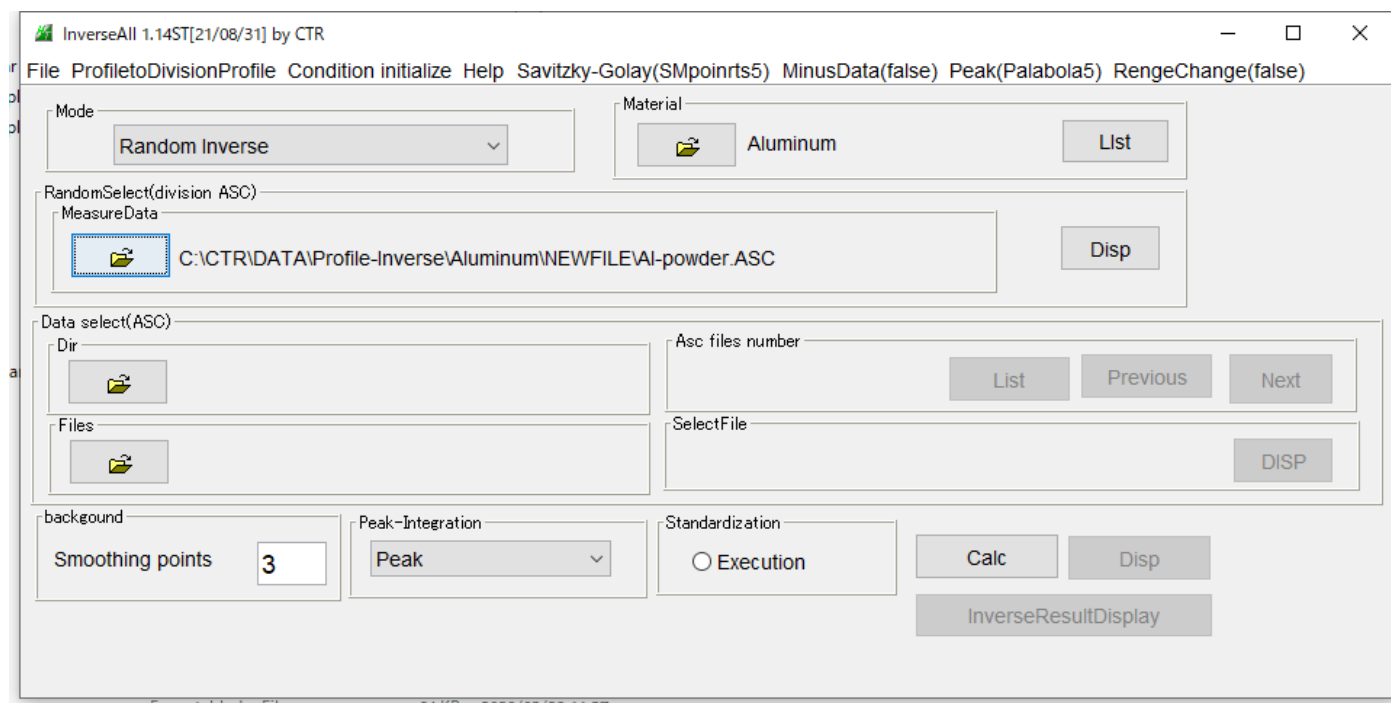


大量の逆極点測定データを一括データ処理して Excel へ

# InverseAll ソフトウェア

Version 1.18



2022年12月17日



HelperTex Office

*Ver 1.02Y 2012/08/31	指数なし分割でも逆極点計算を可能にする。
* Ver 1.03Y 2013-01-17	index が不一致の場合 error 表示を行う
*Ver 1.04Y 2013-05-24	初めて操作する場合、物質選択が出来ないケースを修正
* Ver 1.05Y 2013-09-29	InverseDisplay のサポート
* Ver 1.06Y 2013-10-21	Hexagonal の result.txt ファイルの方位を面に変更[]->0
*Ver 1.07 2014-06-18	強度M a x 値算出ミス修正 L o t g e r i n g m e t h o d をサポート
*Ver1.09S 2017-09-14	データ評価の為にバックグラウンド除去なしを追加
*Ver1.10 2017-10-30	ICDD に登録されているが使用しない場合の対策
*Ver1.11 2018-11-28	測定データが ICDD より狭い場合の対策
*Ver1.12 2019-01-21	InverseResultDisplay に resultfile 渡し
*Ver1.13 2020-09-06	RINT 逆極点のマイナスデータを0, ピーク強度を放物線を追加
*Ver1.14 2020-09-11	データステップ 0.02 への規格化を 0.02 以下の場合、規格化なしとした 積分計算時 random,sample の共通測定範囲の切り出し
*Ver1.15 2020-09-14	逆極点を計算する、random,sample の強度も list に表示出来るよう変更
*Ver1.16 2020/09/20	Peak&FWHM を追加
*Ver1.17 2020/09/22	計算結果の Value を少数点以下1桁とする
*Ver1.18 20222/12/17	Hexagonal に対応、逆極点図表示なし、l i s t のみ表示

1. 概要
2. ソフトウェアの操作方法
  2. 1 解析方法の切り替え (Mode)
  2. 2 標準データの指定 (常に指定)
3. 無配向試料指定 (本ソフトウェアではステレオ三角形表示は行わない) 解析方法 1
4. 無配向試料指定なし、解析方法 2、解析方法 3 では無配向試料指定の必要なし。
5. 計算結果
6. 逆極点図の表示
7. Lotgering method
8. Peak&FWHM に関して

## 1. 概要

大量な圧延板などの結晶方位評価として、圧延面のND方位評価である逆極点評価が用いられている。解析方法としては以下の3種類考えられる。

### 解析方法1

無配向材料との強度比をステレオ三角形にプロット

### 解析方法2

無配向材料を用いなくてICDDなどの強度比データを用いて比較し  
ステレオ三角形にプロット

### 解析方法3

標準データとの比較ではなく、測定されたデータ強度から相対値を計算する。  
測定された分割データの総積分強度との比率 (%)

### 解析方法4

`Lotgering method`

本ソフトウェアはステレオ三角形の逆極点図表示もサポート(ver1.05以降)

上記3種類の解析法を複数の測定データに対して同時に計算を行いLIST化する事を目的とします。

`InverseAll`の`All`は複数のデータの意図である。

又、連続測定データから分割データを作成する `ProfiletoDivisionProfile` ソフトウェアとの連携も可能  
`profiletoDivisionProfile` ソフトウェアは、分割された `Index` のチェックを行い、間違いを修正する機能も  
付属しているので、指数付けされていない分割データでも指数付けが可能。

測定データがICDDより狭い範囲の場合、ICDDデータも狭い範囲に書き換えてください。

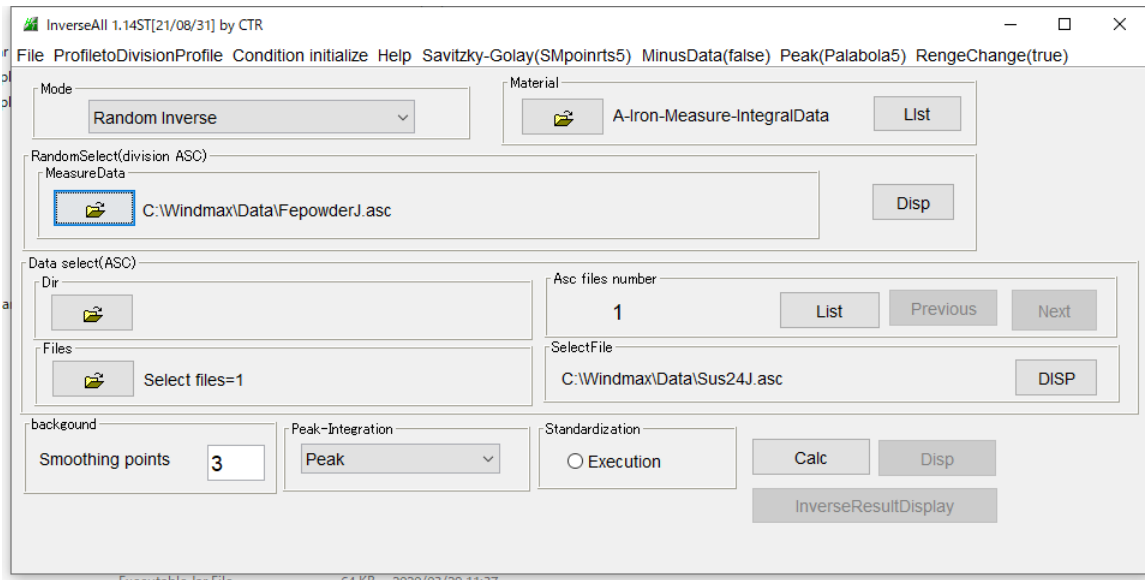
Ver1.11以降は修正されています。

本説明に使用しているソフトウェアを含む全てのCTRパッケージソフトウェアを一定期間評価して頂く  
事が可能です。 `HelelTex` サイトからご請求下さい。

CTRフルパッケージソフトウェア、説明書、技術資料を提供致します。

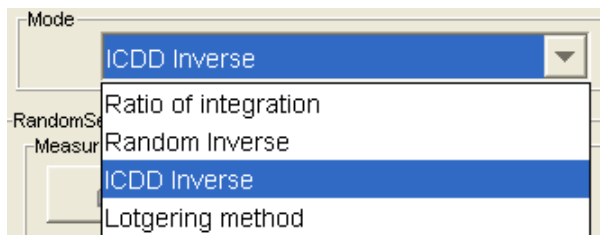
操作方法等、不明な点があれば、ご説明致します。

## 2. ソフトウェアの操作方法



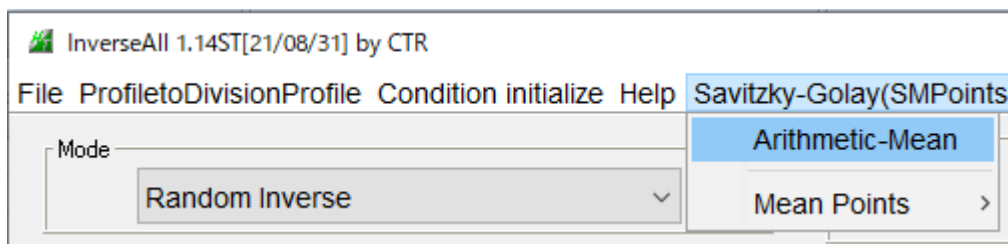
InverseResultDisplay の機能は、InverseResultDisplay 説明書を参照してください。

### 2. 1 解析方法の切り替え (Mode)

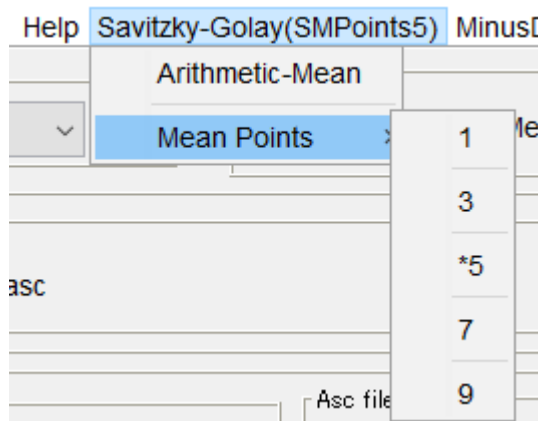


Retio of integration	解析方法 3
Random Inverse	解析方法 1
ICDD Inverse	解析方法 2
Lotgering method	解析方法 4

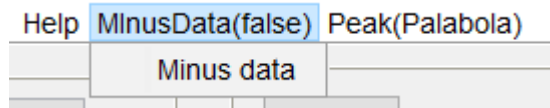
平滑化



Arithrmetic(単純移動平均) <-> Savitzky-Golay (重み関数平均)  
平均点数の変更



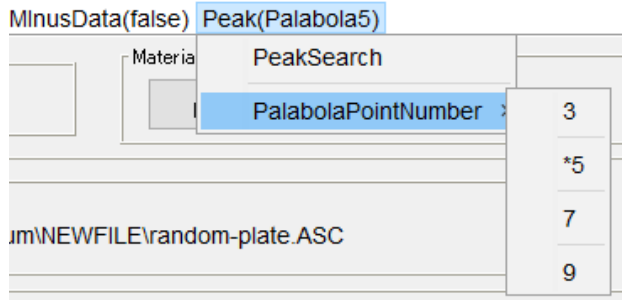
## マイナスデータの扱い



Minus(false)はマイナスデータは0とする。

Minus(true)はマイナスデータも加算する。

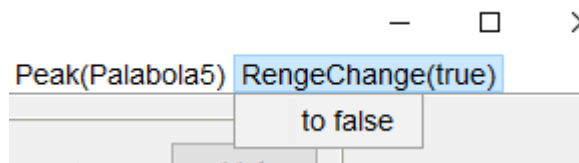
## 最大強度の求め方



Peak(Palabola)は最大値の近傍の放物線近似

Peak (Max) は、最大強度

## 計算範囲の変更



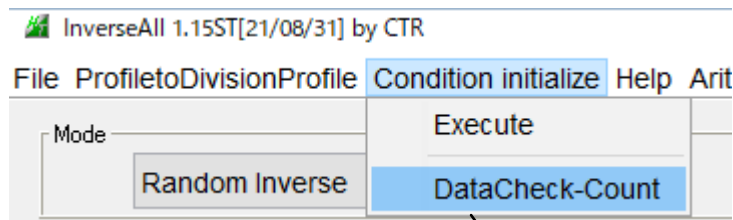
ProfiletoDivisionProfile 経由の場合、random と sample は同一範囲幅に切り出されているので RengeChange(false)で使う。

RINT など測定したデータを扱う場合、範囲幅が異なる場合 RengeChange(true)で使う。random と sample の共通領域の切り出しが行われます。

ただし、複数の sample の場合、すべての sample の測定領域は同一として計算が行われる。

random と sample を選択時、自動的に切り替えられる

## 逆極点計算比率の random と sample の強度の確認



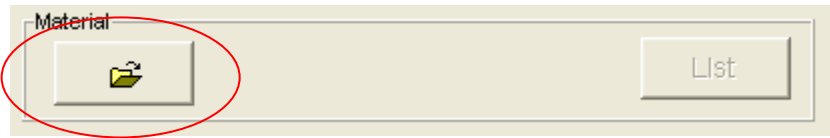
Randommode ArithmeticMean(SMpoints1) BGsmoints=0 Integration Minusdata-OFF

	[110]	[200]	[211]	[220]	[310]	[222]
RANDOM	98575.0	15937.0	30867.0	13109.0	20530.0	9336.0
SAMPLE	38563.0	96656.0	41066.0	5615.0	27227.0	9389.0
Sus24J	0.391	6.064	1.33	0.428	1.326	1.005

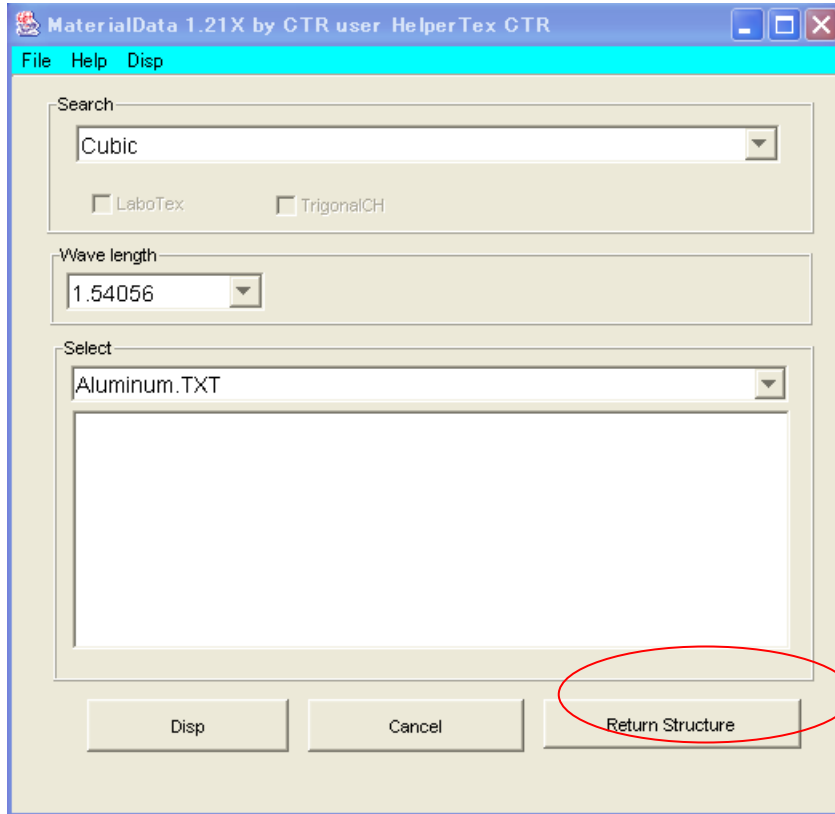
複数の sample に対しては、最初の sample のみ表示します。

## 2. 2 標準データの指定 (常に指定)

入力データの指数チェックにも使う。(入力データに指数が登録されていない場合、自動変更の機能に使われる。(MaterialDataソフトウェアが必要)



で物質指定

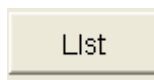


波長も選択してください。

物質選択と波長を指定し



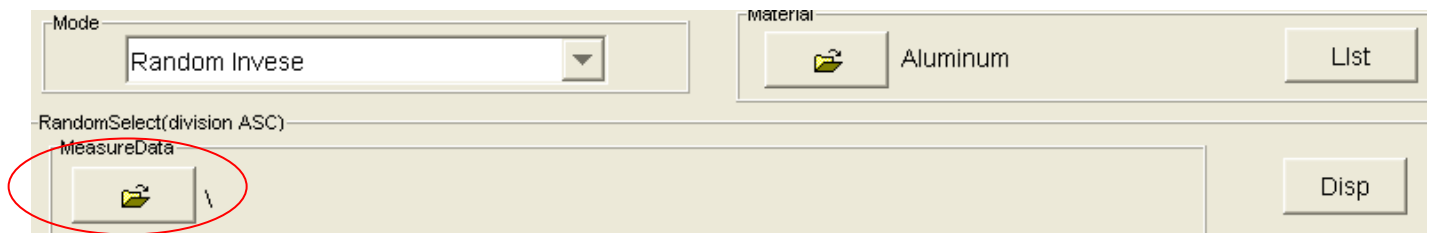
物質名が表示される。



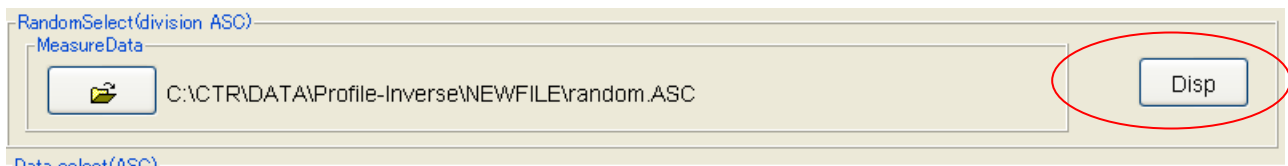
で登録データの確認が可能。

AluminumDISP  
 Cubic  
 4.05 (1.0)  
 4.05 (1.0)  
 4.05 (1.0)  
 90.0  
 90.0  
 90.0  
 1.54056  
 9  
 1 1 1 100.0 38.468  
 2 0 0 46.1 44.715  
 2 2 0 24.7 65.088  
 3 1 1 25.6 78.218  
 2 2 2 7.1 82.424  
 4 0 0 3.1 99.064  
 3 3 1 9.3 111.999  
 4 2 0 8.8 116.547  
 4 2 2 7.4 137.418

3. 無配向試料指定（本ソフトウェアではステレオ三角形表示は行わない）解析方法 1

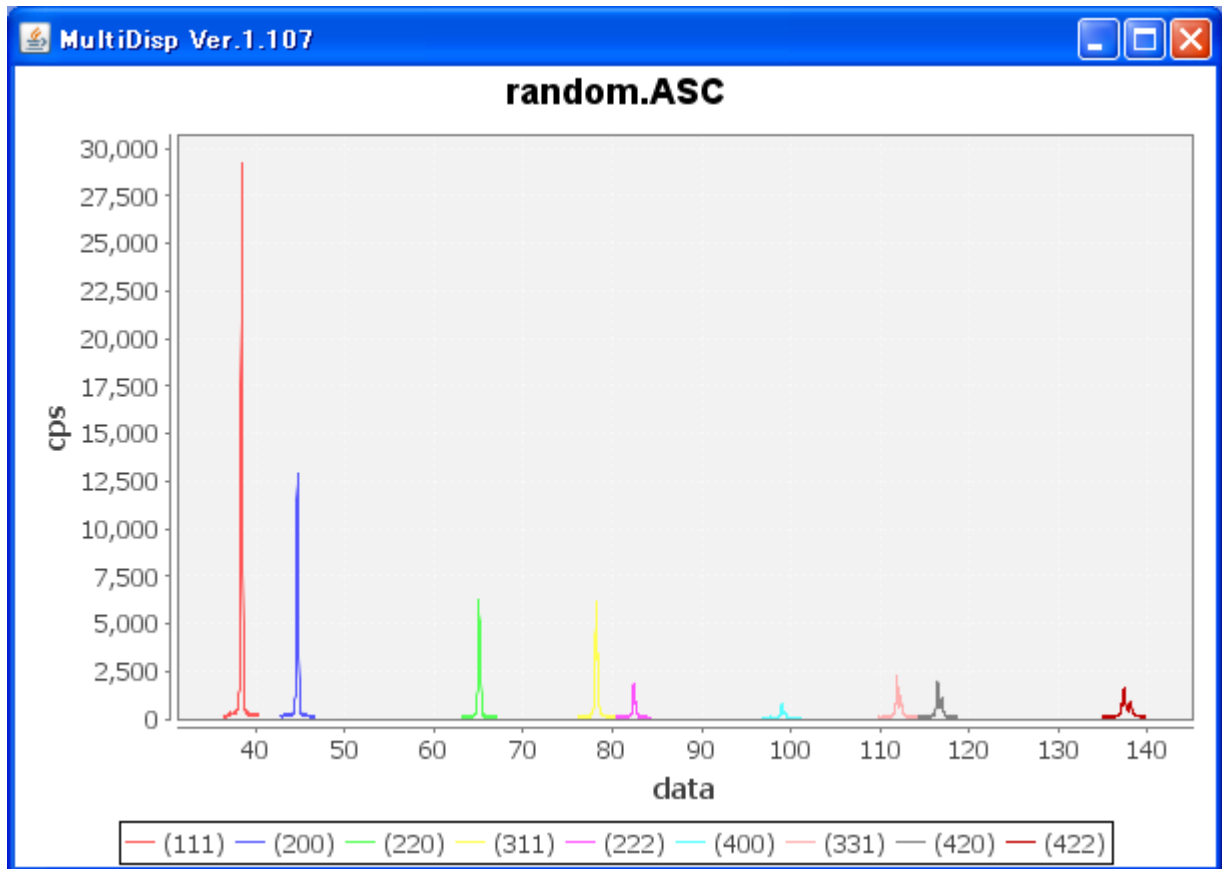


で r a n d o m 分 割 A S C フ ァ イ ル を 指 定



Disp でプロファイルの確認が出来ます。(MultiDisplayソフトウェアが必要)



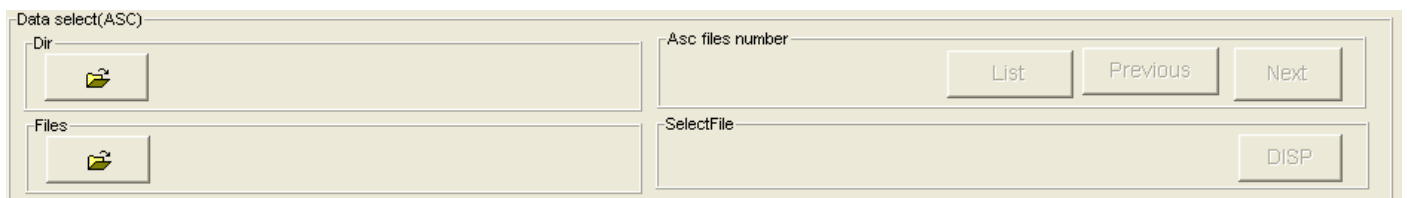


入力データに指数登録がなくても内部で自動的に登録します。(入力データファイルの変更はしない)  
 変更する場合、ProfiletoDivisionProfile ソフトウェアを使う。

Random データは、指数が必ず付加されていなければなりません。  
 被検データは指数付けされていなくても、計算出来ます。

#### 4. 無配向試料指定なし、解析方法 2、解析方法 3 では無配向試料指定の必要なし。

入力データの指定



はディレクトリ一括指定 (指定されたディレクトリの ASC ファイル全てに適用)



は複数の ASC ファイルを指定する。

10 つの ASC ファイルを指定すると、

Data select(ASC)

Dir

Asc files number **10**

Files  Select files=10

SelectFile C:\CTR\DATA\Profile-Inverse\NEWFILE\random.ASC

List

で選択されているすべてのファイルの l i s t を表示

C:\CTR\DATA\Profile-Inverse\NEWFILE\random.ASC  
 C:\CTR\DATA\Profile-Inverse\NEWFILE\sample1.ASC  
 C:\CTR\DATA\Profile-Inverse\NEWFILE\sample2.ASC  
 C:\CTR\DATA\Profile-Inverse\NEWFILE\sample3.ASC  
 C:\CTR\DATA\Profile-Inverse\NEWFILE\sample4.ASC  
 C:\CTR\DATA\Profile-Inverse\NEWFILE\sample5.ASC  
 C:\CTR\DATA\Profile-Inverse\NEWFILE\sample6.ASC  
 C:\CTR\DATA\Profile-Inverse\NEWFILE\sample7.ASC  
 C:\CTR\DATA\Profile-Inverse\NEWFILE\sample8.ASC  
 C:\CTR\DATA\Profile-Inverse\NEWFILE\sample9.ASC

Asc files number **10**

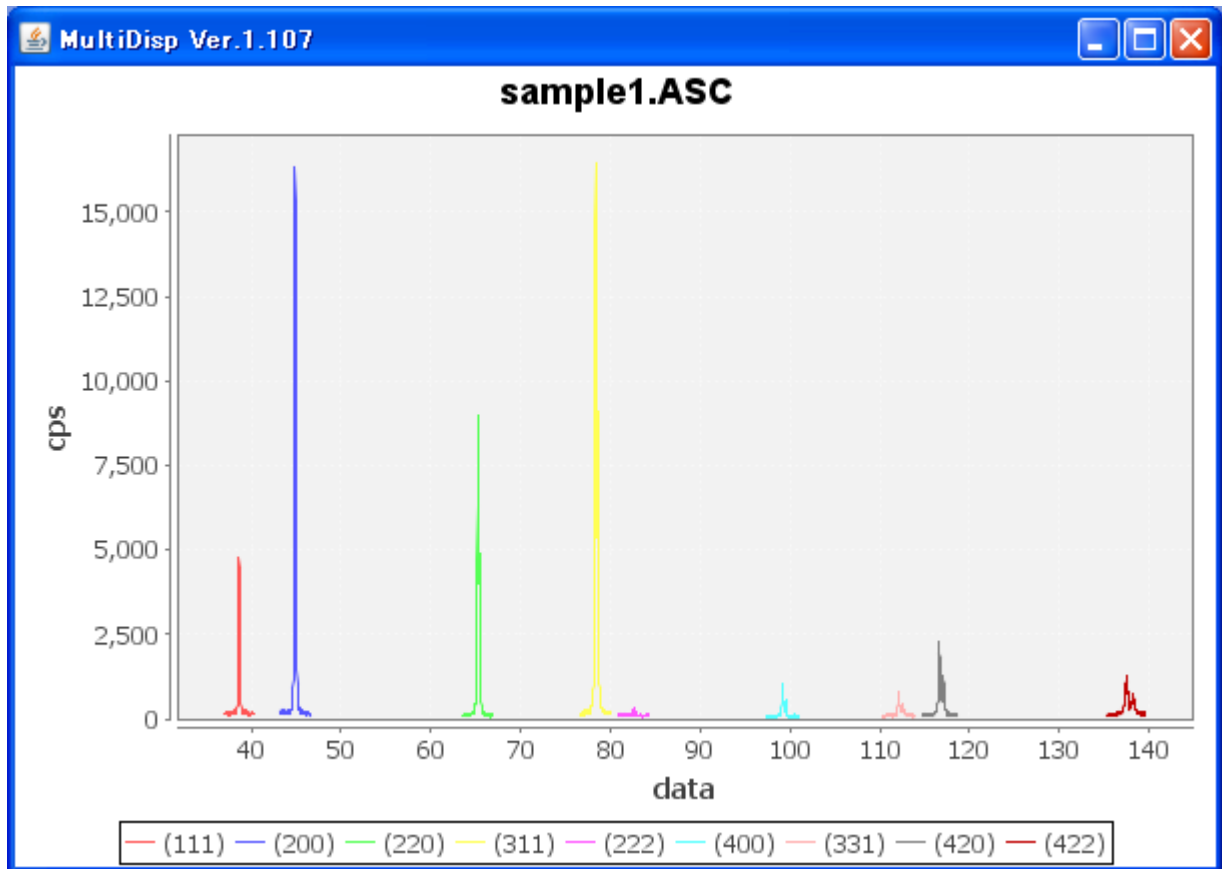
SelectFile C:\CTR\DATA\Profile-Inverse\NEWFILE\random.ASC

の は

表示データの変更

SelectFile C:\CTR\DATA\Profile-Inverse\NEWFILE\sample1.ASC

で入力データの表示を行う。



background Smoothing points  Peak-Integration  Standardization  Execution

background Smoothing points

は積分強度算出時、バックグラウンド強度計算の左右強度の平均点数

で計算を行う。

計算は CPS 単位でステップは 0.02 に規格化される。(Ver1.15 以降は 0.02 以下では規格化されない) ステップが 0.02 以下で測定されている場合は、測定ステップで計算される

指定されたデータの Index と Material no Index に不一致がある場合計算されず エラーが表示される。

Standardization は、各データの sum を 100 に規格化を行って比率計算を行う

background Smoothing points  Peak-Integration  Standardization  Execution

Index of samplefile and icddfile doesn't correspond. !!

## 5. 計算結果

### Randommode Standardization BGsmoints=5 Integration

	[111]	[200]	[220]	[311]	[222]	[400]	[331]	[420]	[422]
random	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
sample1	0.182	1.419	1.569	2.884	0.015	1.687	0.404	1.354	0.944
sample2	0.171	0.706	2.45	3.45	0.071	0.378	0.216	0.823	1.389
sample3	0.0040	3.863	0.626	0.745	-0.0090	5.613	0.21	0.61	0.462
sample4	0.087	2.669	1.744	1.063	0.149	4.059	0.436	1.1	0.603
sample5	0.452	2.608	1.012	0.688	0.47	3.525	0.568	0.863	0.468
sample6	0.514	0.955	2.048	1.532	0.591	0.923	1.264	1.17	1.261
sample7	0.493	2.496	0.62	0.874	0.527	4.063	0.592	0.802	0.772
sample8	0.428	1.042	1.521	2.504	0.241	0.957	0.51	1.001	1.57
sample9	0.337	3.25	0.513	0.65	0.254	5.19	0.446	0.813	0.12

### Randommode Standardization BGsmoints=5 PEAK

	[111]	[200]	[220]	[311]	[222]	[400]	[331]	[420]	[422]
random	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
sample1	0.193	1.53	1.743	3.255	0.143	1.666	0.402	1.411	0.971
sample2	0.178	0.783	2.817	3.901	0.112	0.561	0.332	1.071	1.695
sample3	0.012	3.454	0.74	0.952	0.042	5.457	0.253	0.849	0.744
sample4	0.091	2.645	1.836	1.169	0.11	3.678	0.453	1.197	0.765
sample5	0.463	2.567	0.994	0.677	0.461	2.32	0.479	0.718	0.469
sample6	0.619	1.132	2.2	1.505	0.425	0.805	1.003	0.906	1.151
sample7	0.459	2.461	0.582	0.947	0.528	3.583	0.588	0.909	0.989
sample8	0.466	1.168	1.659	2.748	0.33	0.92	0.526	1.11	1.501
sample9	0.319	3.033	0.494	0.73	0.213	4.029	0.484	1.058	0.183

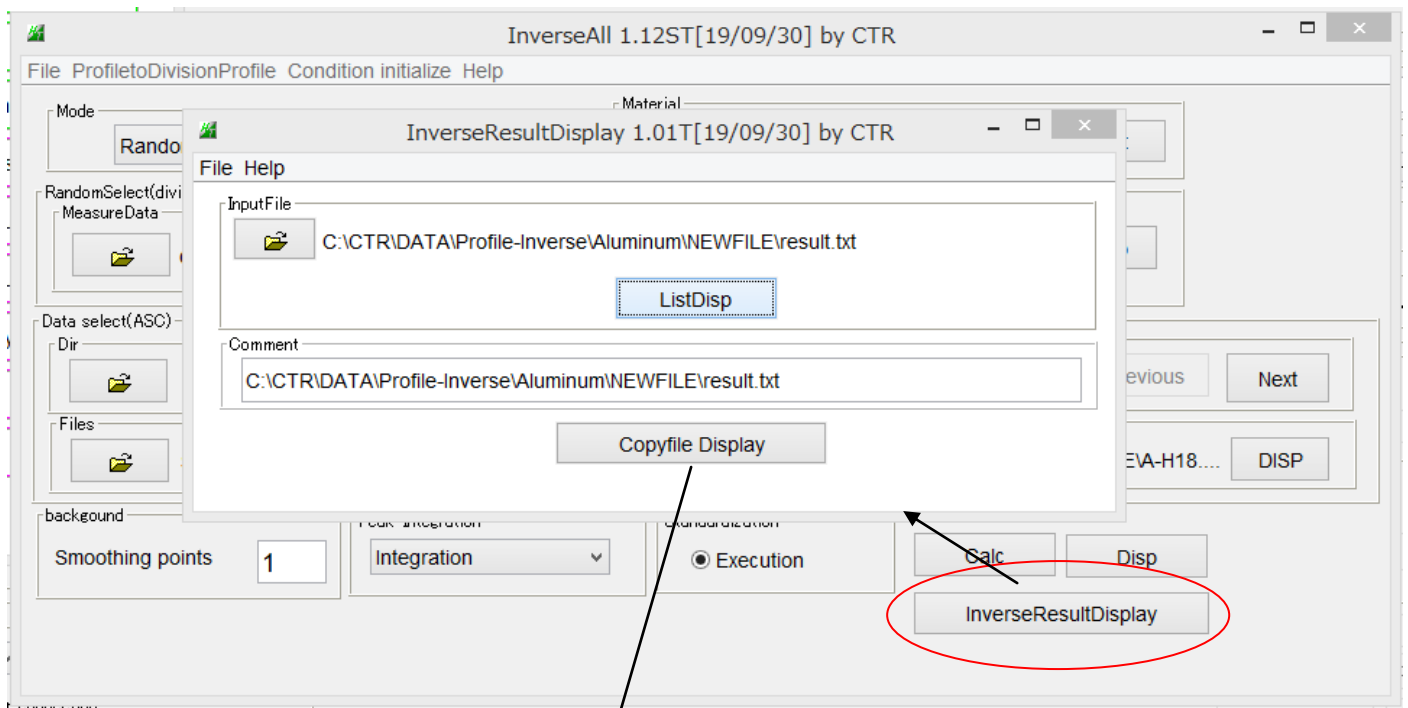
### Retiomode Standardization BGsmoints=5 PEAK

	[111]	[200]	[220]	[311]	[222]	[400]	[331]	[420]	[422]
random	46.777	20.573	9.962	9.767	2.89	1.163	3.497	2.993	2.373
sample1	9.049	31.481	17.373	31.801	0.415	1.938	1.409	4.223	2.306
sample2	8.34	16.11	28.065	38.106	0.324	0.653	1.164	3.208	4.025
sample3	0.58	71.071	7.376	9.305	0.121	6.348	0.885	2.543	1.766
sample4	4.283	54.418	18.291	11.419	0.318	4.279	1.587	3.585	1.816
sample5	21.691	52.812	9.903	6.615	1.334	2.699	1.678	2.15	1.114
sample6	28.958	23.291	21.924	14.701	1.229	0.937	3.51	2.713	2.733
sample7	21.477	50.636	5.799	9.259	1.527	4.169	2.057	2.722	2.349
sample8	21.827	24.035	16.536	26.842	0.956	1.07	1.84	3.325	3.565
sample9	14.93	62.4	4.925	7.139	0.616	4.688	1.694	3.168	0.435

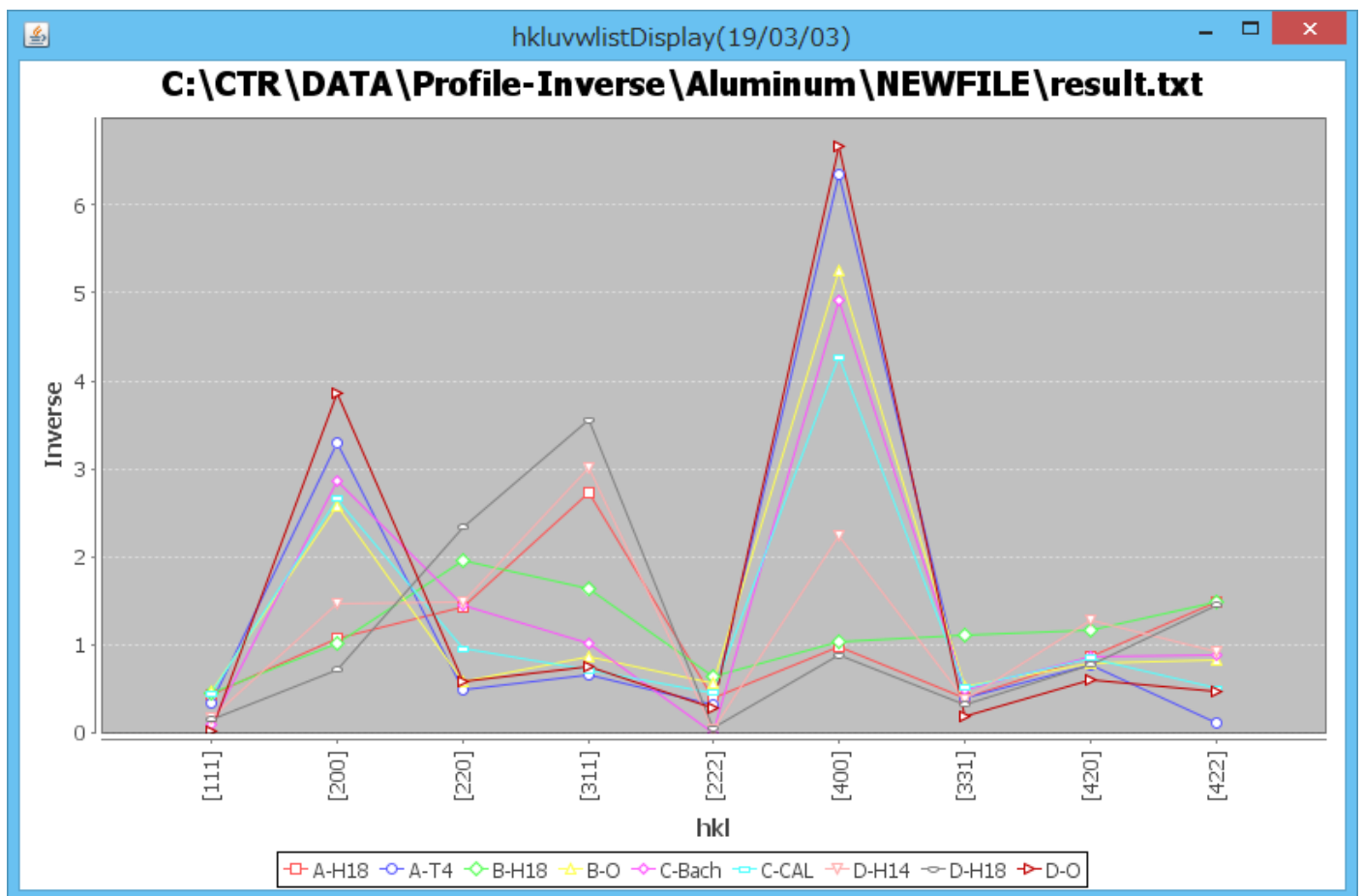
### ICDDmode Standardization BGsmoints=5 PEAK

	[111]	[200]	[220]	[311]	[222]	[400]	[331]	[420]	[422]
random	1.085	1.035	0.936	0.885	0.944	0.871	0.872	0.789	0.744
sample1	0.21	1.585	1.632	2.883	0.135	1.451	0.351	1.114	0.723
sample2	0.193	0.811	2.637	3.454	0.106	0.489	0.29	0.846	1.262
sample3	0.013	3.578	0.693	0.843	0.039	4.753	0.22	0.67	0.553
sample4	0.099	2.739	1.718	1.035	0.104	3.204	0.396	0.945	0.569
sample5	0.503	2.658	0.93	0.599	0.436	2.02	0.418	0.567	0.349
sample6	0.672	1.172	2.06	1.332	0.401	0.701	0.876	0.715	0.857
sample7	0.498	2.549	0.544	0.839	0.499	3.121	0.513	0.718	0.736
sample8	0.506	1.21	1.553	2.433	0.312	0.801	0.459	0.877	1.118
sample9	0.346	3.141	0.462	0.647	0.201	3.51	0.422	0.835	0.136

機能追加



h k l l i s t を表示します。



Hexagonal の場合方位[hkl]が面(hkl)に変わります。

計算結果は入力データと同じディレクトリにresult.txtとして作成されている。

Excelで読み込み

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1	Randommode Standardization BGsmoints=5 PEAK									
2		[111]	[200]	[220]	[311]	[222]	[400]	[331]	[420]	[422]
3	random	1	1	1	1	1	1	1	1	1
4	sample1	0.193	1.53	1.743	3.255	0.143	1.666	0.402	1.411	0.971
5	sample2	0.178	0.783	2.817	3.901	0.112	0.561	0.332	1.071	1.695
6	sample3	0.012	3.454	0.74	0.952	0.042	5.457	0.253	0.849	0.744
7	sample4	0.091	2.645	1.836	1.169	0.11	3.678	0.453	1.197	0.765
8	sample5	0.463	2.567	0.994	0.677	0.461	2.32	0.479	0.718	0.469
9	sample6	0.619	1.132	2.2	1.505	0.425	0.805	1.003	0.906	1.151
10	sample7	0.459	2.461	0.582	0.947	0.528	3.583	0.588	0.909	0.989
11	sample8	0.466	1.168	1.659	2.748	0.33	0.92	0.526	1.11	1.501
12	sample9	0.319	3.033	0.494	0.73	0.213	4.029	0.484	1.058	0.183
13										
14										

## 6. 逆極点図の表示

計算結果

TextDisplay 1.11S C:\CTR\DATA\Profile-Inverse\NEWFILE\result.txt

File Help

Randommode BGsmoints=3 Integration

	[111]	[200]	[220]	[311]	[222]	[400]	[331]	[420]
A-H18	0.575	1.409	1.914	3.413	0.375	1.42	0.584	1.136
A-T4	0.379	3.562	0.559	0.74	0.296	6.933	0.462	0.835
B-H18	0.293	0.654	1.268	1.065	0.345	0.538	0.693	0.748
B-O	0.474	2.519	0.571	0.87	0.577	5.098	0.495	0.782
C-Bach	0.161	4.836	2.509	1.737	0.151	8.229	0.861	1.438
C-CAL	0.851	5.058	1.84	1.38	0.839	8.156	1.036	1.541
D-H14	0.222	1.85	1.895	3.798	0.064	2.749	0.527	1.613
D-H18	0.21	0.907	3.033	4.515	0.062	0.995	0.42	0.96
D-O	0.046	8.341	1.278	1.656	0.204	14.521	0.475	1.289

Calc

Disp

Disp で InverseDisplay にデータがわたり

InverseDisplay 1.02YT[14/10/31] by CTR

File Help Inverse[hkl] Other

ODF

LaboTex  popLA  StdODF ND  TexTools  InverseAll

InverseTXTFile

C:\CTR\DATA\Profile-Inverse\NEWFILE\result.txt

Inverse

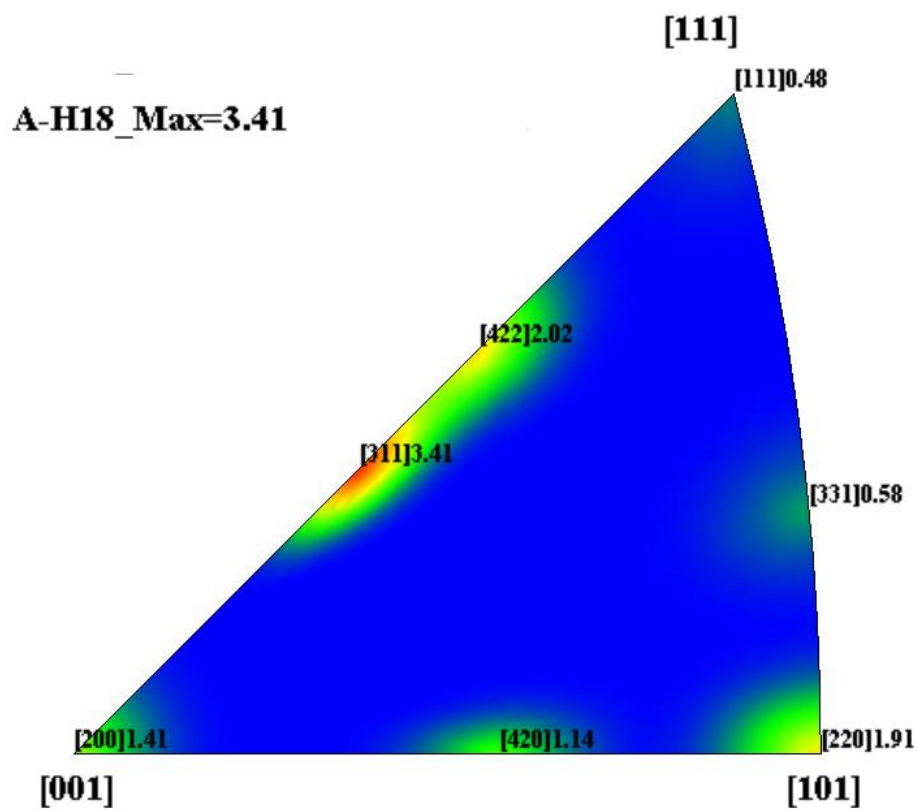
Max level 3.41  3D Max-value(Max 1.0)

WindowsWidth   Disp Intens. Random Level

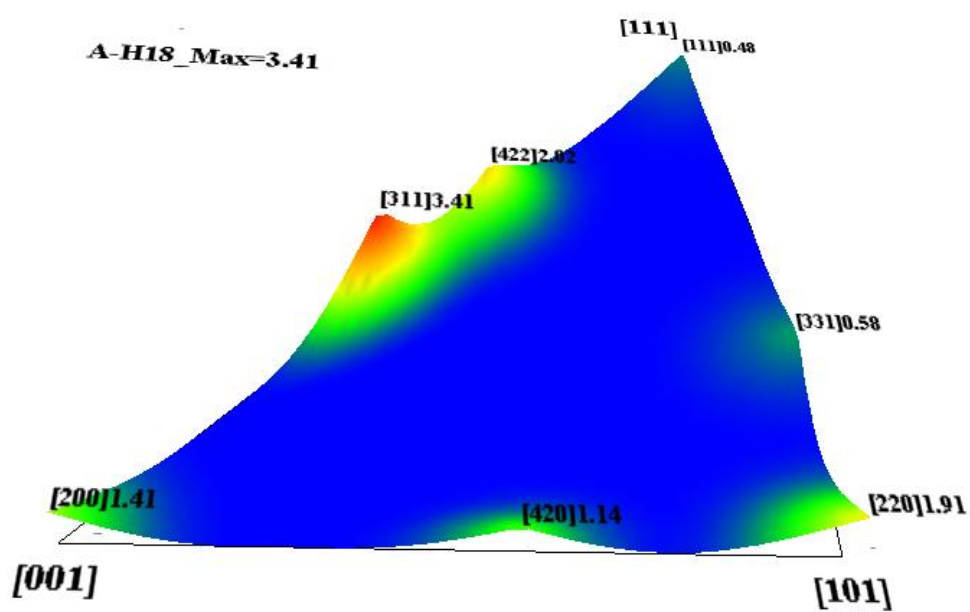
A-H18  
A-H18  
A-T4  
B-H18  
B-O  
C-Bach  
C-CAL  
D-H14  
D-H18

ファイル選択で表示が可能になります。

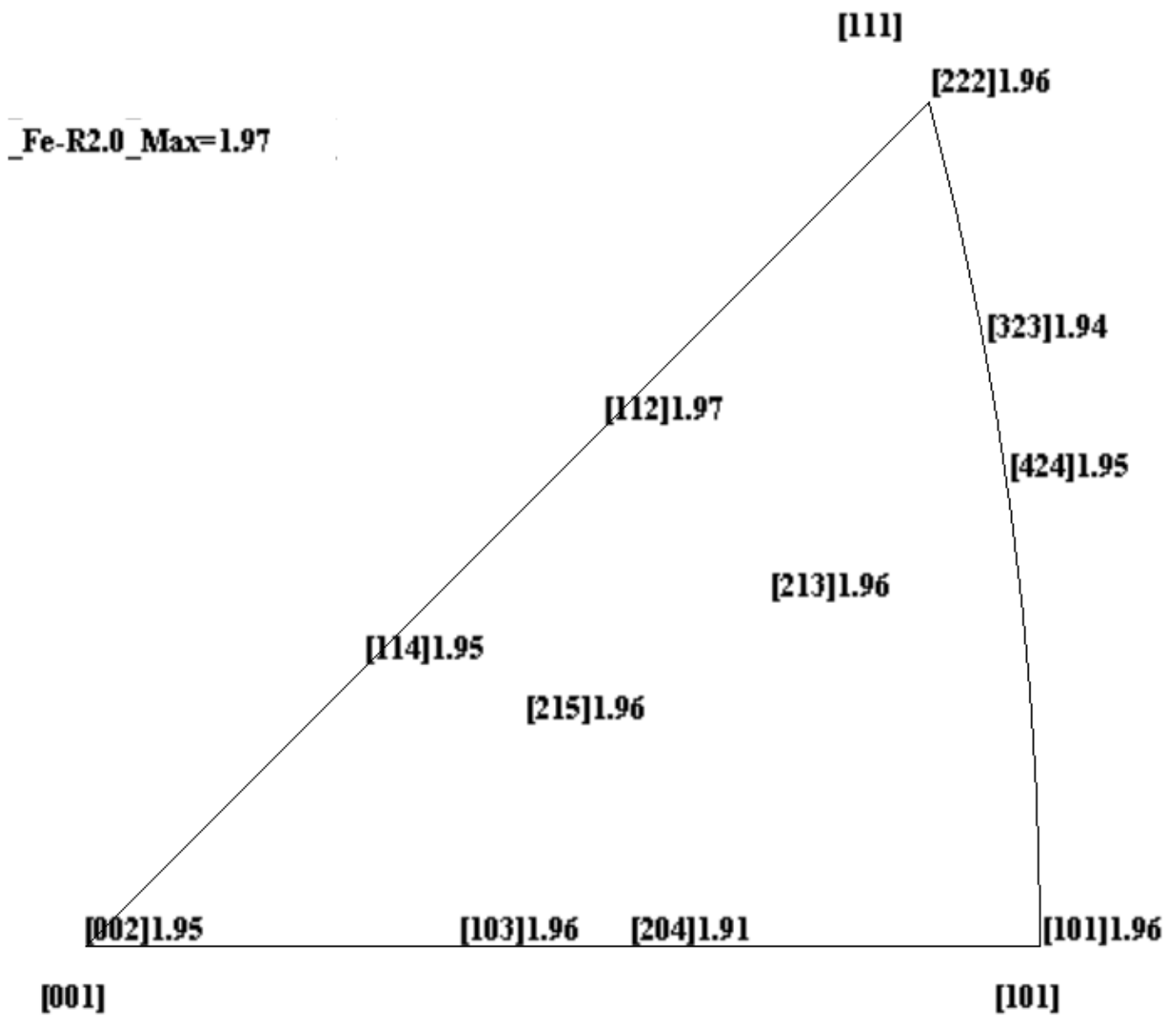
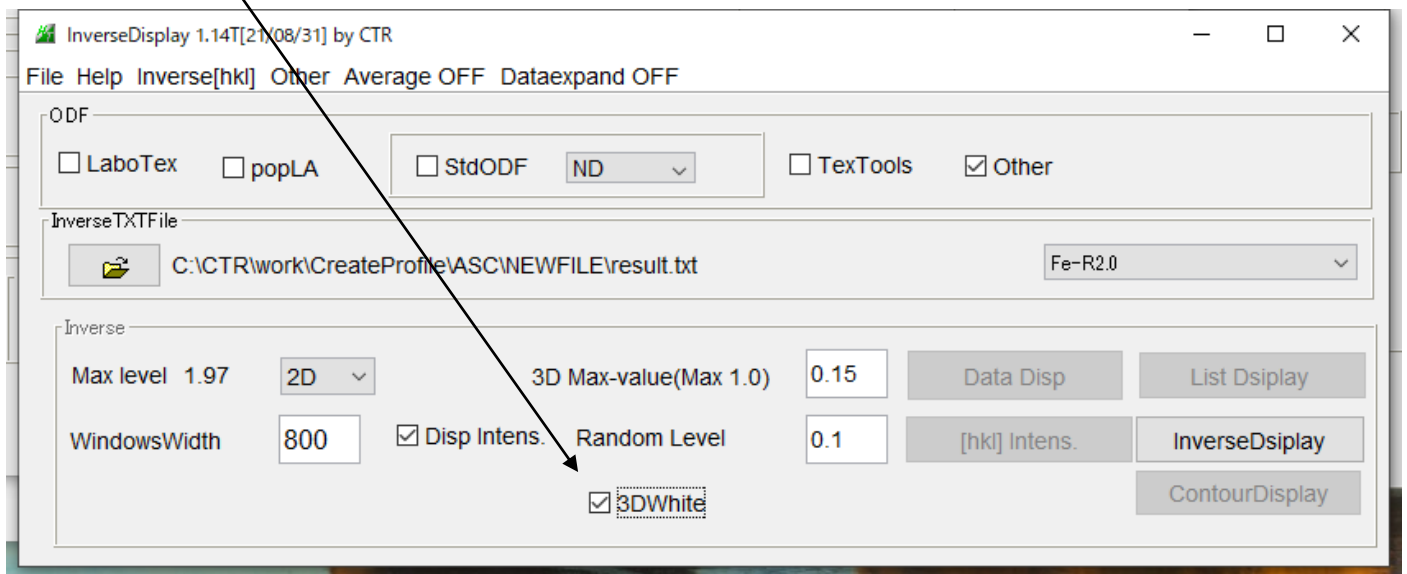
2D表示



3D表示



3D表示しない場合



数値のみの表示



## 7. Lotgering Method

1軸配向評価方法として使われている方法である。

C軸配向の場合

$$f = (p - p_0) / (1 - p_0)$$

$$p_0 = \sum I_0(001) / \sum I_0(hk1)$$

$$p = \sum I(001) / \sum I(hk1)$$

$p_0$ は無配向サンプルのX線回折強度 ( $I_0$ ) を用いる

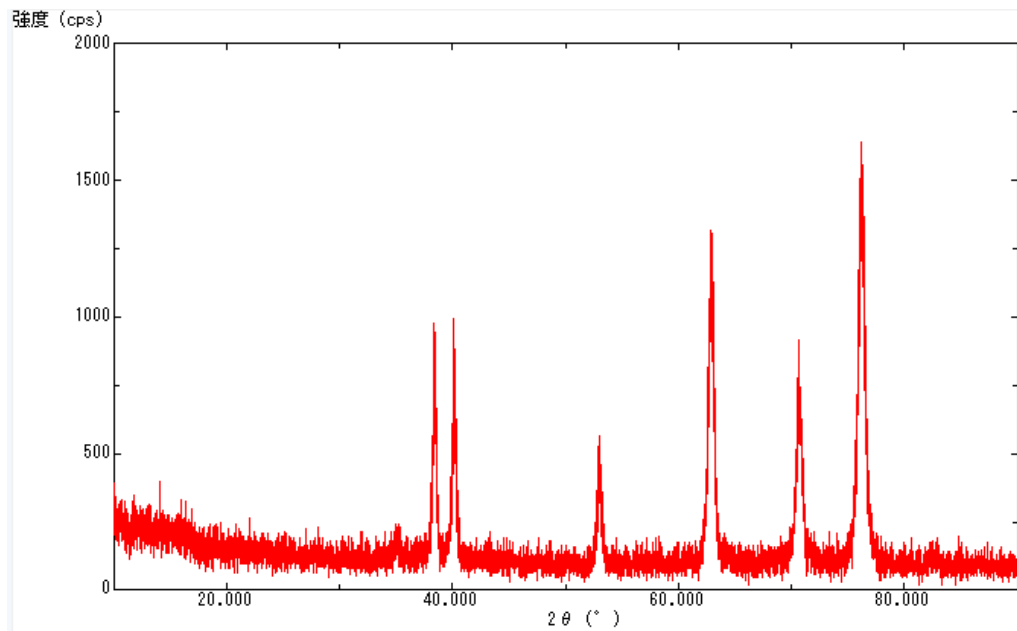
$p$ は配向サンプルのX線回折強度 ( $I$ ) を用いる

$f$ をロットゲーリングファクタと呼ばれている。

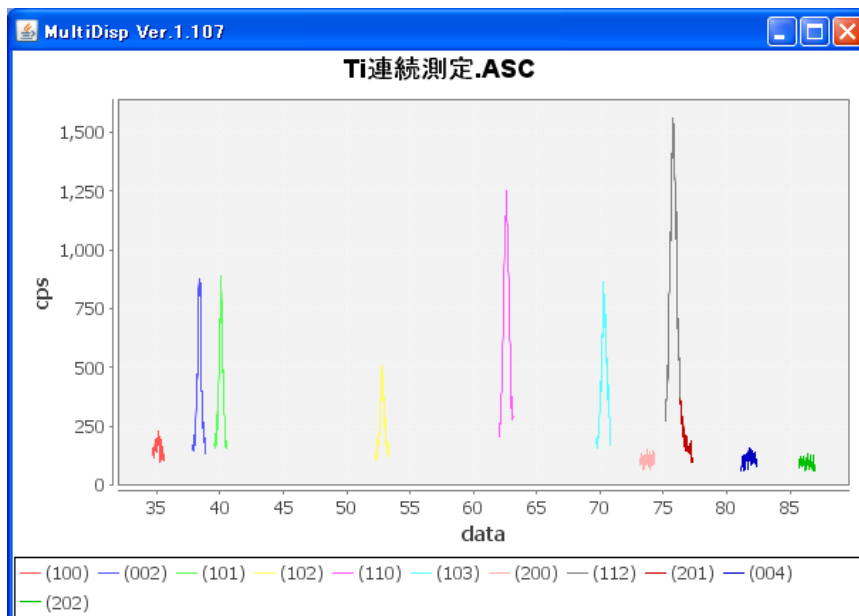
最大値は1.0であり、randomより弱いとマイナスの値になる。

試しに1軸配向ではないTi拍膜に応用してみます。

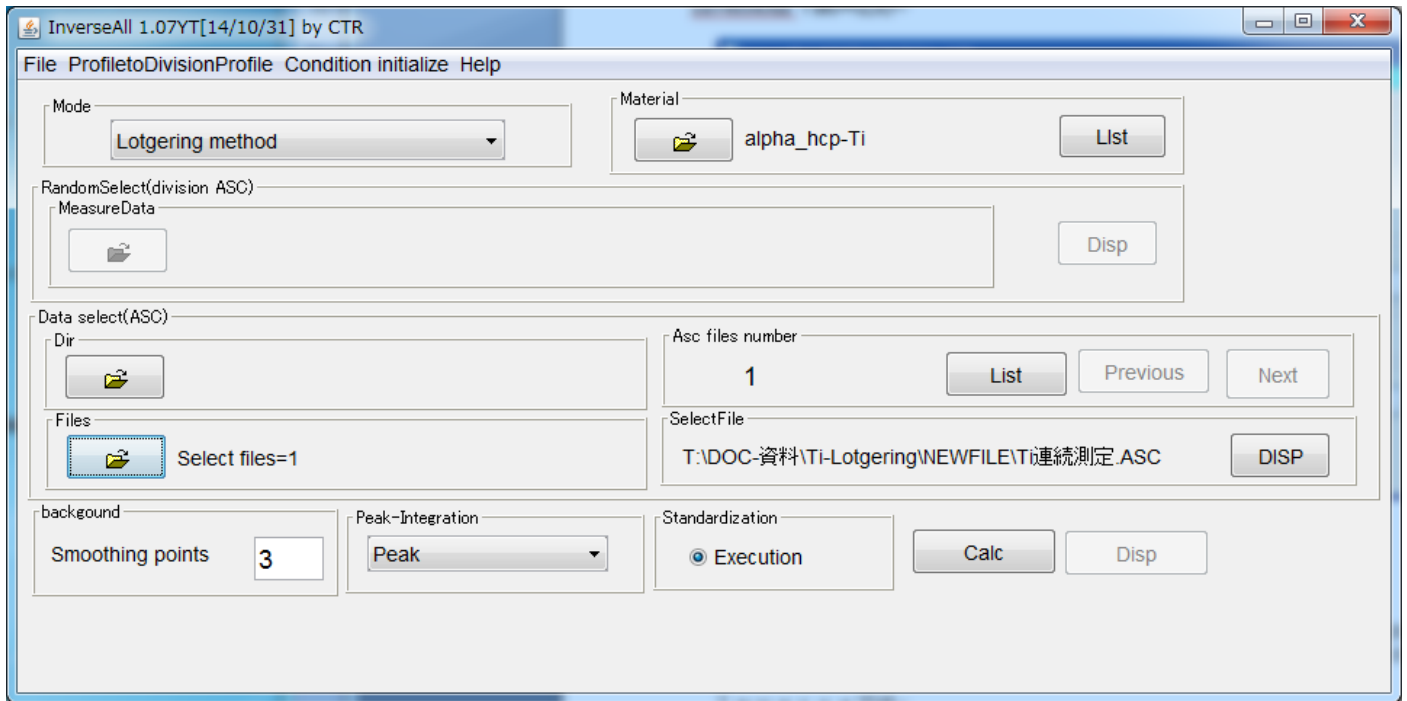
入力データ



ProfiletoDeivisionProfile ソフトウェアで分割



InverseAll で読み込む



Calcで

Lotgering method Standardization BGsmptoints=3 PEAK

	(100)	(002)	(101)	(102)	(110)	(103)	(200)	(112)	(201)
Ti連続測定	-0.1	0.027	-0.532	0.015	0.15	0.076	0.0020	0.195	-0.037

Inverseでは

ICDDmode Standardization BGsmptoints=3 PEAK

	(100)	(002)	(101)	(102)	(110)	(103)	(200)	(112)	(201)
Ti連続測定	0.173	1.284	0.326	1.281	3.08	2.104	1.081	3.699	0.176

逆極点でrandomレベル1.0より低いとロットゲーリングファクタはマイナスになります。

測定範囲がICDDより狭い場合 (Ver 1.10まで、1.11で修正)

例えば

A-Iron-Measure-IntegralDataDISP

Cubic

2.8664 (1.0)

2.8664 (1.0)

2.8664 (1.0)

90.0

90.0

90.0

0.7093

12

1	1	0	100.0	2.0269	20.155
2	0	0	17.53	1.4332	28.654
2	1	1	27.85	1.1702	35.284
2	2	0	7.8	1.0134	40.969
3	1	0	9.97	0.9064	46.066
2	2	2	9.39	0.8275	50.758
3	2	1	8.33	0.7661	55.154
4	1	1	3.62	0.6756	63.327
4	2	0	1.81	0.6409	67.19
3	3	2	1.57	0.6111	70.947
5	2	1	1.62	0.5233	85.325
4	4	2	0.78	0.4777	95.866

このデータに対し、測定データが、110→220の場合

C:\¥CTR¥work¥MYICDD のデータをcopyしファイル名を変更し作成してください。

以下は12本から6本に変更したデータを追加しました。

A-Iron-Measure6-IntegralDataDISP

Cubic

2.8664 (1.0)

2.8664 (1.0)

2.8664 (1.0)

90.0

90.0

90.0

0.7093

6

1	1	0	100.0	2.0269	20.155
2	0	0	17.53	1.4332	28.654
2	1	1	27.85	1.1702	35.284
2	2	0	7.8	1.0134	40.969
3	1	0	9.97	0.9064	46.066
2	2	2	9.39	0.8275	50.758

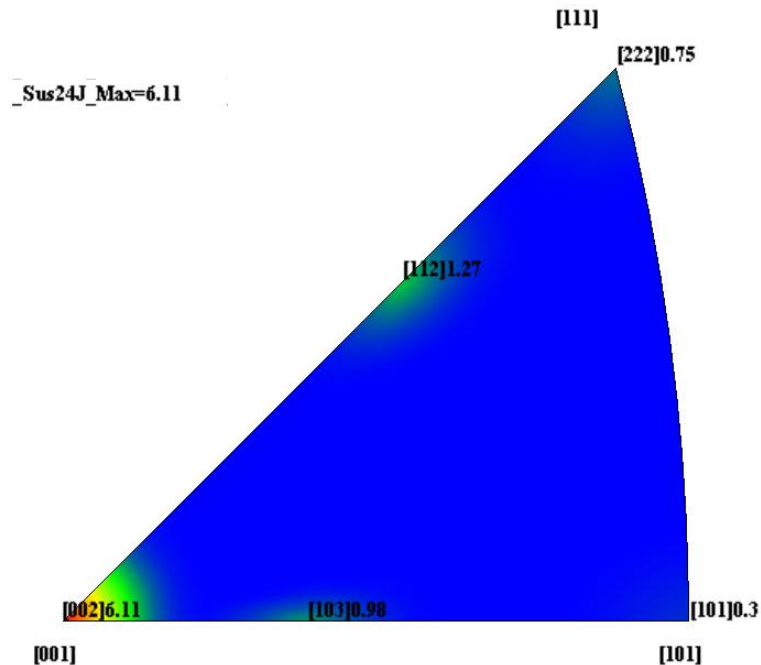
## 8. Peak&FWHM に関して

InverseDisplay で 3D 表示や等高線表示を行っているが、計算による方位分布の広がりには内部で FWHM=10deg として、各方位に対し Gauss 関数で広がりを近似していた。

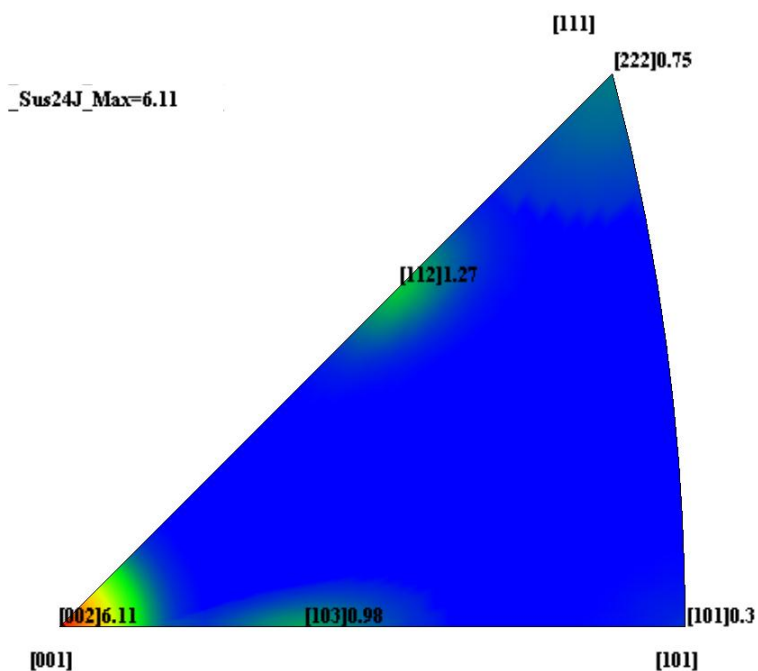
$\theta/\theta$  プロファイルから、最大強度 (Peak) と積分強度を計算しているが、Ver1.16 以降、Peak&FWHM モードを追加し InverseDisplay で固定していた FWHM を可変して表示できる様にした。表示できる InverseDisplay は Ver1.16 以降とします。

FWHM は、積分強度./最大強度\*2/3としています。

Peak



Peak & FWHM



Peak 処理では FWHM=10deg に固定を Peak&FWHM で計算すると、

Sus24J	8.49	11.159	11.984	16.029	21.544	20.287
--------	------	--------	--------	--------	--------	--------