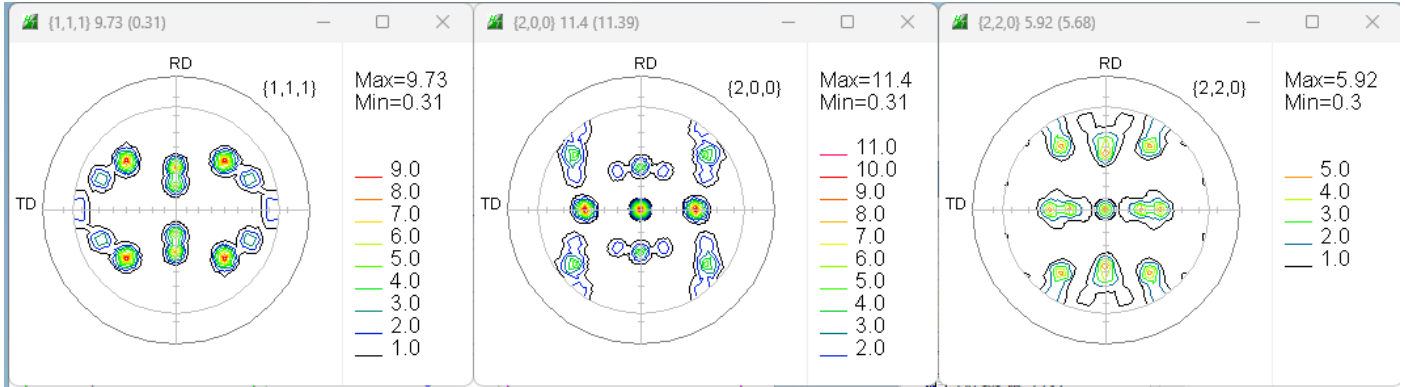


7. の解析を反射極点図から解析を行う

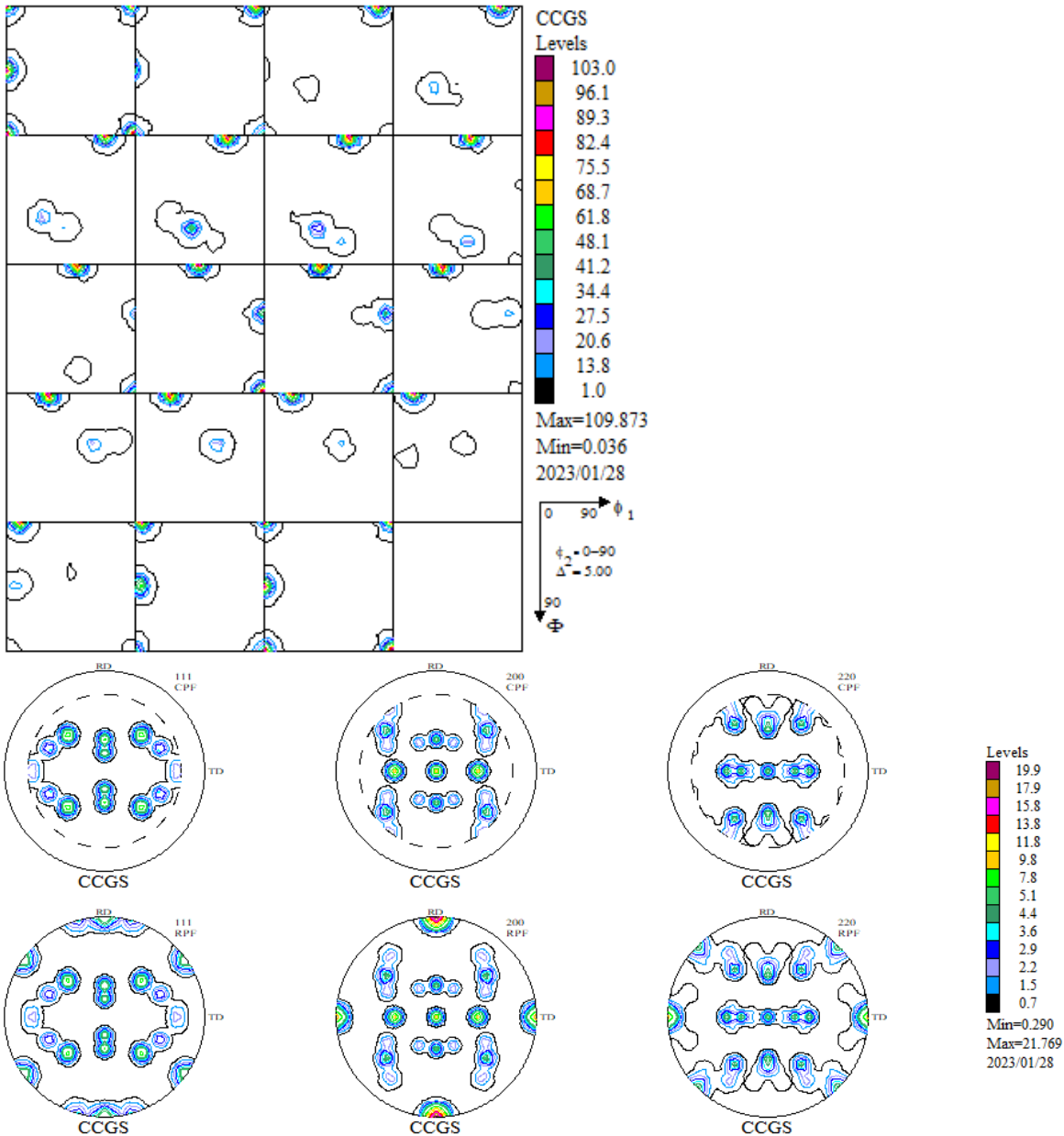
$h = \{\text{Miller}(1,1,1,CS), \text{Miller}(2,0,0,CS), \text{Miller}(2,2,0,CS)\}$

`rpf=calcPoleFigure(odf,h)`

rpf を export し、反射極点図(Orthorhombic 化)



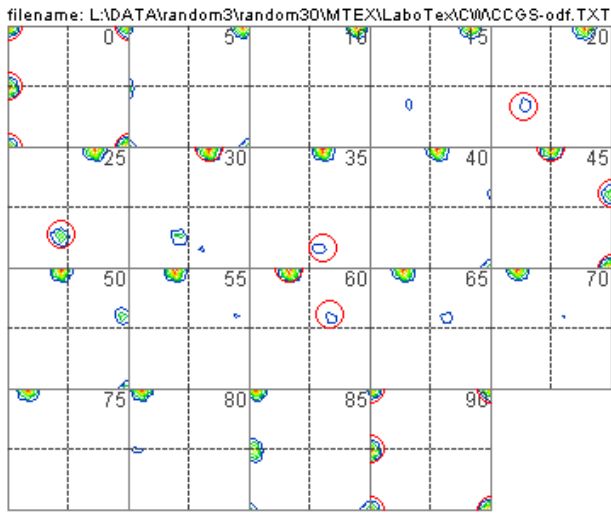
La b o T e x で解析



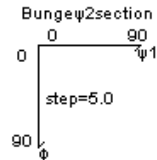
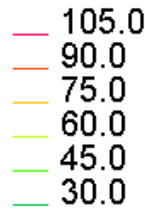
ODF 図を E X p o r t し、方位と random を予め調べる。

極点図を E X p o r t し、R p % を計算

8. GPODFDisplayでピークサーチ



Max=109.
Min=0.04



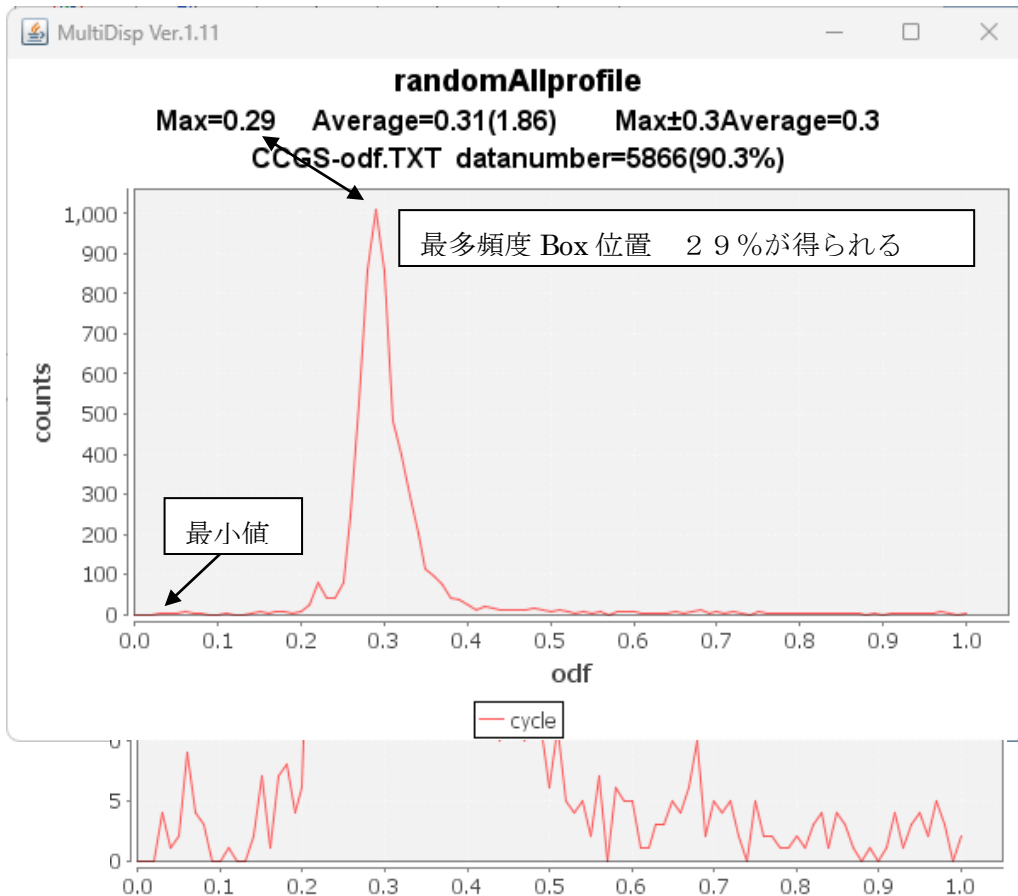
TextDisplay 1.14S C:\CTR\work\GPODFDisplay\CALCHKLUVW.TXT

File Help

f1	F	f2	ODF	calc1	calcF	calc2	ODF(real)	hkluvw	EqualDirection
0.0	0.0	0.0	109.93	0.0	0.0	0.0	104.64	(0 0 1)[1 0 0]	cube 11
0.0	45.01	0.0	107.9	0.0	45.0	0.0	105.18	(0 1 1)[1 0 0]	goss 3
39.93	65.49	25.85	58.77	39.23	65.91	26.57	48.6	(1 2 1)[1 -1 1]	copper 2
27.03	57.69	18.43	24.66	27.03	57.69	18.43	(1 3 2)[6 -4 3]	S 1	

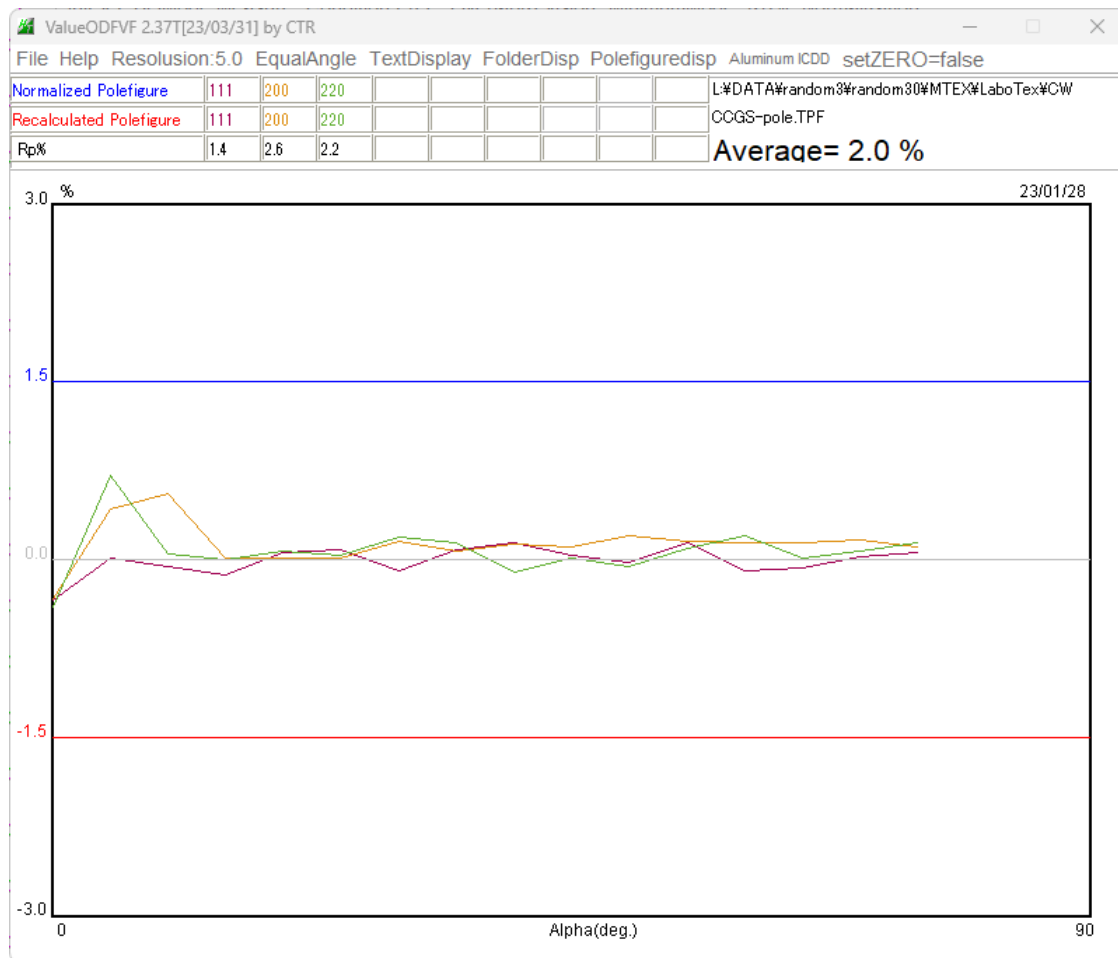
MAXODF= 109.93 MINIODF= 0.04

9. Randomの定量

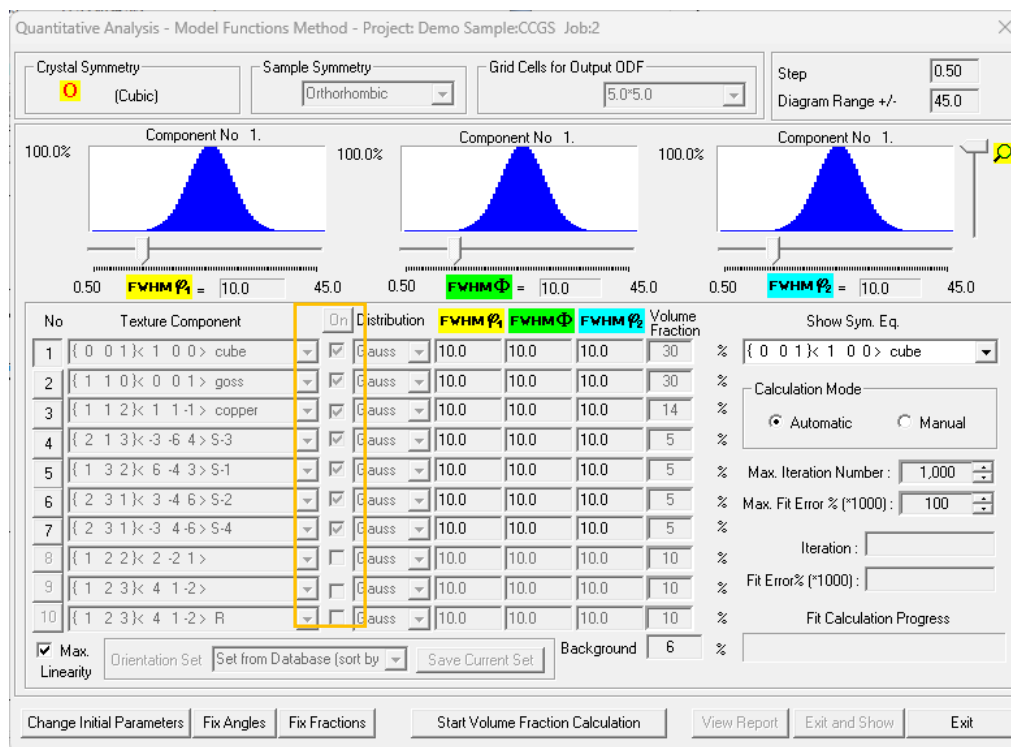


方位としてcube, goss, copper, S, randomは29%が得られた。

10. LaboTexのODF解析時Rp% (入力極点図と再計算極点図から)

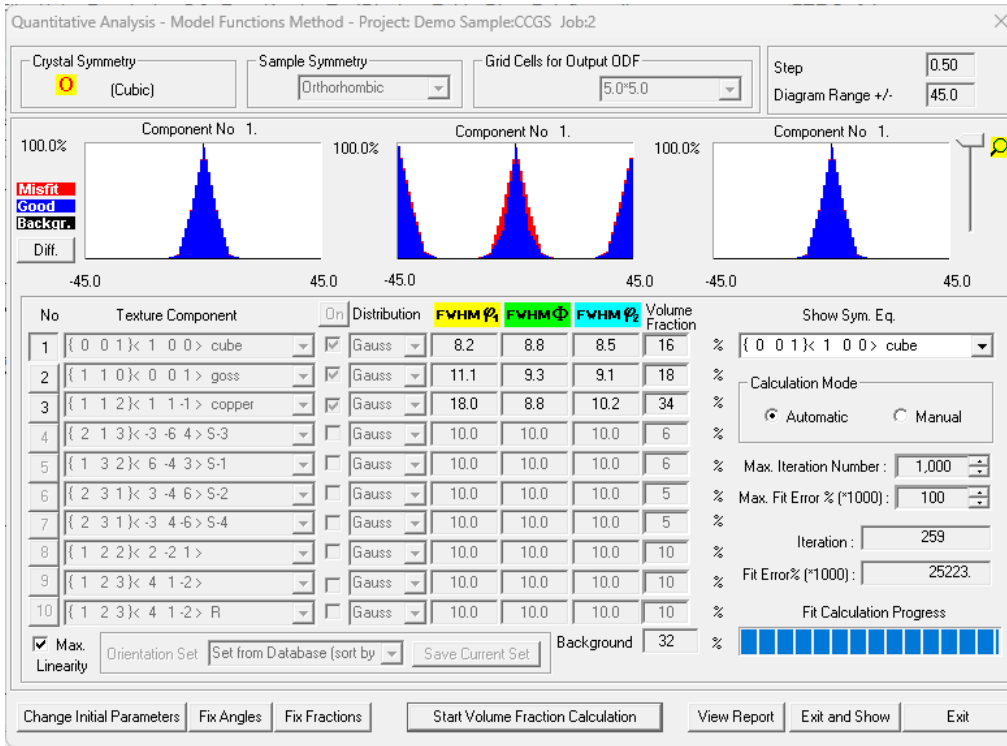


11. LaboTexによるVolumeFraction

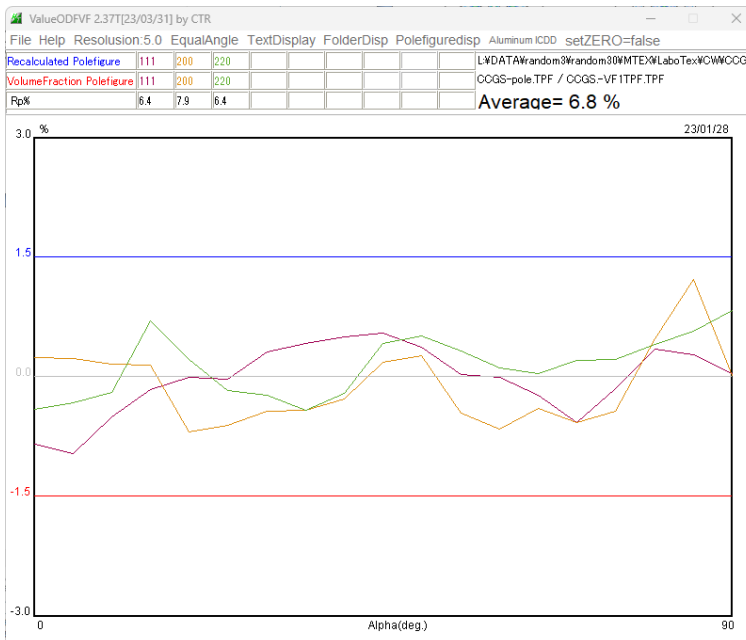
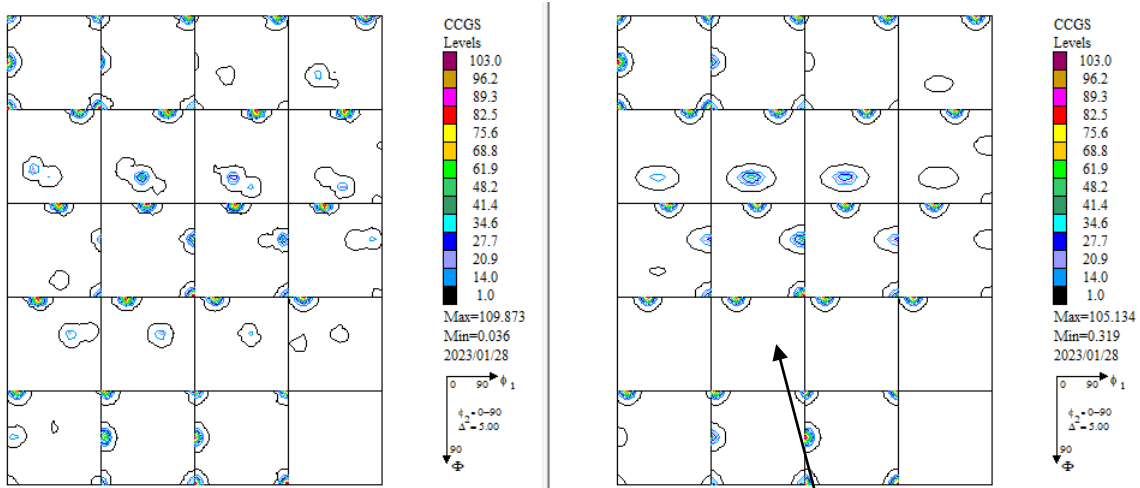


既に、cube, goss, copper, Sを検出しているがSを除いてVF%を求める。

1 2. S方位を除いたVF%



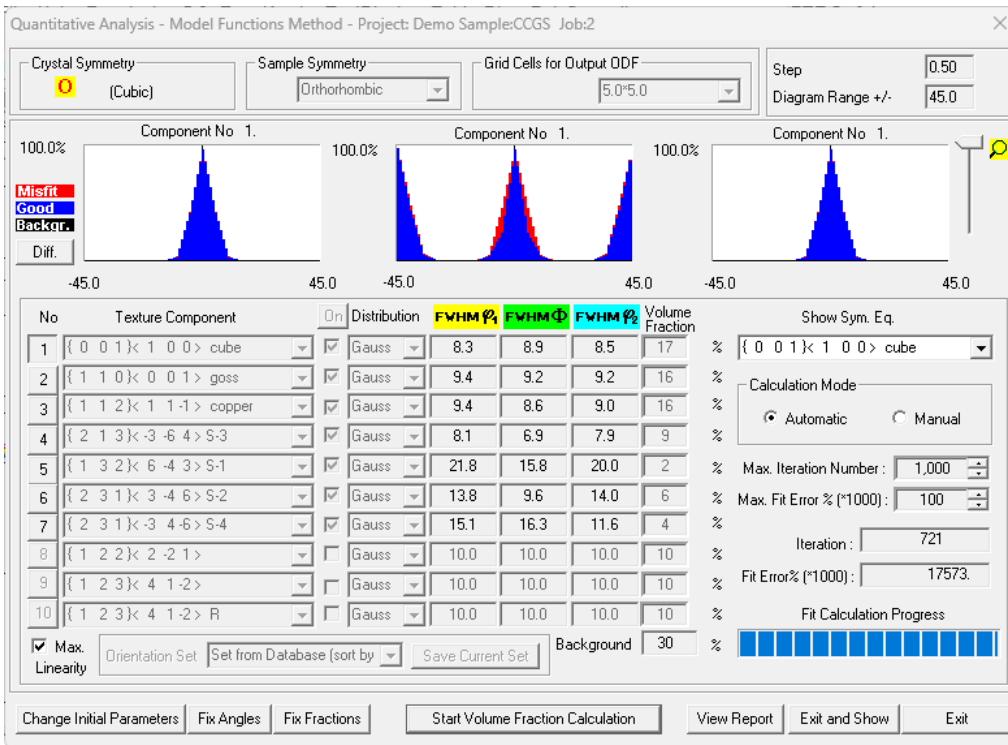
GPODF Displayで計算したrandomよりBackgroundが大きい



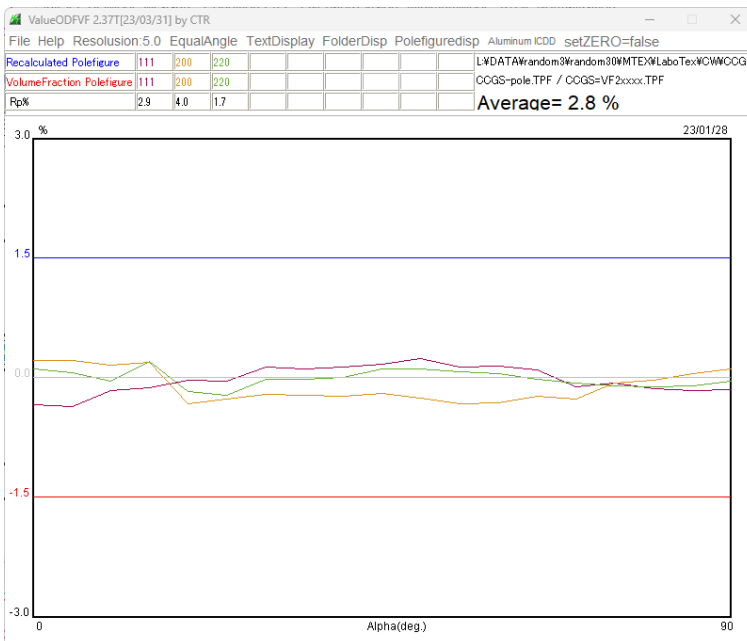
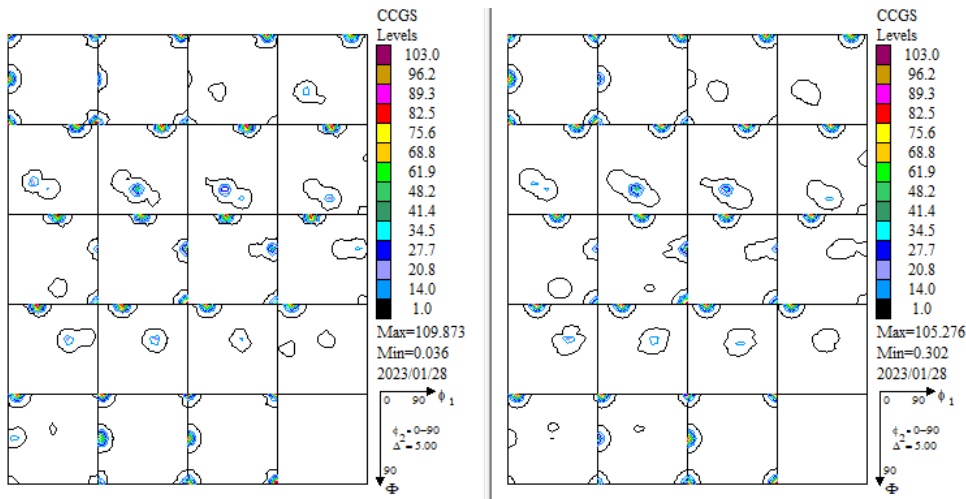
S方位が抜けている

±1.5%内であるが
乱れが生じている

1.3. S方位を含んだ解析

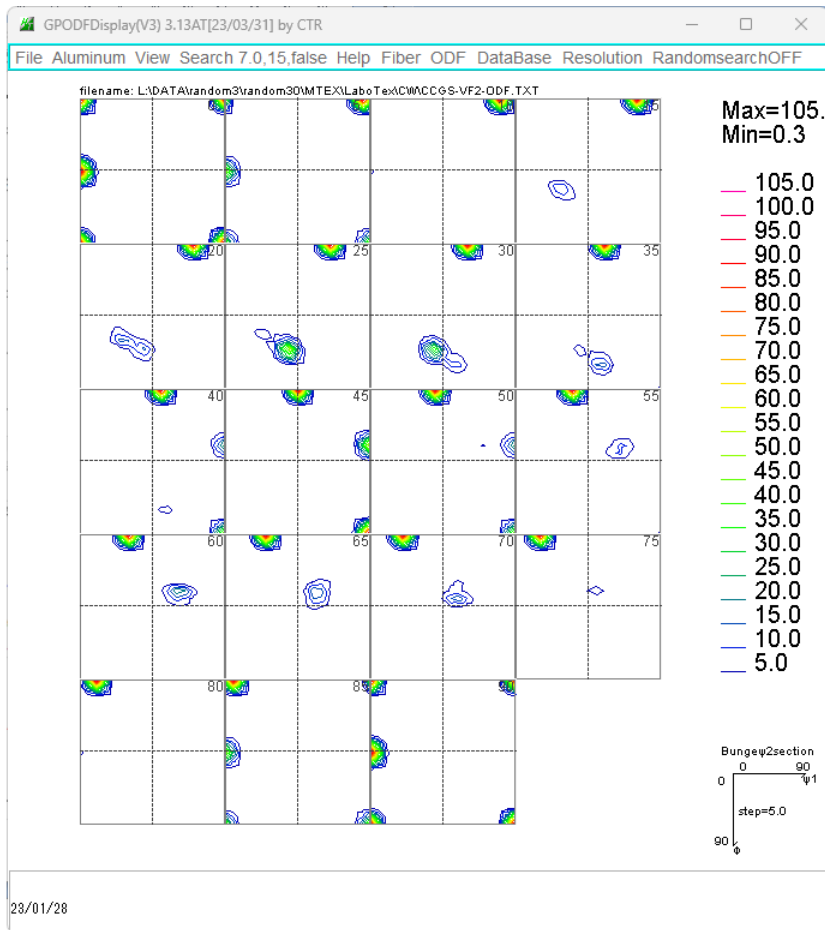


GPODFDisplayで計算したrandomよりBackgroundがほぼ等しい

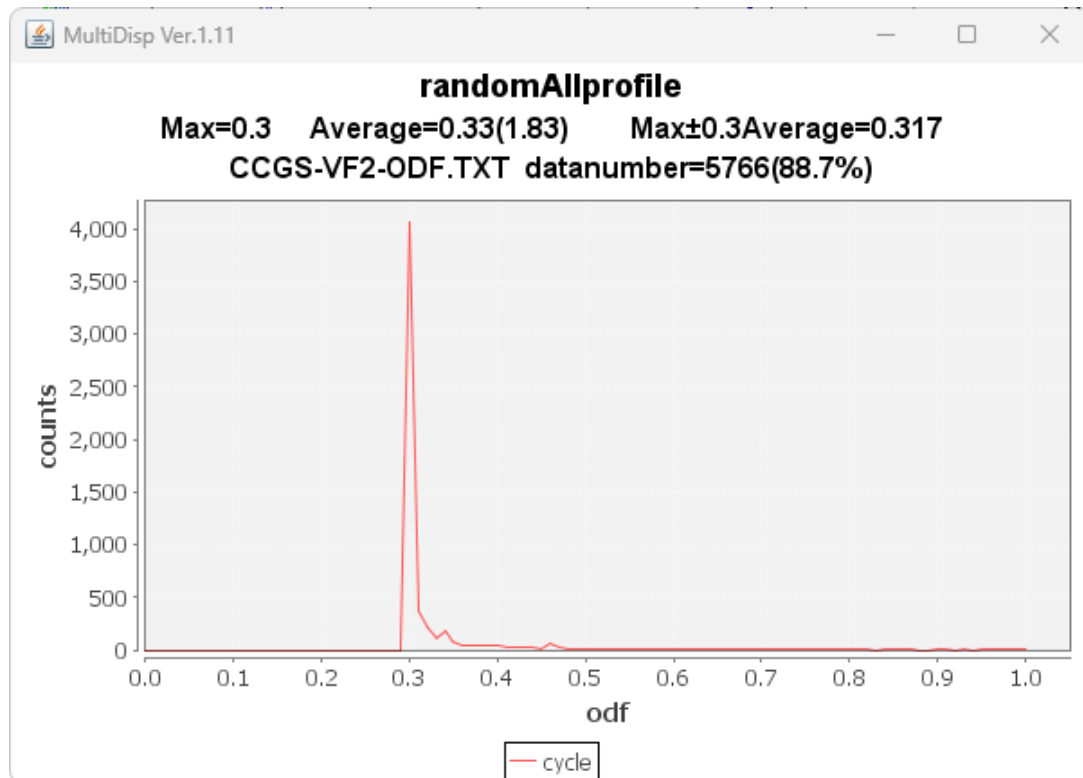


乱れなし

14. cube, goss, copper, SのVolumeFractionから計算したODF図

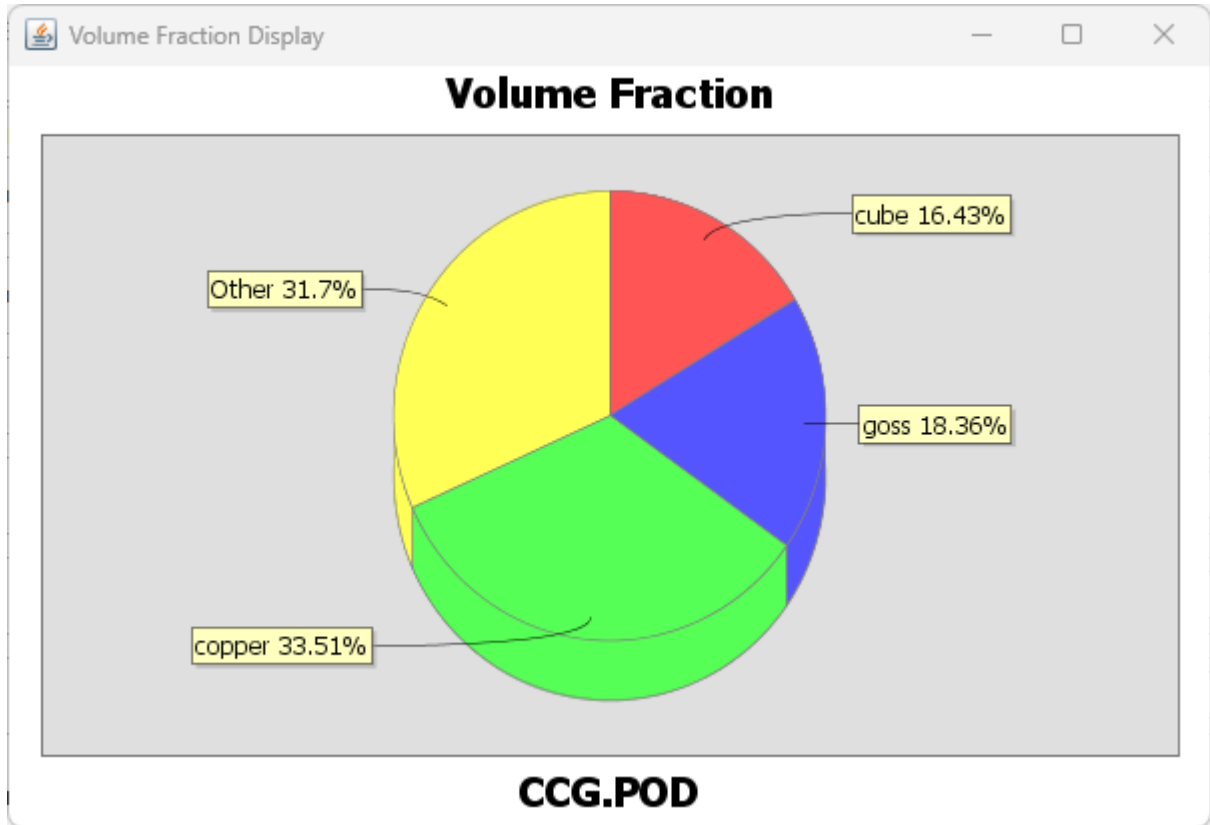


上記 ODF から計算した randomLevel random=30%



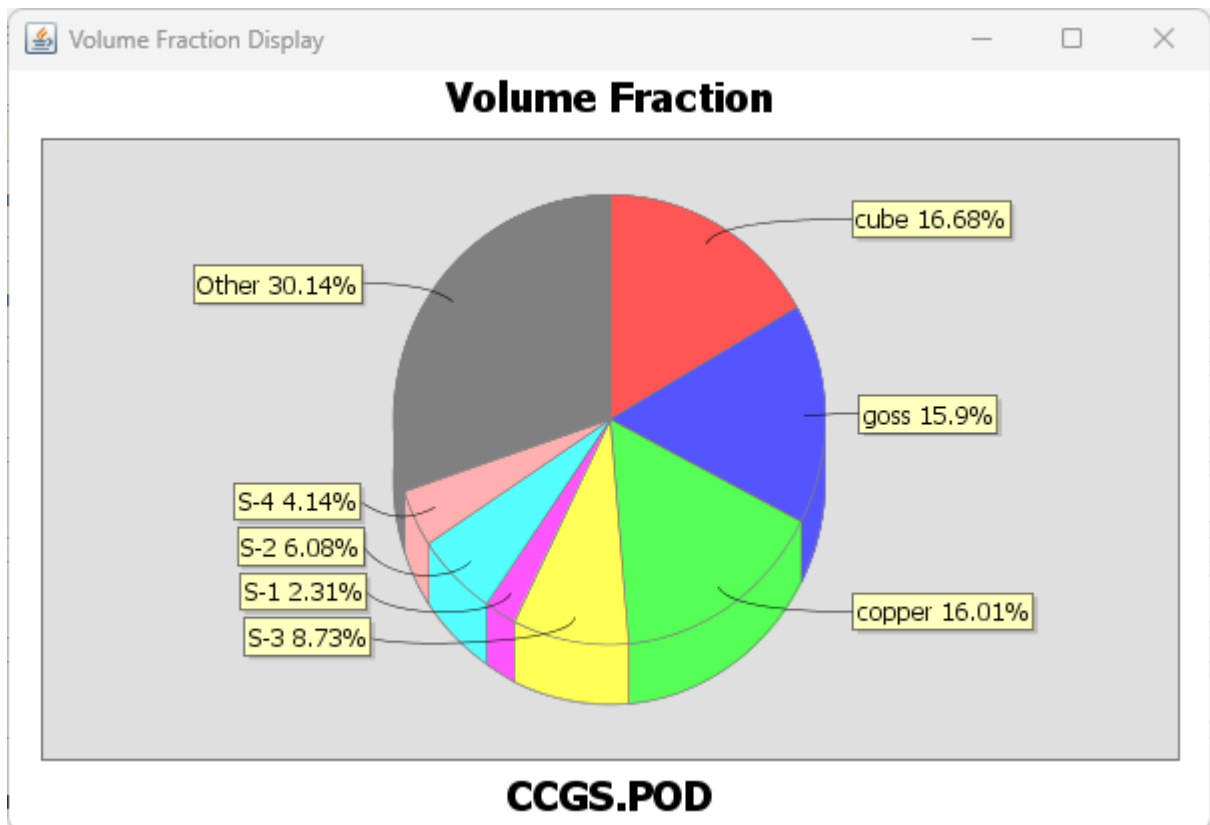
15. Volume Fraction比較

Sを除いたVF%



copperがS方位の補間を行ってしまう。

Sを含むVF% (すべての方位指定)



全て指定出来ないとVF%も乱れます。Otherがrandomである。

GPODFDisplayで求めたrandom (30%) に一致する