

ODF解析結果の比較支援ソフト

InverseDisp2ソフトウェア

Version 2.05S

逆極点図を36分割し、数値化された逆極点図リストから分轄BOXに含まれる方位の加算を行い、平均化することで逆極点図の数値化を行ってみました。
得られる値は、結晶方位のVolumeFractionではありませんが、同一方位間の比較を行う事は可能と思われます。

2018年10月31日

HelperTex Office

概要

複数のODF解析結果を比較する場合、ODF解析結果の各方位の体積率が考えられるが、試料毎に方位にずれがある場合、単純比較できない。そこで複数のODF解析結果に対し機械的に比較を行うためのソフトウェアを作成した。

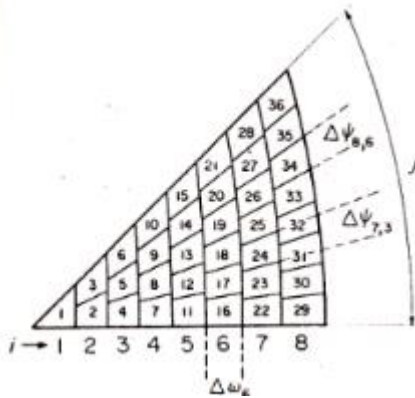
比較する対象は逆極点図、逆極点図を36分割し、そのBOX内の平均強度とした。

こうする事で、試料面の方向の成分を比較できます。

また、逆極点図をプロファイルとして扱い、プロファイル比較ソフトウェアで扱えるようにした。

36分割は、ベクトル法で分割している ω_i 、 ϕ_{ij} のpBoxを逆極点図に応用し、計算する。

長島先生の「ベクトル法による集合組織の3次元解析」のベクトル法の球面三角形36分轄と同じであるが、逆極点図比較に用いる。



| ω_i | i | j | ϕ_{ij} | | | | | | | | | | |
|------------|---|---|-------------|--------------------|---------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--|
| | | | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | | |
| 0 | 0 | 0 | | | | | | | | | | | |
| 6.9266 | 1 | 0 | 45 | } $\Delta\omega_1$ | | | | | | | | | |
| 12.0551 | 2 | 0 | 26.3186 | | 45 | } $\Delta\omega_2$ | | | | | | | |
| 17.1708 | 3 | 0 | 17.9551 | 33.2204 | 45 | | } $\Delta\omega_3$ | | | | | | |
| 22.3770 | 4 | 0 | 13.3561 | 25.6215 | 36.1923 | 45 | | } $\Delta\omega_4$ | | | | | |
| 27.7252 | 5 | 0 | 10.4606 | 20.4414 | 29.5995 | 37.7830 | 45 | | } $\Delta\omega_5$ | | | | |
| 33.2550 | 6 | 0 | 8.4740 | 16.7295 | 24.5888 | 31.9398 | 38.7389 | 45 | | } $\Delta\omega_6$ | | | |
| 39.0021 | 7 | 0 | 7.0316 | 13.9649 | 20.7140 | 27.2154 | 33.4323 | 39.3551 | 45 | | } $\Delta\omega_7$ | | |
| 45 | 8 | 0 | 5.9440 | 11.8472 | 17.6725 | 23.3907 | 28.9827 | 34.4415 | 39.7734 | 45 | | } $\Delta\omega_8$ | |

上記球面三角形の直交座標系36分轄角度

逆極点図の36分轄BOX

逆極点図の回転方向は ϕ_{ij} 、煽り方向角度は、 ω_i と ϕ_{ij} から計算する。

ω_i をWulffネット上の大円とTD軸の交わる角度として、逆極点図の ω_s と ω_e を計算
 ω_s 、 ω_e 、 ϕ_s 、 ϕ_e をBOXの頂点とすると

| | ω_s | ω_e | ϕ_s | ϕ_e |
|----|------------|------------|----------|----------|
| 1 | 0.0 | 9.51 | 0.0 | 45.0 |
| 2 | 6.93 | 13.27 | 0.0 | 26.32 |
| 3 | 7.67 | 16.2 | 26.32 | 45.0 |
| 4 | 12.06 | 17.9 | 0.0 | 17.96 |
| 5 | 12.6 | 19.87 | 17.96 | 33.22 |
| 6 | 14.09 | 22.61 | 33.22 | 45.0 |
| 7 | 17.17 | 22.87 | 0.0 | 13.36 |
| 8 | 17.57 | 24.26 | 13.36 | 25.62 |
| 9 | 18.71 | 26.35 | 25.62 | 36.19 |
| 10 | 20.45 | 28.92 | 36.19 | 45.0 |
| 11 | 22.38 | 28.08 | 0.0 | 10.46 |
| 12 | 22.68 | 29.09 | 10.46 | 20.44 |
| 13 | 23.55 | 30.69 | 20.44 | 29.6 |
| 14 | 24.94 | 32.76 | 29.6 | 37.78 |
| 15 | 26.75 | 35.2 | 37.78 | 45.0 |
| 16 | 27.73 | 33.26 | 0.0 | 8.47 |
| 17 | 27.95 | 34.02 | 8.47 | 16.73 |
| 18 | 28.63 | 35.25 | 16.73 | 24.59 |
| 19 | 29.73 | 36.9 | 24.59 | 31.94 |
| 20 | 31.22 | 38.91 | 31.94 | 38.74 |
| 21 | 33.05 | 41.25 | 38.74 | 45.0 |
| 22 | 33.0 | 39.2 | 0.0 | 7.03 |
| 23 | 33.18 | 39.79 | 7.03 | 13.96 |
| 24 | 33.71 | 40.75 | 13.96 | 20.71 |
| 25 | 34.58 | 42.08 | 20.71 | 27.22 |
| 26 | 35.78 | 43.74 | 27.22 | 33.43 |
| 27 | 37.3 | 45.73 | 33.43 | 39.36 |
| 28 | 39.12 | 48.02 | 39.36 | 45.0 |
| 29 | 39.0 | 45.15 | 0.0 | 5.94 |
| 30 | 39.14 | 45.62 | 5.94 | 11.85 |
| 31 | 39.57 | 46.38 | 11.85 | 17.67 |
| 32 | 40.27 | 47.45 | 17.67 | 23.39 |
| 33 | 41.25 | 48.82 | 23.39 | 28.98 |
| 34 | 42.51 | 50.49 | 28.98 | 34.44 |
| 35 | 44.05 | 52.45 | 34.44 | 39.77 |
| 36 | 45.88 | 54.74 | 39.77 | 45.0 |

以下に各BOXの代表的な方位を計算してみます。

逆極点方位をL a b o T e xで計算を行い、

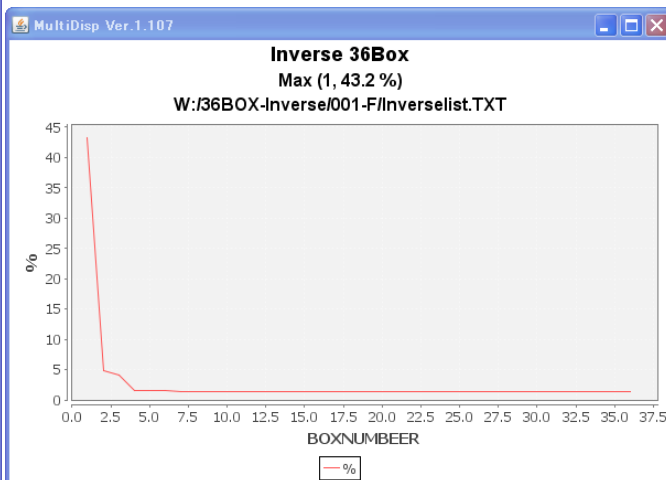
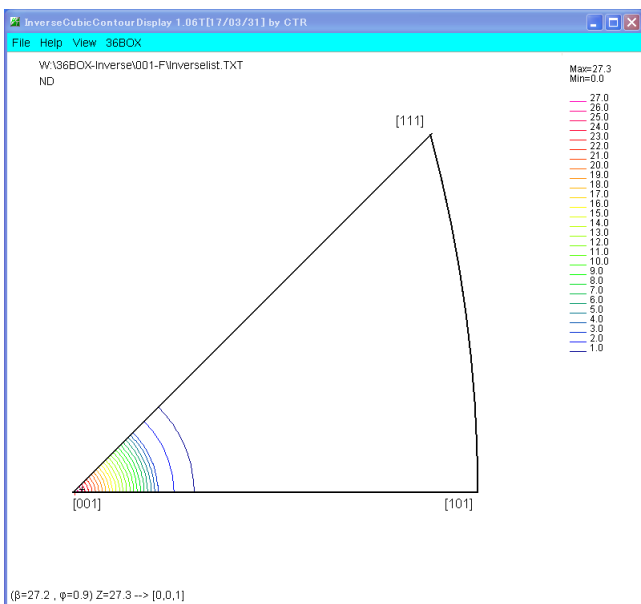
GPInverseDisplayで逆極点図をInverselist.txtに変換し

InverserCubicContourDisplayで逆極点図を表示、方位計算を行い

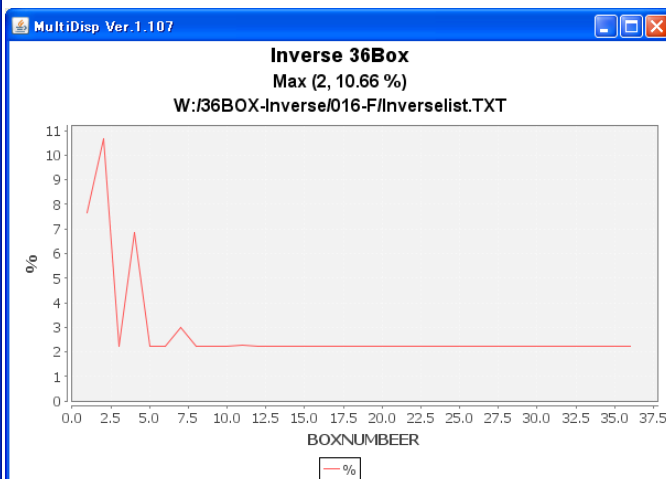
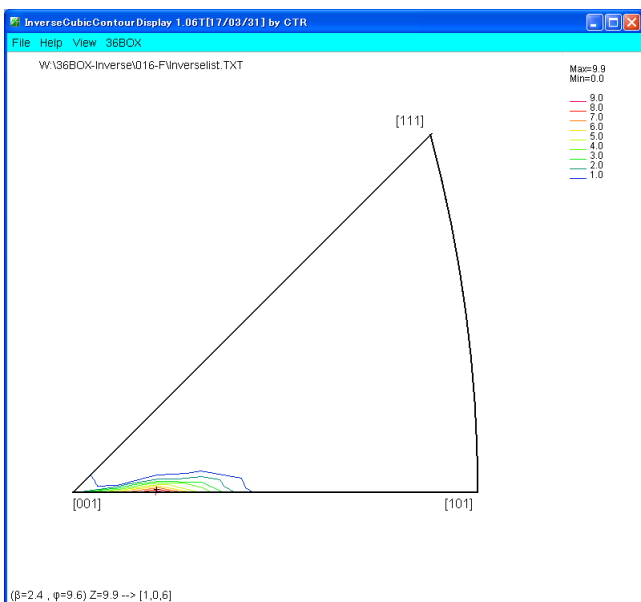
36BOX化によるBOXを決定する。

方位毎に逆極点図の最大密度とBOX%が異なって計算されています。

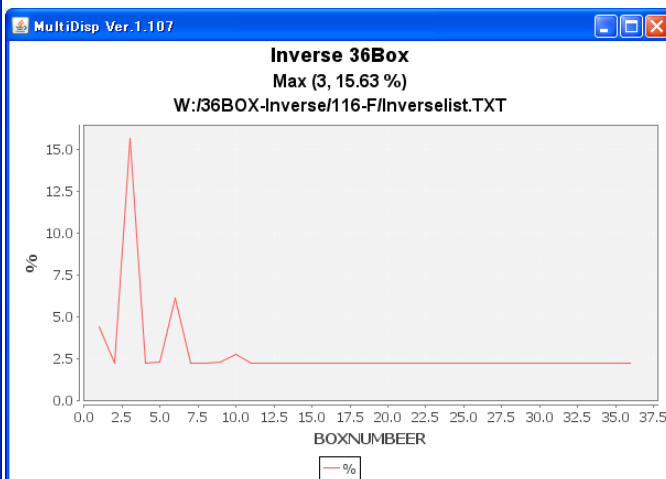
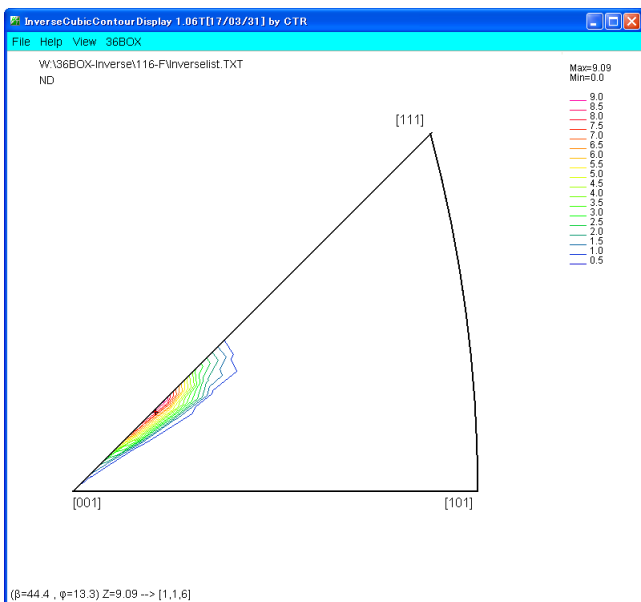
BOX1 ($\beta=35.6$, $\varphi=0.9$) $Z=27.3 \rightarrow [0,0,1]$



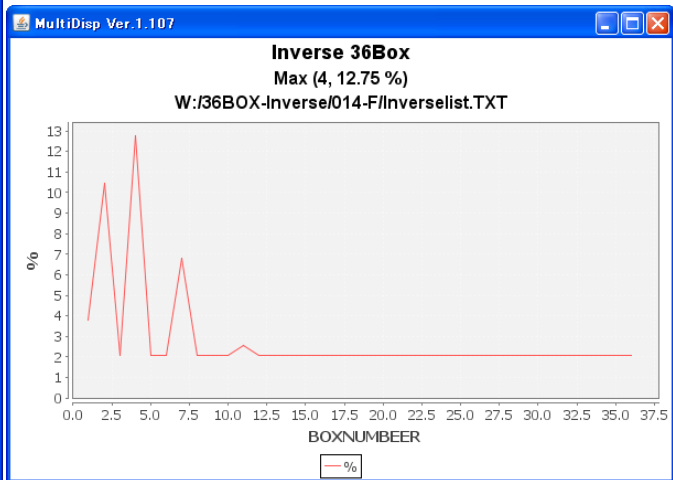
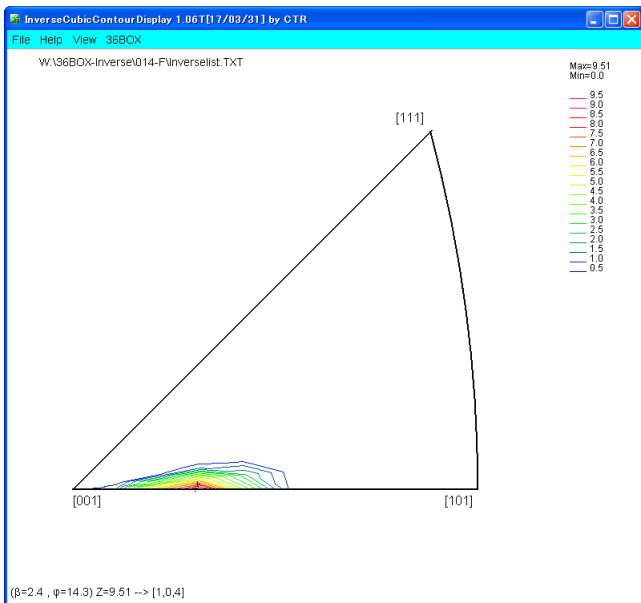
BOX2 ($\beta=2.4$, $\varphi=9.6$) $Z=9.9 \rightarrow [1,0,6]$



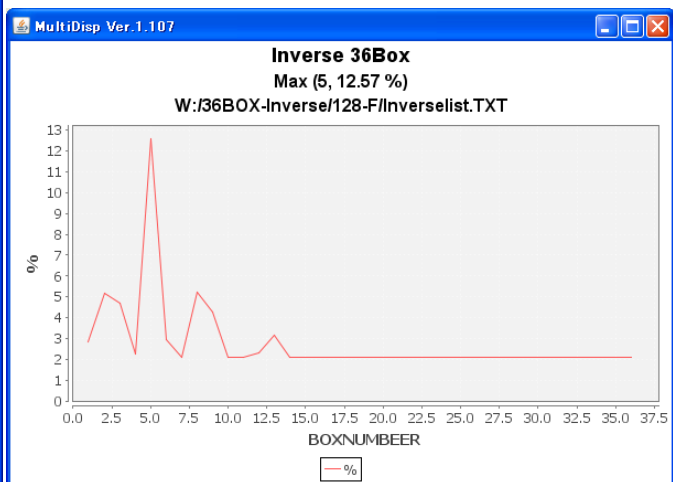
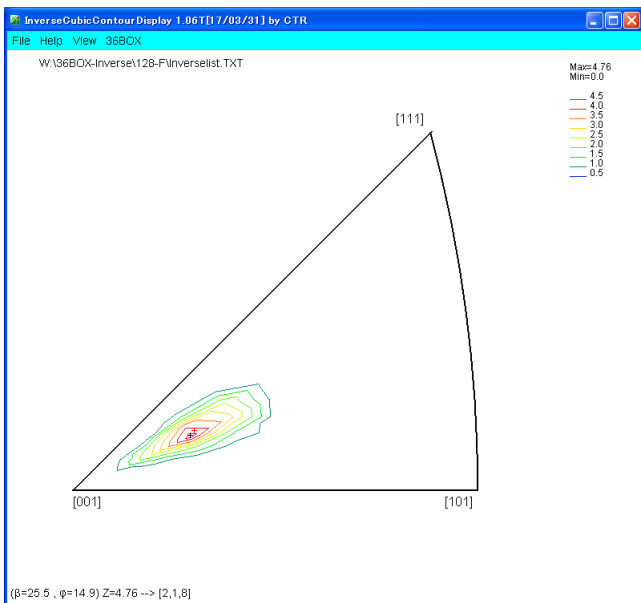
BOX3 ($\beta=44.4$, $\varphi=13.3$) $Z=9.09 \rightarrow [1,1,6]$



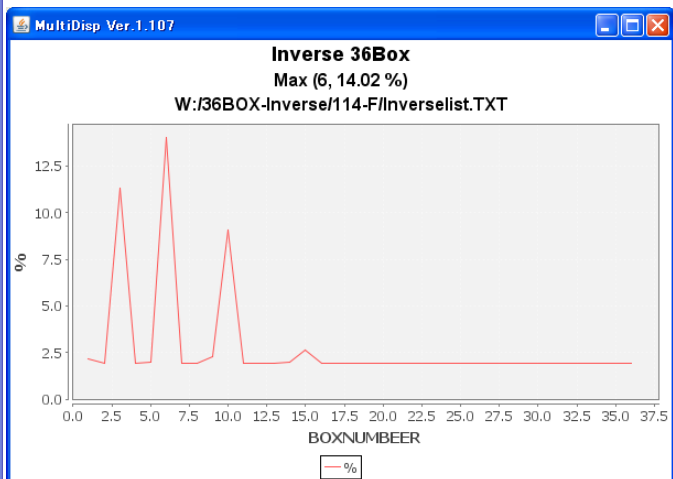
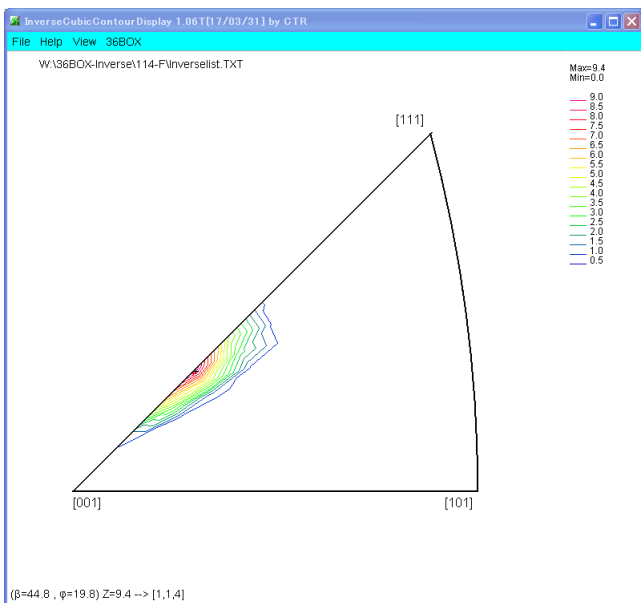
BOX4 ($\beta=1.7$, $\varphi=14.1$) $Z=9.51 \rightarrow [1,0,4]$



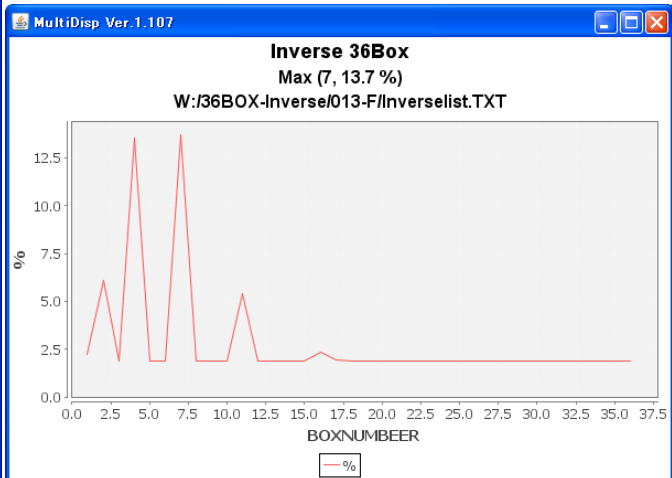
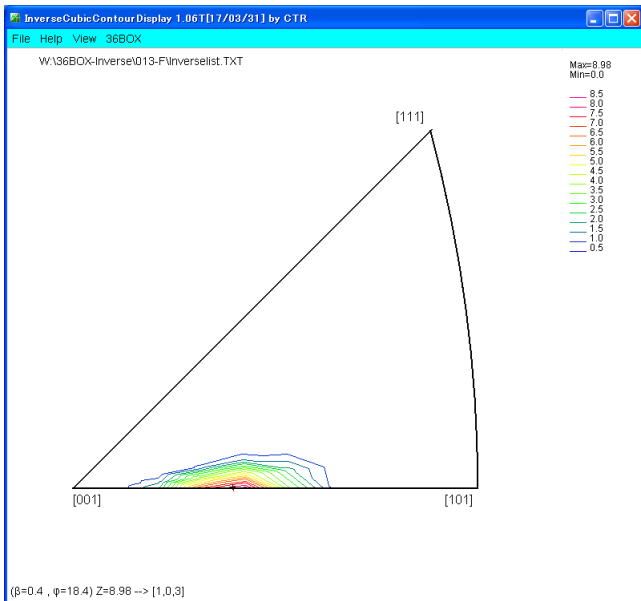
BOX5 ($\beta=25.5$, $\varphi=14.9$) $Z=4.76 \rightarrow [2,1,8]$



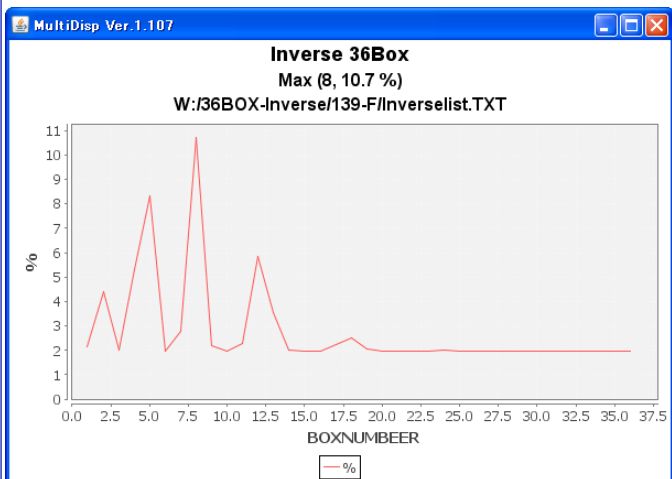
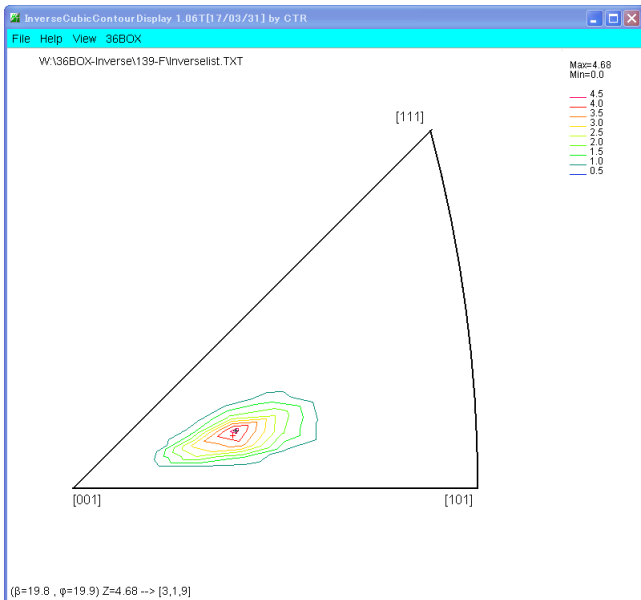
BOX6 ($\beta=44.8$, $\varphi=19.8$) $Z=9.4 \rightarrow [1,1,4]$



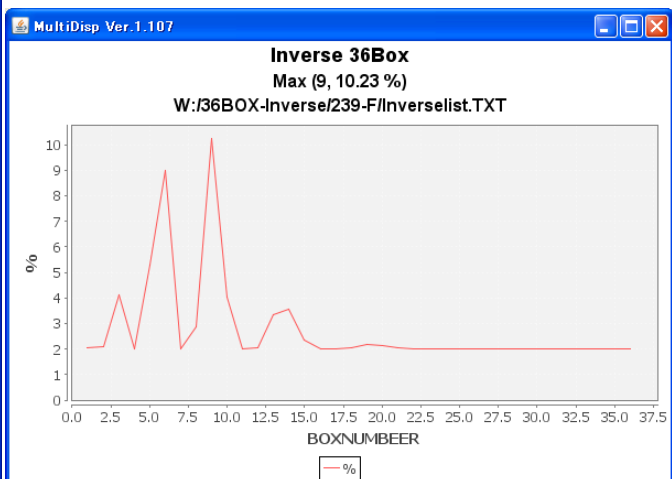
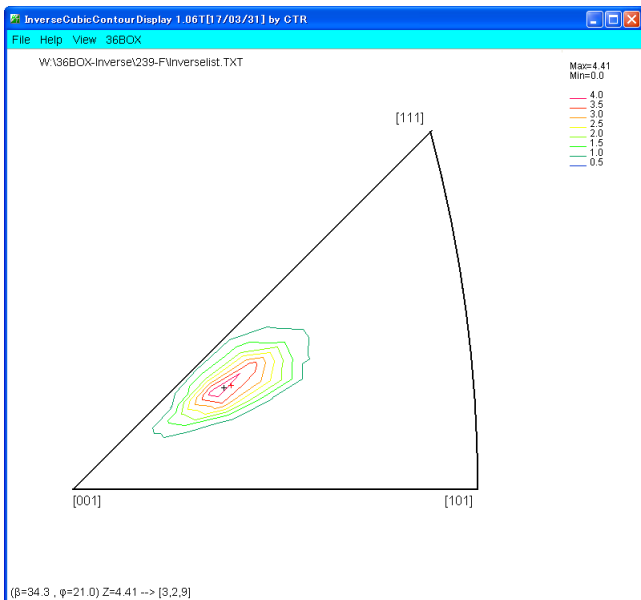
BOX7 ($\beta=0.4$, $\varphi=18.4$) $Z=8.98 \rightarrow [1,0,3]$



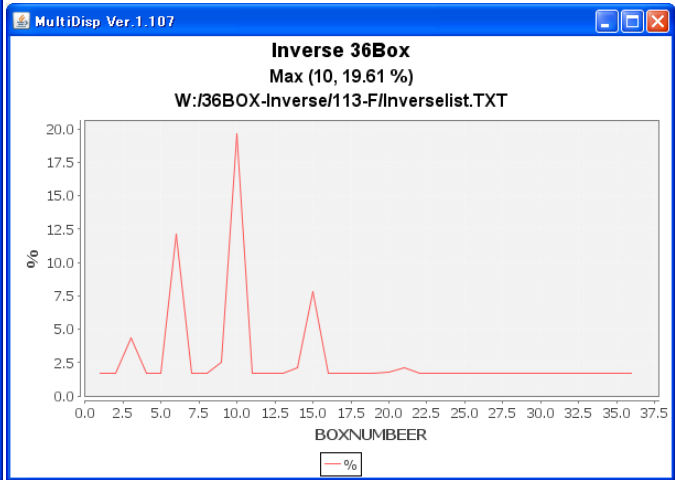
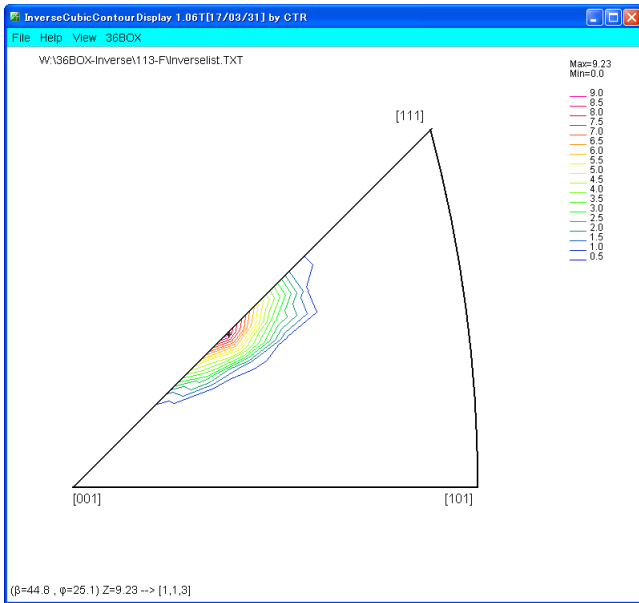
BOX8 ($\beta=19.3$, $\varphi=19.9$) $Z=4.68 \rightarrow [3,1,9]$



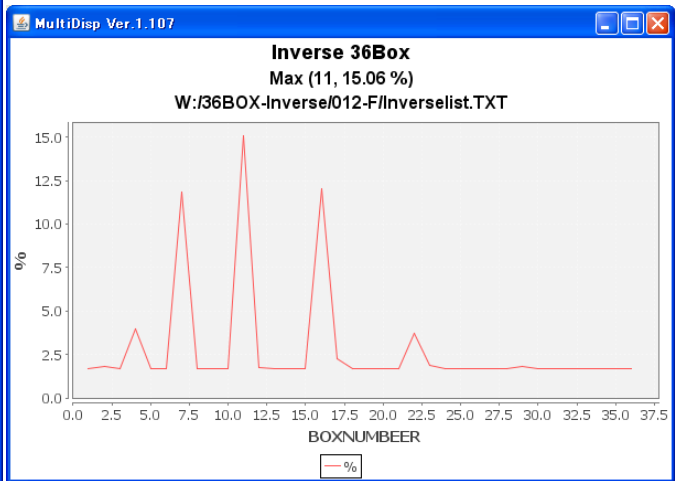
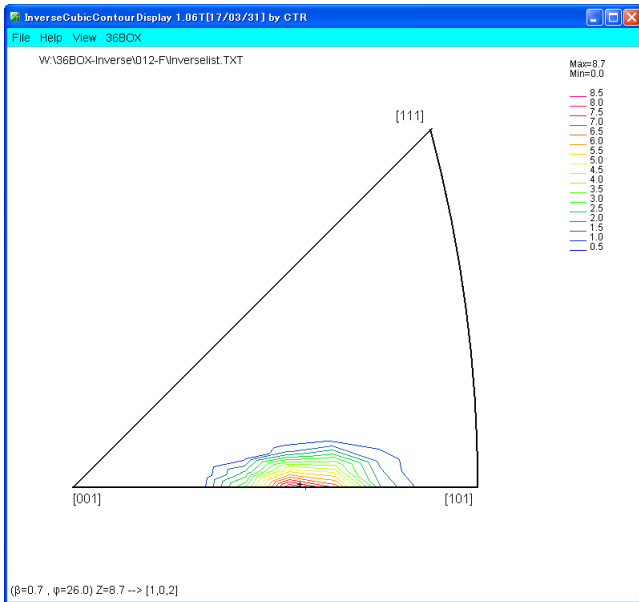
BOX9 ($\beta=34.3$, $\varphi=21.0$) $Z=4.41 \rightarrow [3,2,9]$



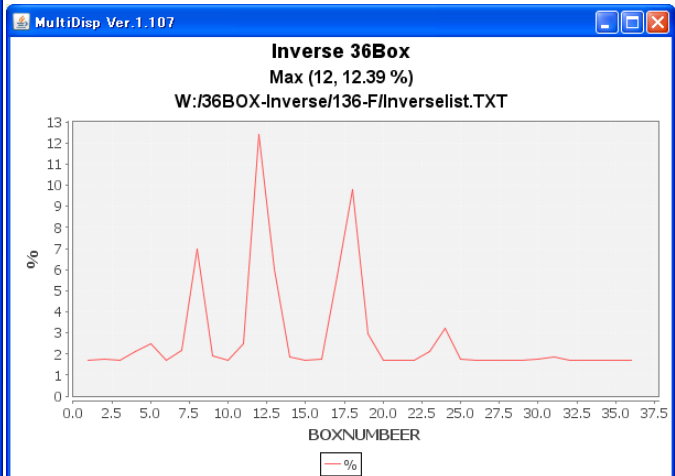
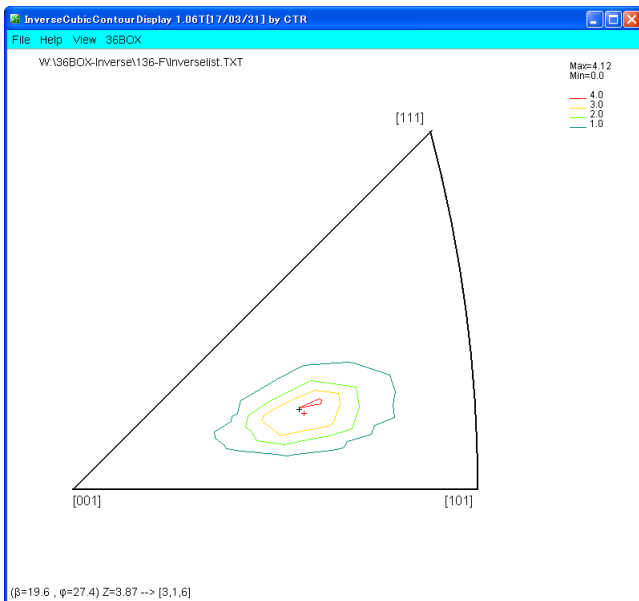
BOX10 ($\beta=44.8$, $\varphi=25.1$) Z=9.23 --> [1,1,3]



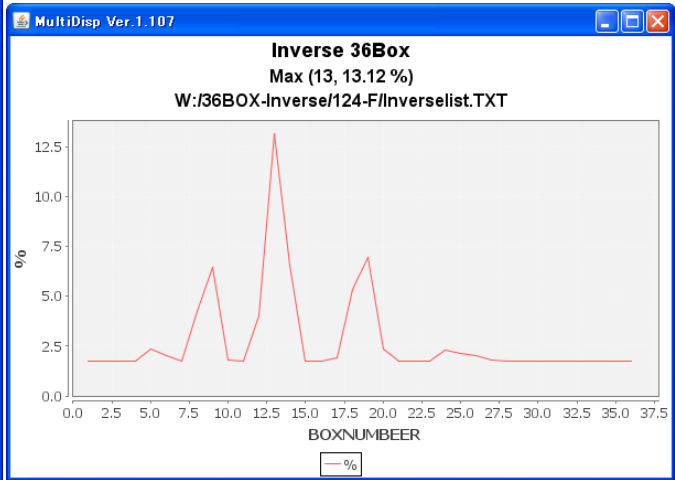
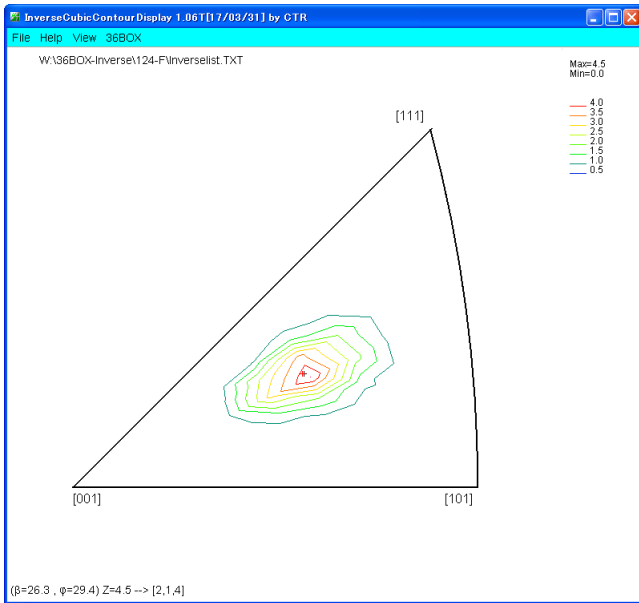
BOX11 ($\beta=0.7$, $\varphi=26.5$) Z=8.7 --> [1,0,2]



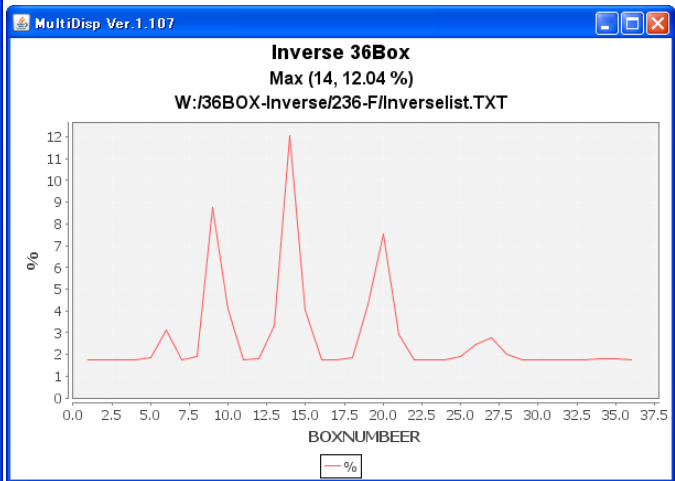
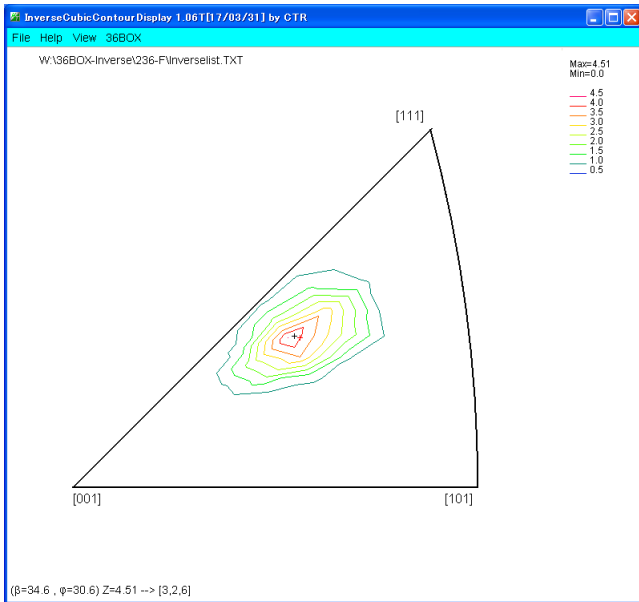
BOX12 ($\beta=19.6$, $\varphi=27.4$) Z=3.87 --> [3,1,6]



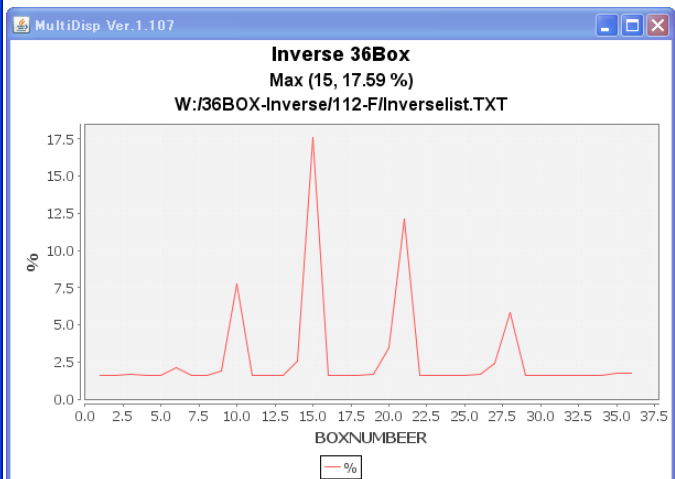
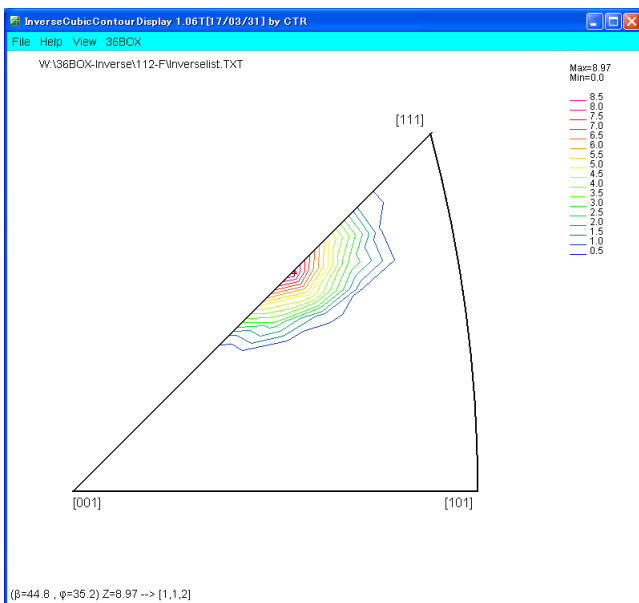
BOX13 ($\beta=26.3$, $\varphi=29.4$) $Z=4.5 \rightarrow [2,1,4]$



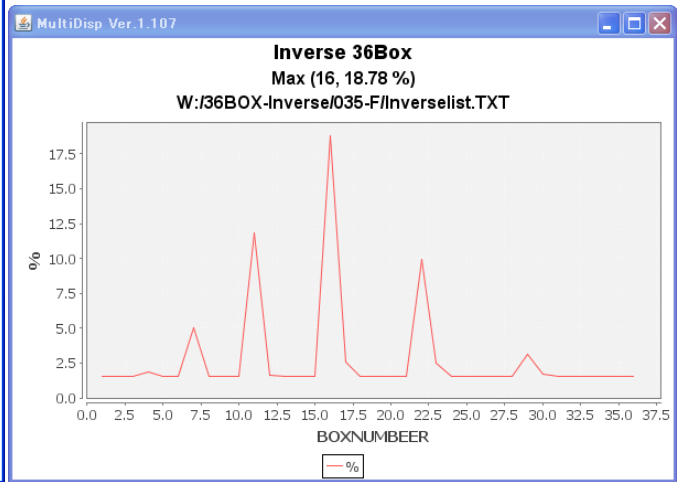
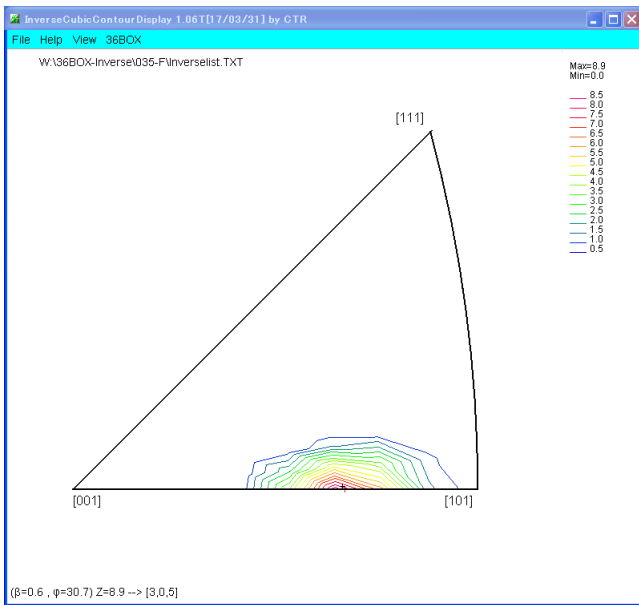
BOX14 ($\beta=34.6$, $\varphi=30.6$) $Z=4.51 \rightarrow [3,2,6]$



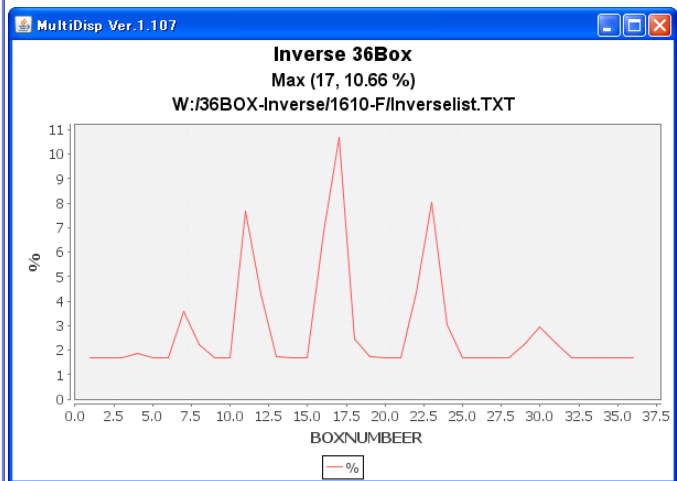
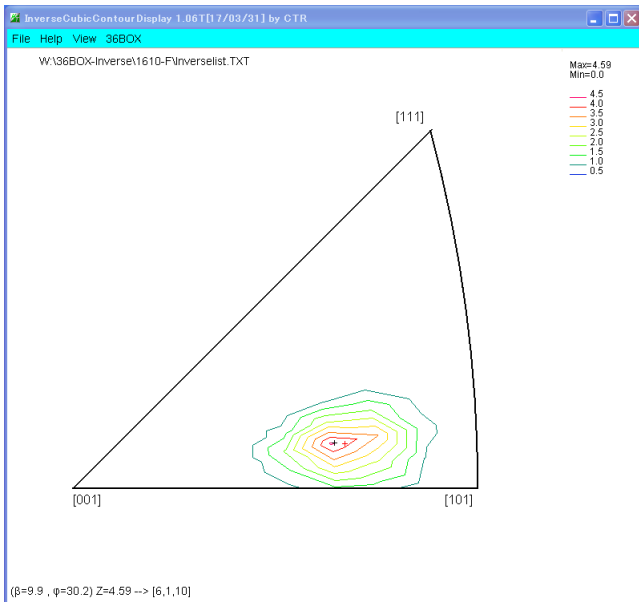
BOX15 ($\beta=44.8$, $\varphi=35.2$) $Z=8.97 \rightarrow [1,1,2]$



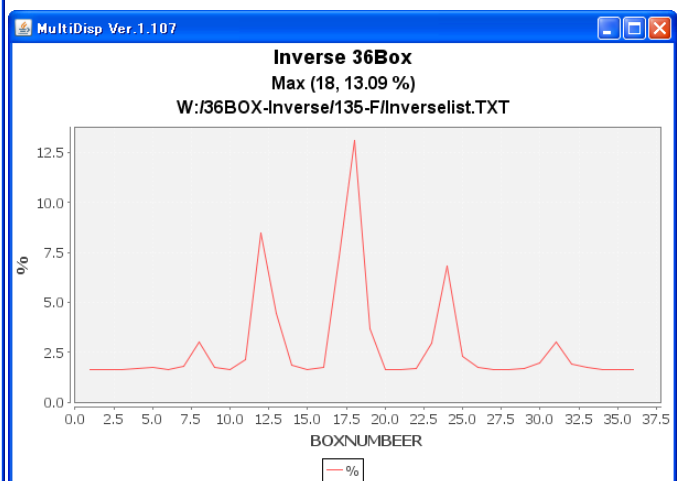
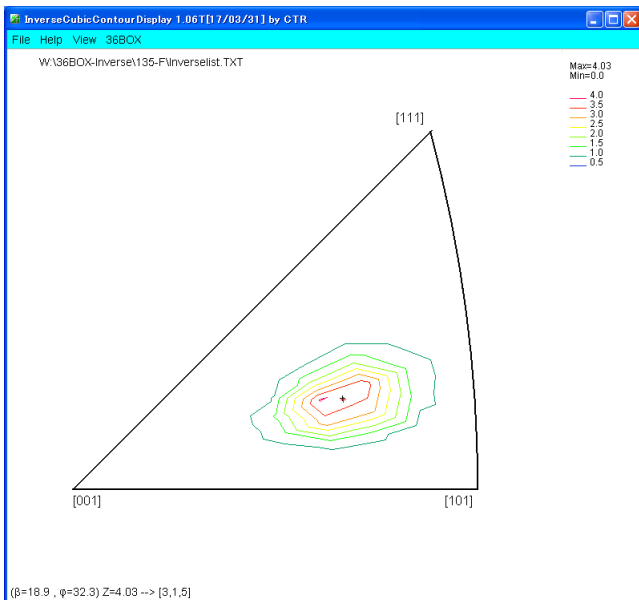
BOX16 ($\beta=0.6$, $\phi=30.7$) $Z=8.9 \rightarrow [3,0,5]$



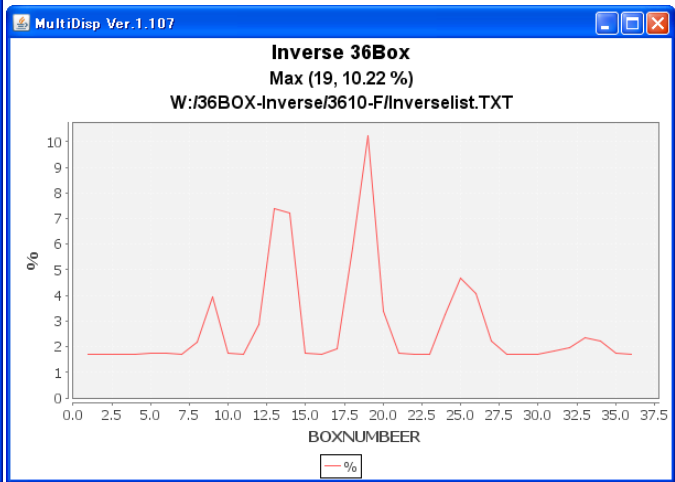
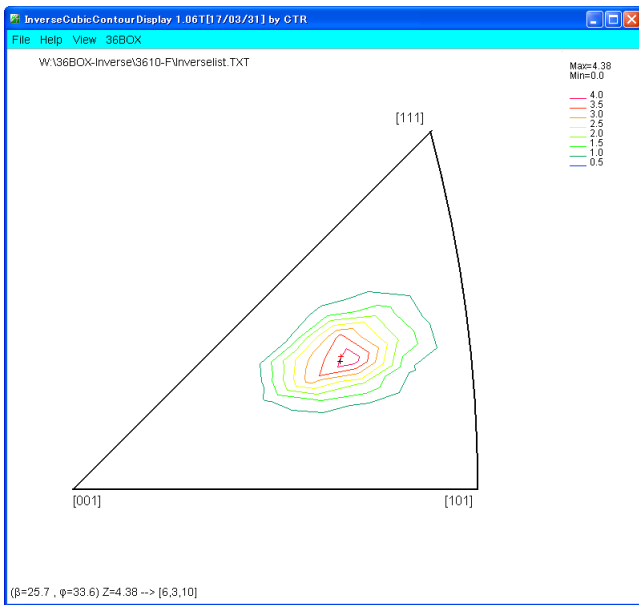
BOX17 ($\beta=9.9$, $\phi=30.2$) $Z=4.59 \rightarrow [6,1,10]$



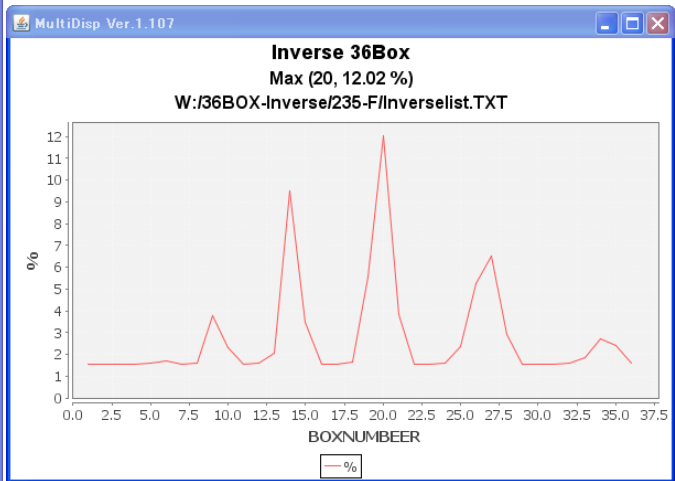
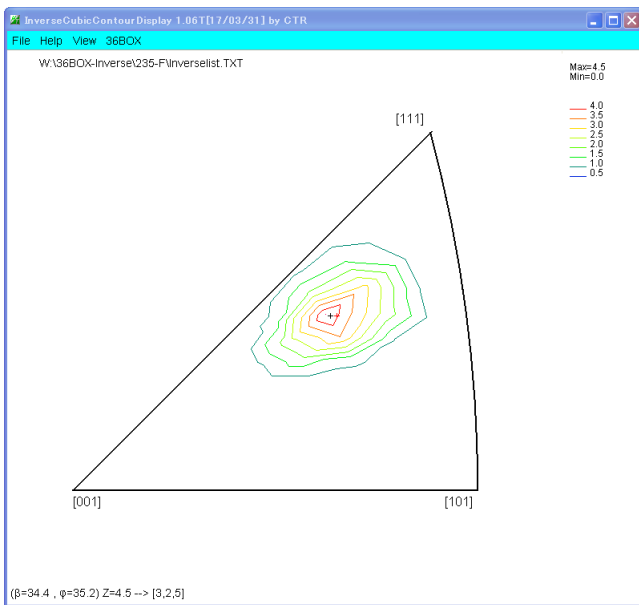
BOX18 ($\beta=18.9$, $\phi=32.3$) $Z=4.03 \rightarrow [3,1,5]$



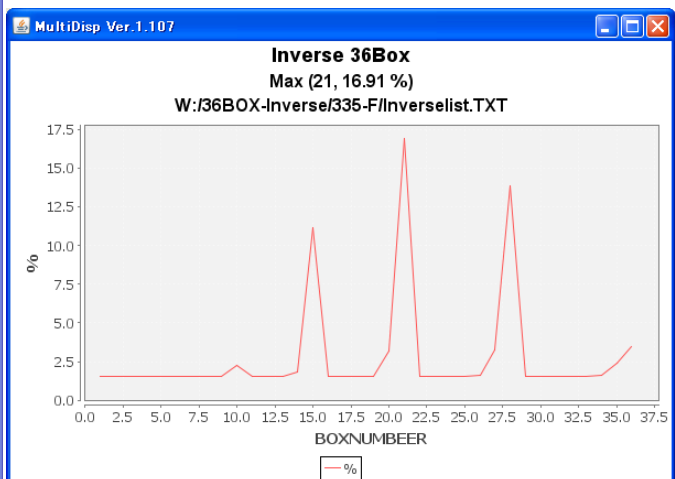
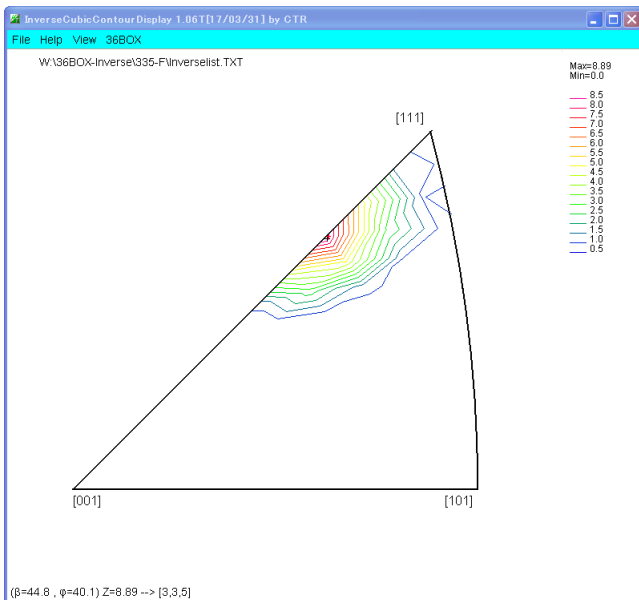
BOX19 ($\beta=25.3$, $\varphi=33.6$) $Z=4.38 \rightarrow [6,3,10]$



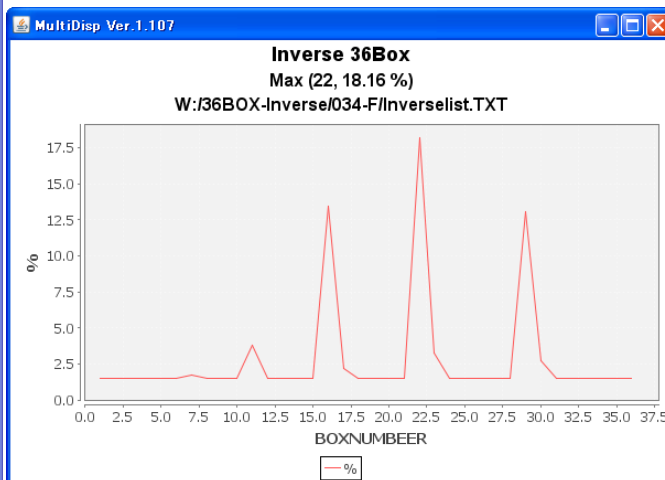
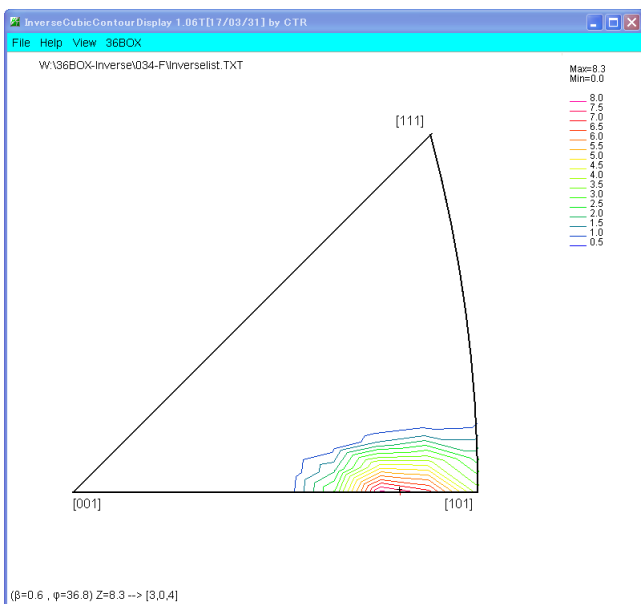
BOX20 ($\beta=34.4$, $\varphi=35.3$) $Z=4.5 \rightarrow [3,2,5]$



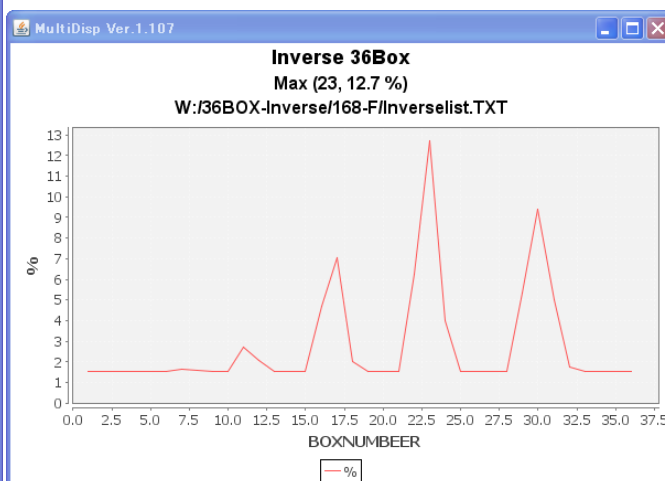
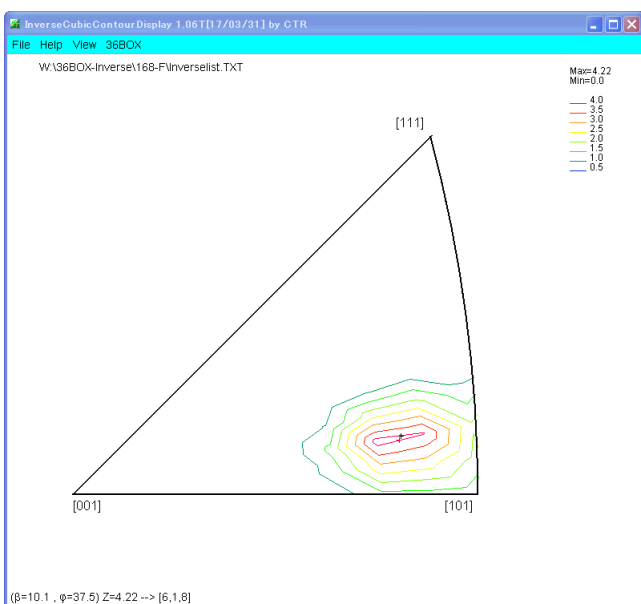
BOX21 ($\beta=44.8$, $\varphi=40.1$) $Z=8.89 \rightarrow [3,3,5]$



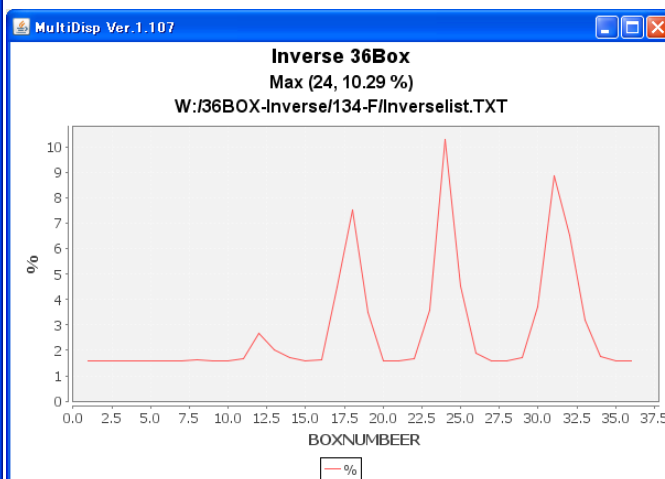
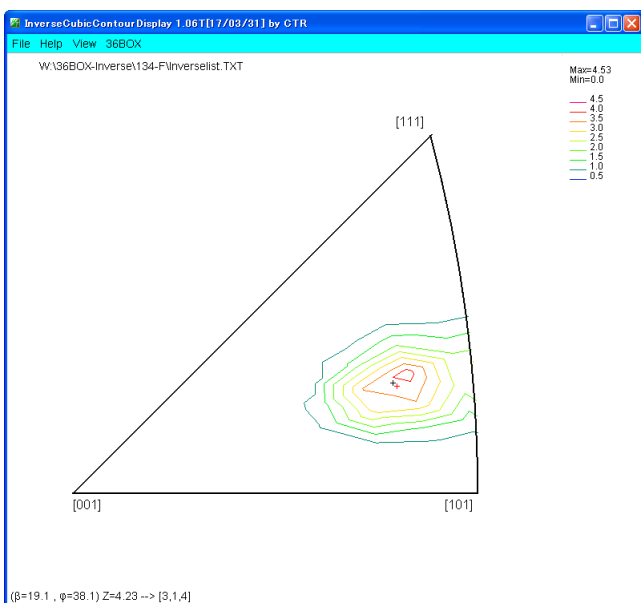
BOX22 ($\beta=0.6$, $\phi=36.8$) $Z=8.3 \rightarrow [3,0,4]$



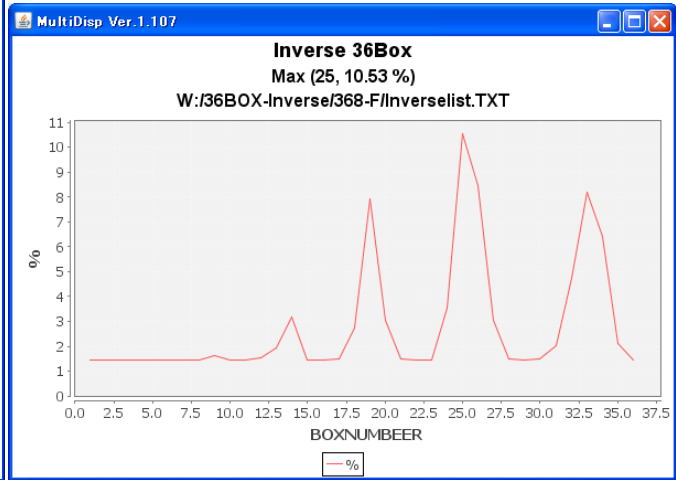
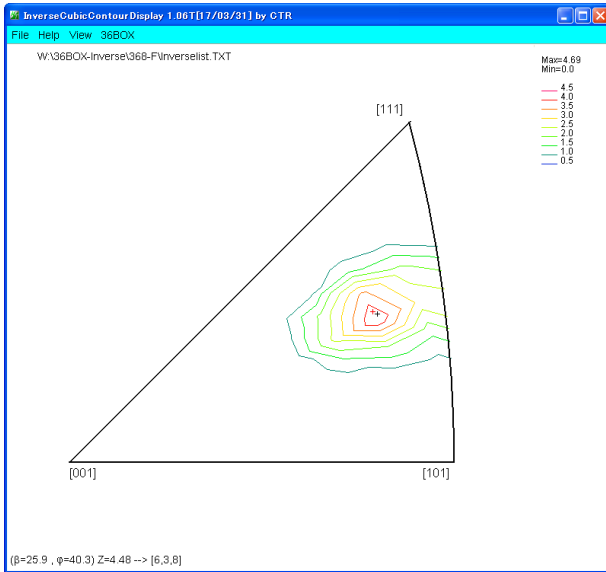
BOX23 ($\beta=10.1$, $\phi=37.5$) $Z=4.22 \rightarrow [6,1,8]$



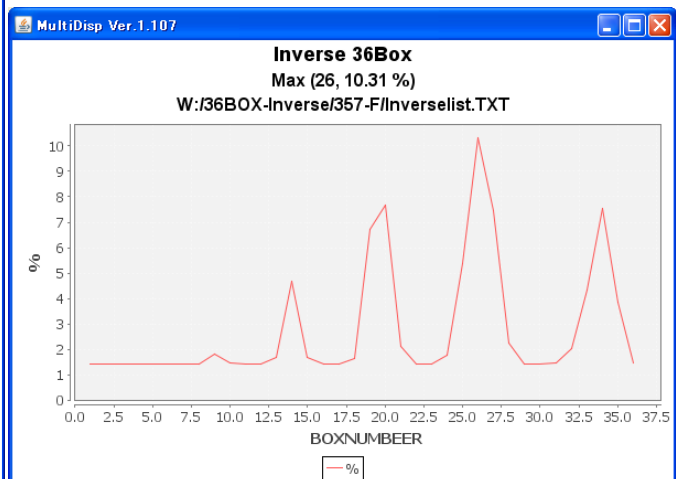
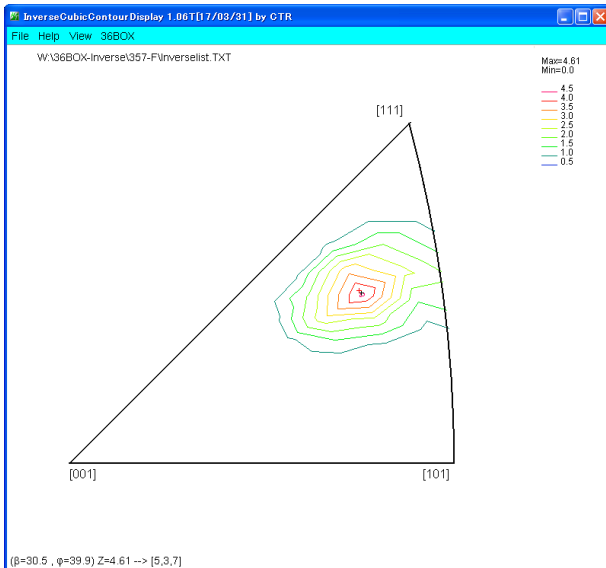
BOX24 ($\beta=19.1$, $\phi=38.1$) $Z=4.23 \rightarrow [3,1,4]$



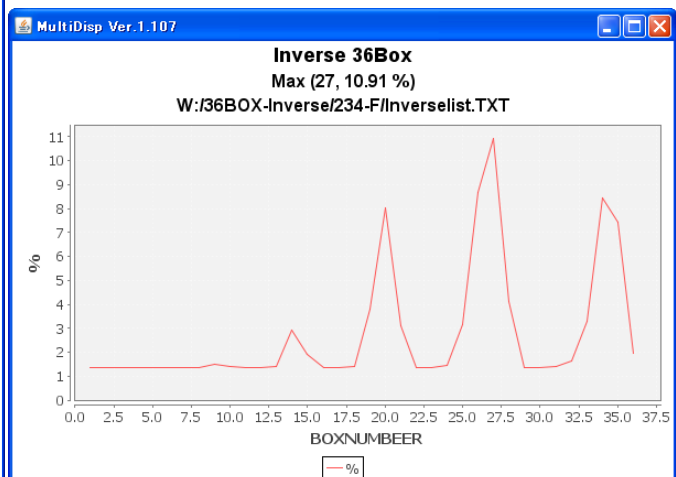
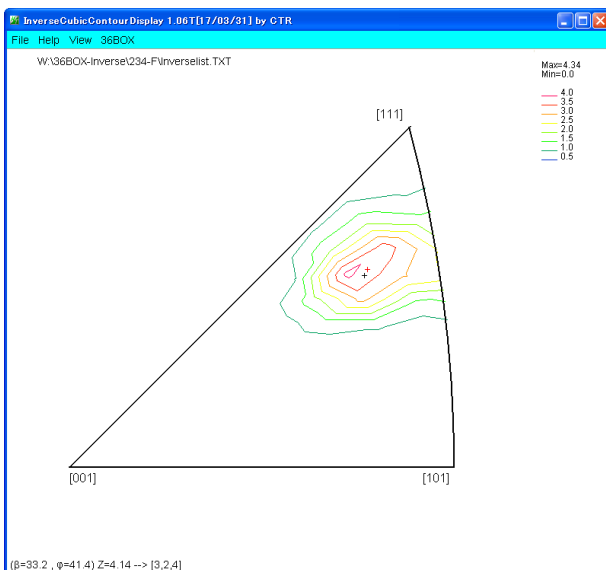
BOX25 ($\beta=25.9$, $\phi=40.3$) $Z=4.48 \rightarrow [6,3,8]$



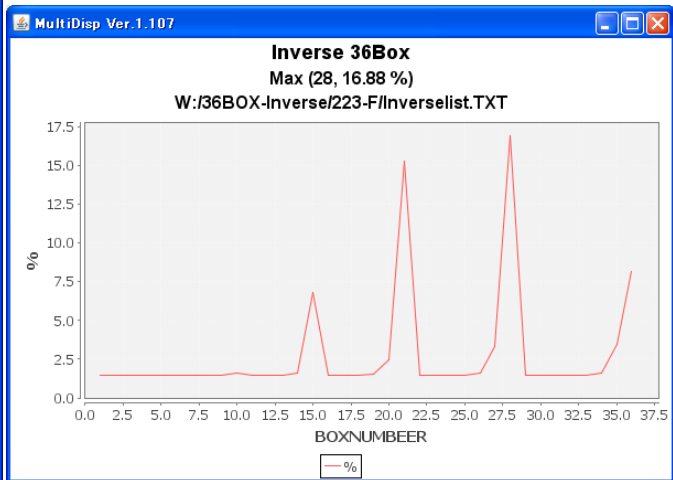
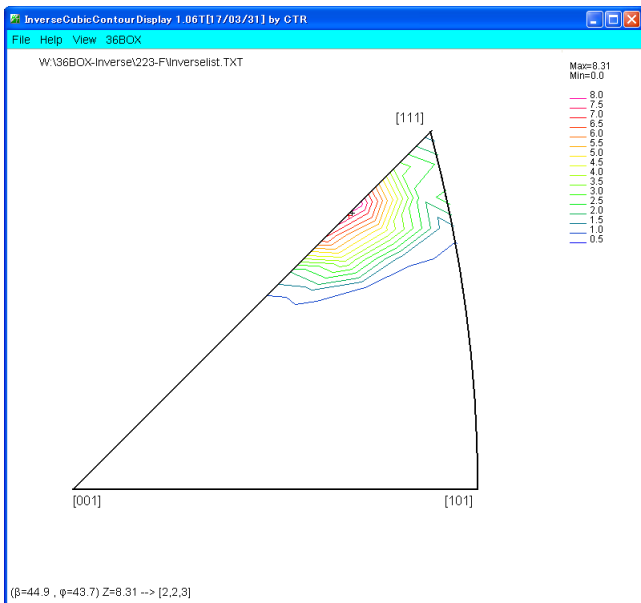
BOX26 ($\beta=30.5$, $\phi=39.9$) $Z=4.61 \rightarrow [5,3,7]$



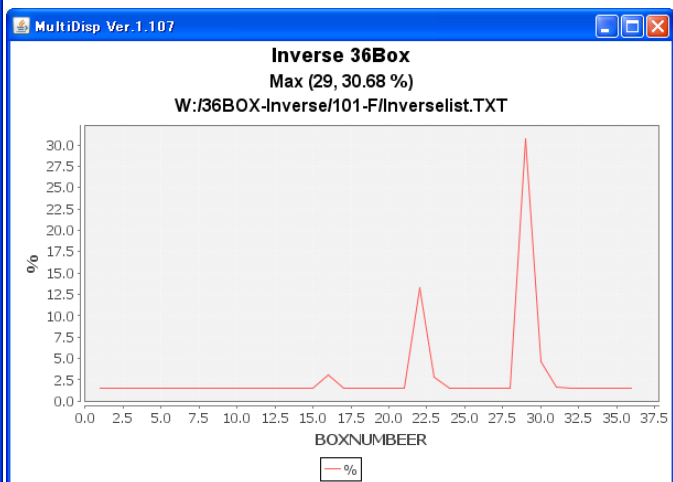
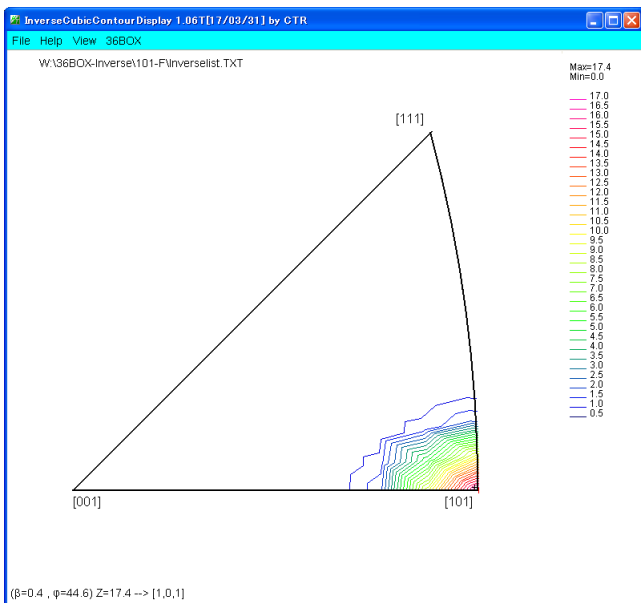
BOX27 ($\beta=33.2$, $\phi=41.4$) $Z=4.14 \rightarrow [3,2,4]$



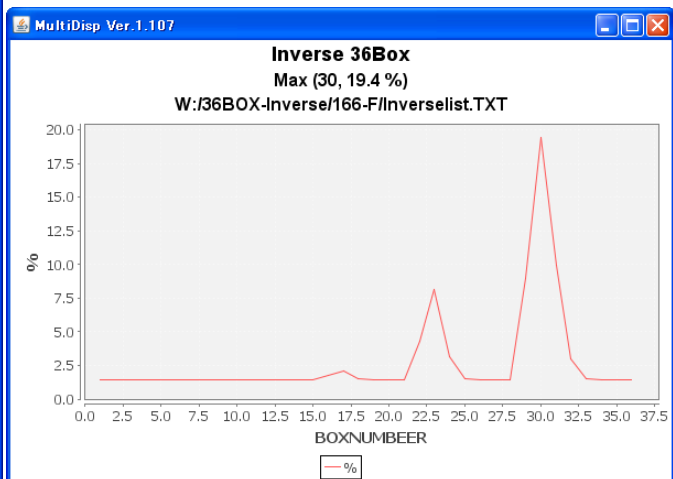
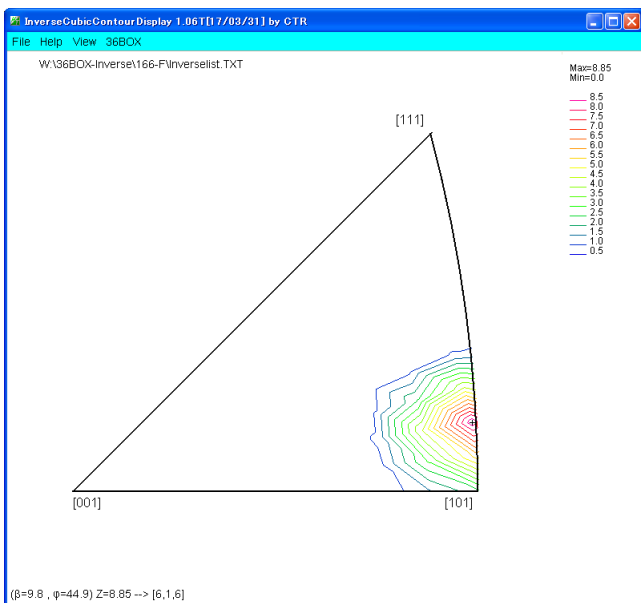
BOX28 ($\beta=44.9$, $\varphi=43.7$) $Z=8.31 \rightarrow [2,2,3]$



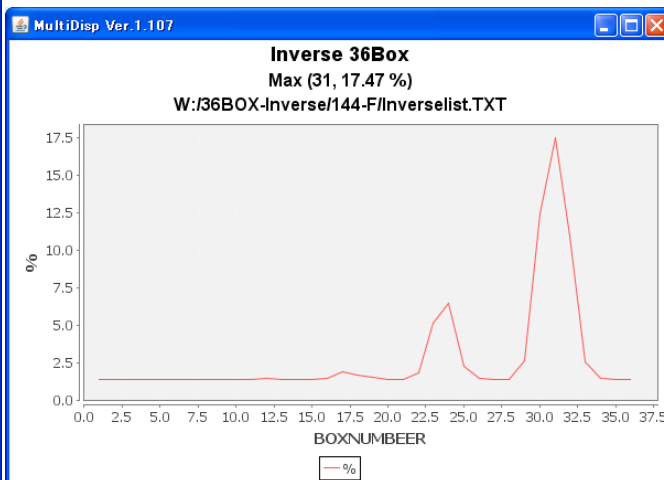
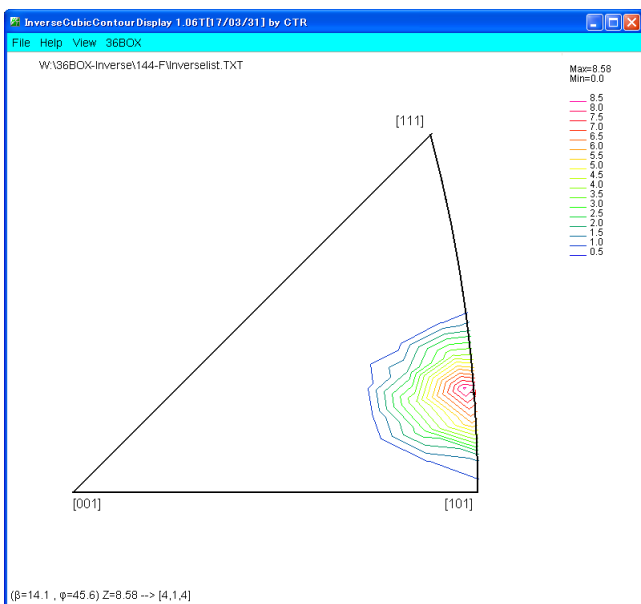
BOX29 ($\beta=0.4$, $\varphi=44.6$) $Z=17.4 \rightarrow [1,0,1]$



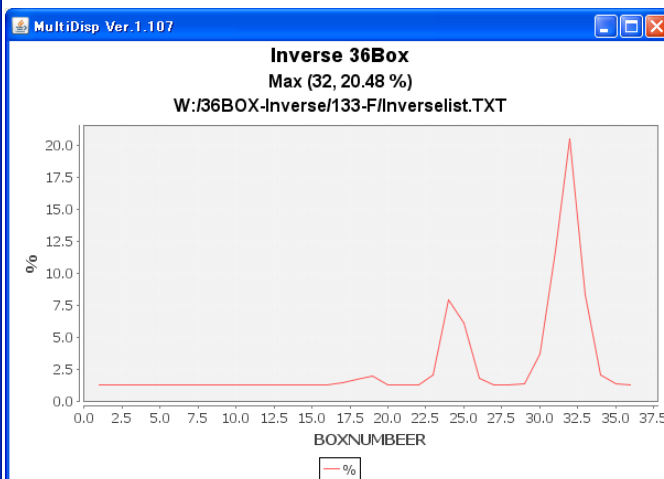
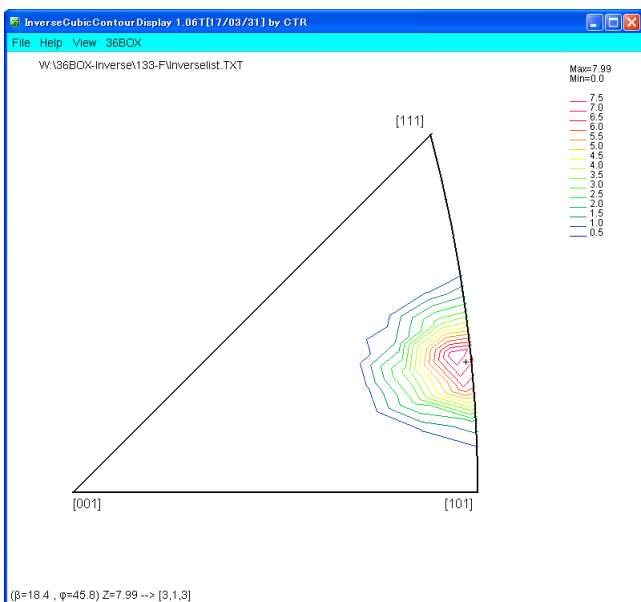
BOX30 ($\beta=9.8$, $\varphi=44.9$) $Z=8.85 \rightarrow [6,1,6]$



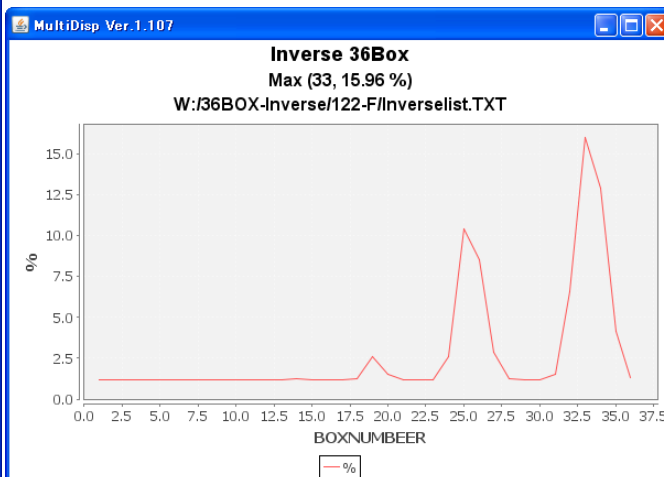
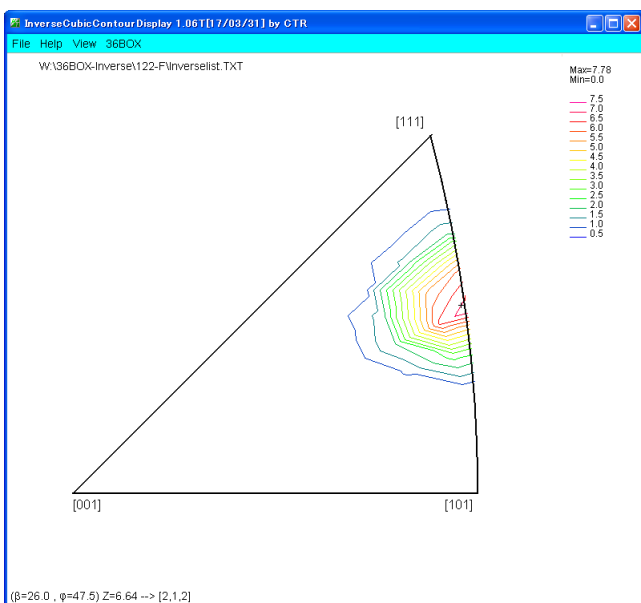
BOX31 ($\beta=14.1$, $\varphi=45.6$) $Z=8.58 \rightarrow [4,1,4]$



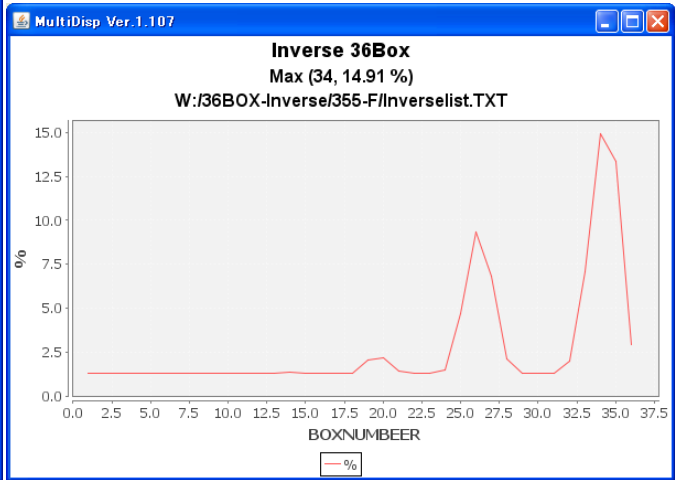
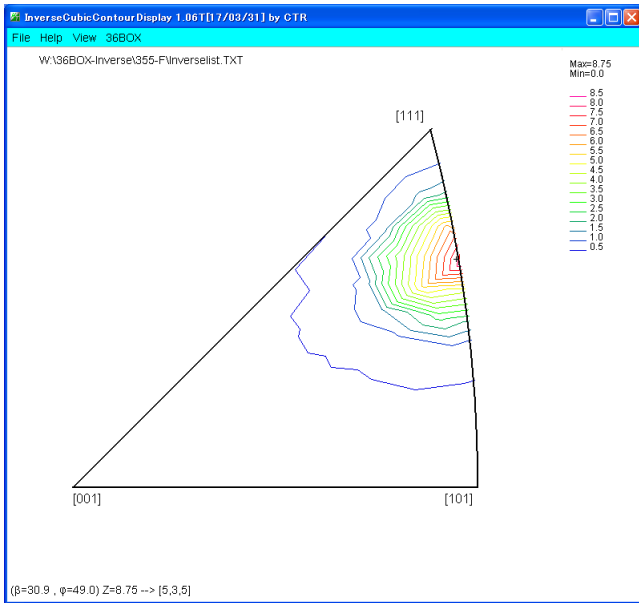
BOX32 ($\beta=18.4$, $\varphi=45.8$) $Z=7.99 \rightarrow [3,1,3]$



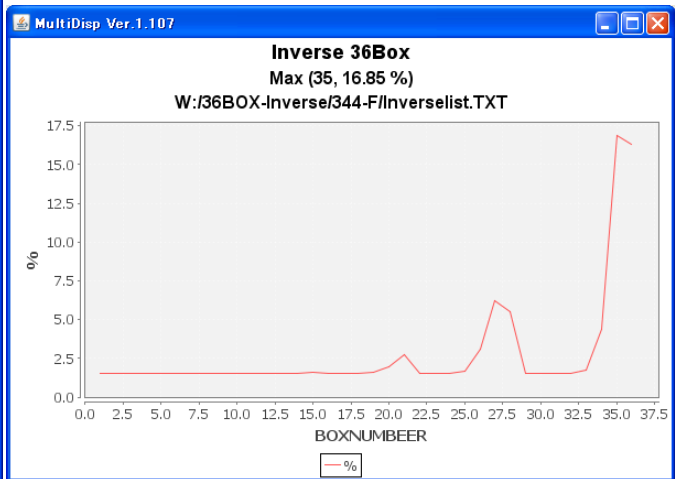
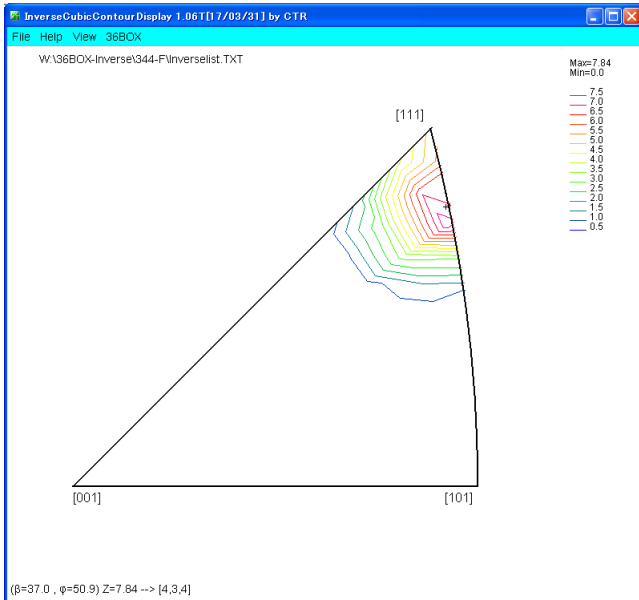
BOX33 ($\beta=26.0$, $\varphi=47.5$) $Z=6.64 \rightarrow [2,1,2]$



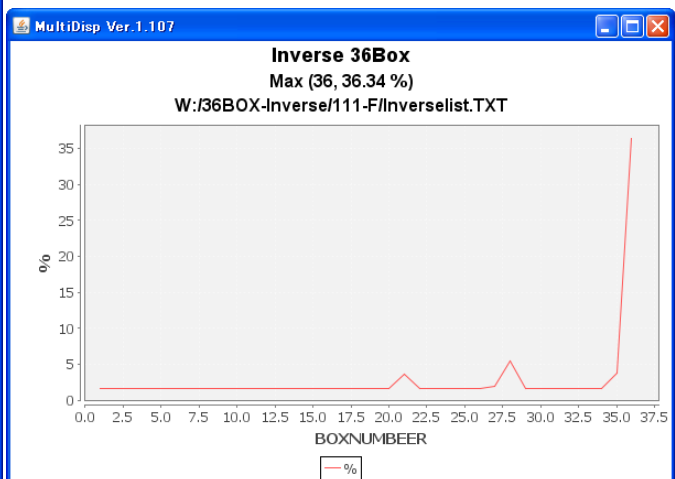
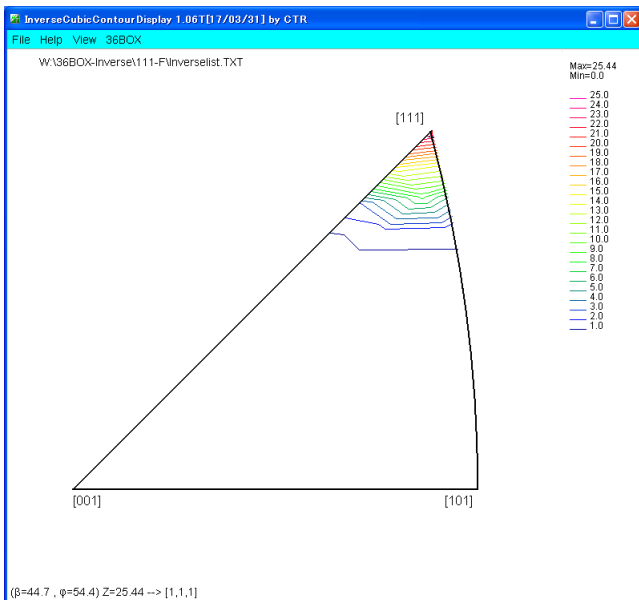
BOX34 ($\beta=30.9$, $\phi=49.0$) $Z=8.75 \rightarrow [5,3,5]$



BOX35 ($\beta=37.3$, $\phi=50.7$) $Z=7.84 \rightarrow [4,3,4]$



BOX36 ($\beta=44.7$, $\phi=54.4$) $Z=25.44 \rightarrow [1,1,1]$



逆極点図を得る

ODF解析ソフトウェアではODF解析後、逆極点図の `export` を可能にしている。

この `export` された逆極点図を読み込む

Ver 1. 0はLaboTexの逆極点図

Ver 1. 1はStandardODFの逆極点図をサポートします。

の解析が可能になります。

InverseDispの機能

ステレオ三角表示上で最大強度位置表示

最大強度位置の反射指数（本来指数は整数であるが、実数表）

36分割の平均強度表示

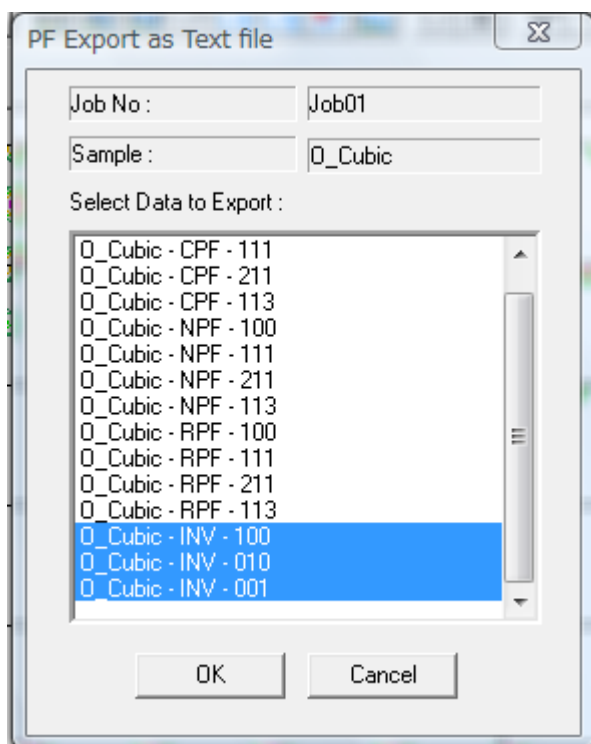
36分割のプロファイル表示

逆極点図のテキストデータ出力（Cluster解析用）

立方晶のみ

LaboTexにおける逆極点図の出力

逆極点の 100,110,111 に関して計算し、PF-exportにより作成される。



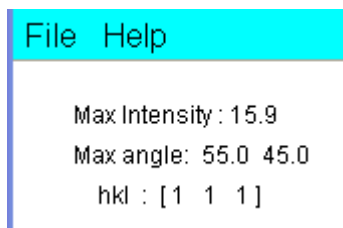
StandardODFにおける逆極点

標準の設定でODF解析と共に逆極点図は計算され、StandardODFがインストールされているディレクトリにテキスト出力されています。

StandardODFがCドライブにインストールされていれば

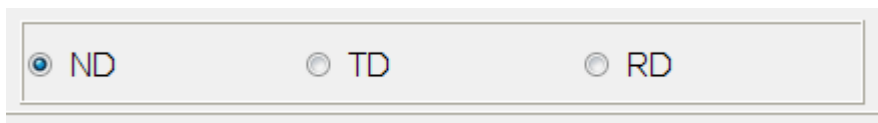
C:\¥ODF¥OUTPUT2、あるいは C:\¥ODF¥ODF1

図では、表示角度が(55.0,45.0)が最大強度で、指数変換すると、[1 0 1]と表示
その時の強度が 15.9 である。



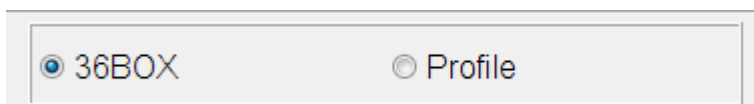
極点測定が5度ステップで行われた場合、逆極点図も5度ステップで作成されている。
右の図表では、逆極点図を36分割し、その範囲の平均値が表示されている。
又、最大強度位置に赤丸が表示される。

ND, TD, RDの表示

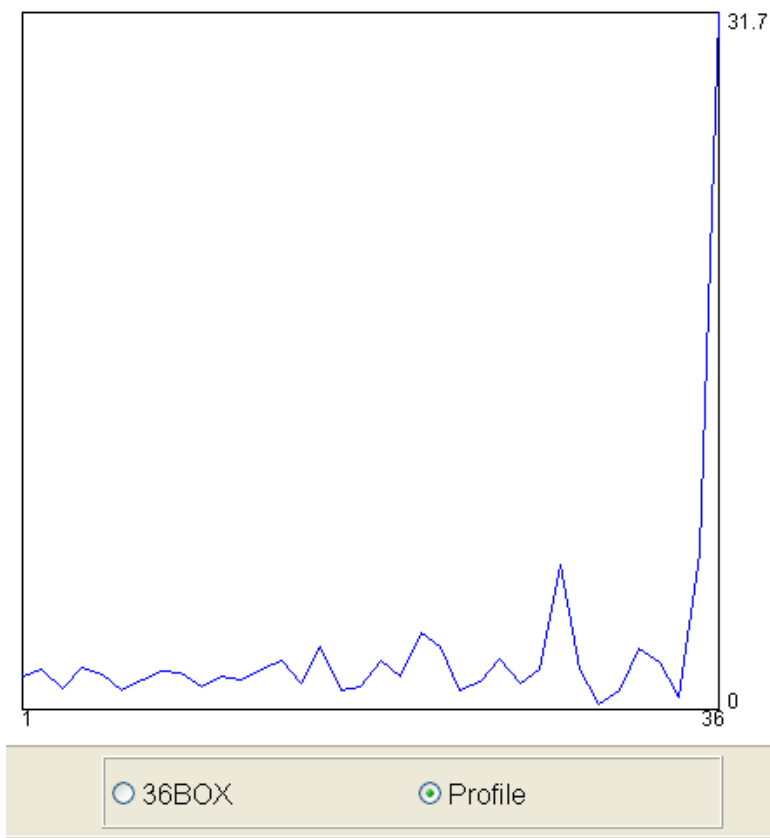


ボタン選択で切り替わる。

36BOXとProfile切り替え



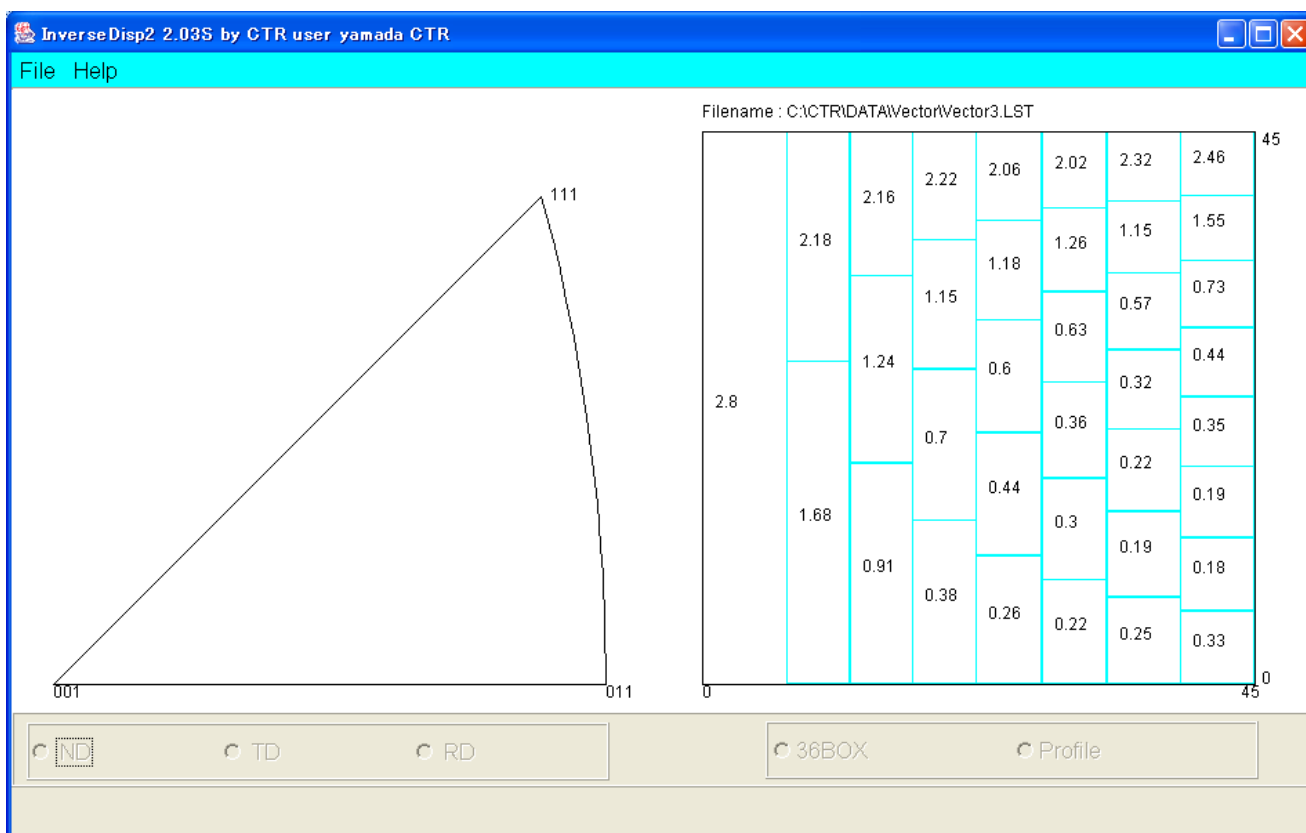
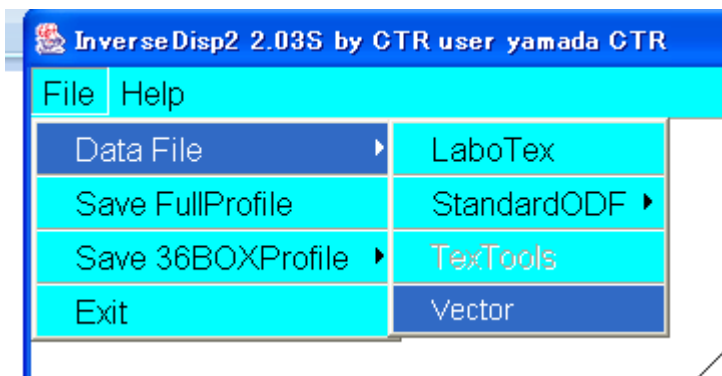
切り替え後のND, TD, RD選択で切り替わる



図では、[111]がピーク状に表れています。

Vector法の36BOX表示

Vector法評価のために、36BOXを標示する



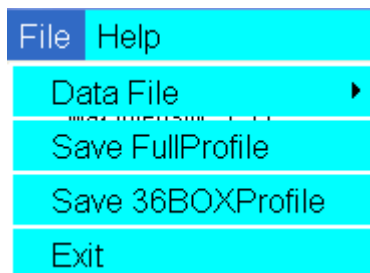
ベクトル法では、等間隔データは計算されていないので、ステレオ三角形は表示されません。

データセーブ

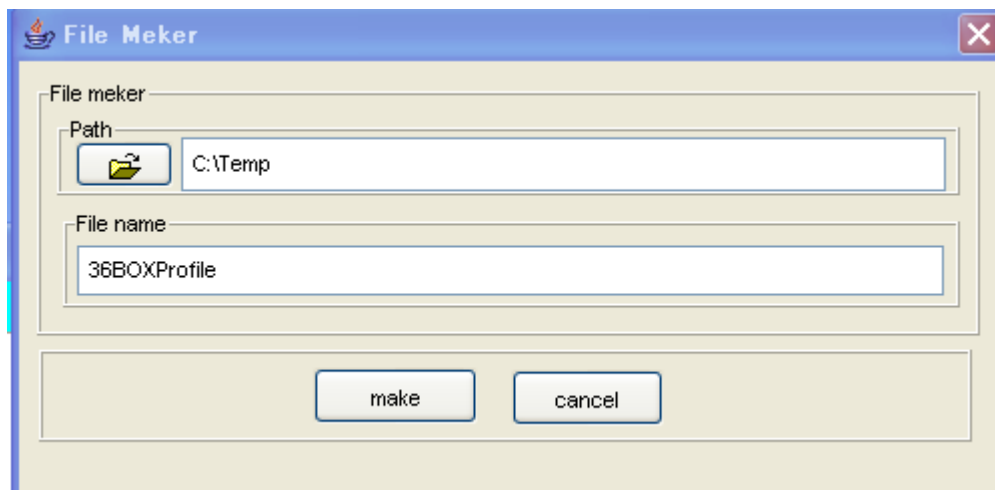
ODF 解析すると、逆極点図は、 $0 \rightarrow 90$ 度 (Standard ODFは異なります) の格子状データとして得られます。

この格子状データと $0 \rightarrow 45$ 度 (立方晶) データとして取り出します。

このデータを他のソフト (Cluster) で読み込める形式で出力します。(GeneralFormat)



FullProfileは、逆極点図 ($0 \rightarrow 45$, $0 \rightarrow 45$) のデータをプロファイル形式
36BOXProfileは逆極点図を36BOXの平均値としてプロファイル形式
例

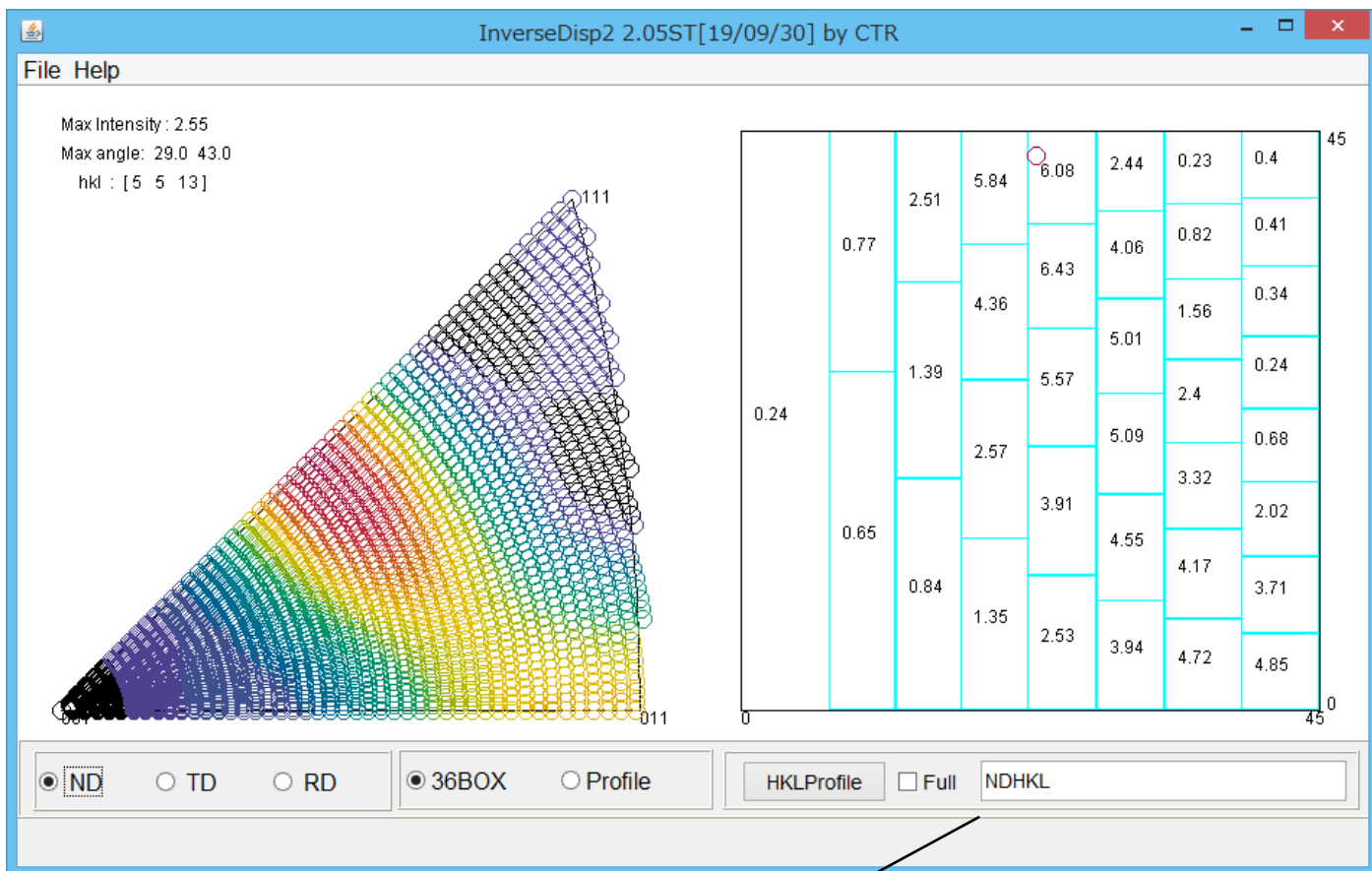


ファイル名は、36BOXProfile-36INV.txtとして作成

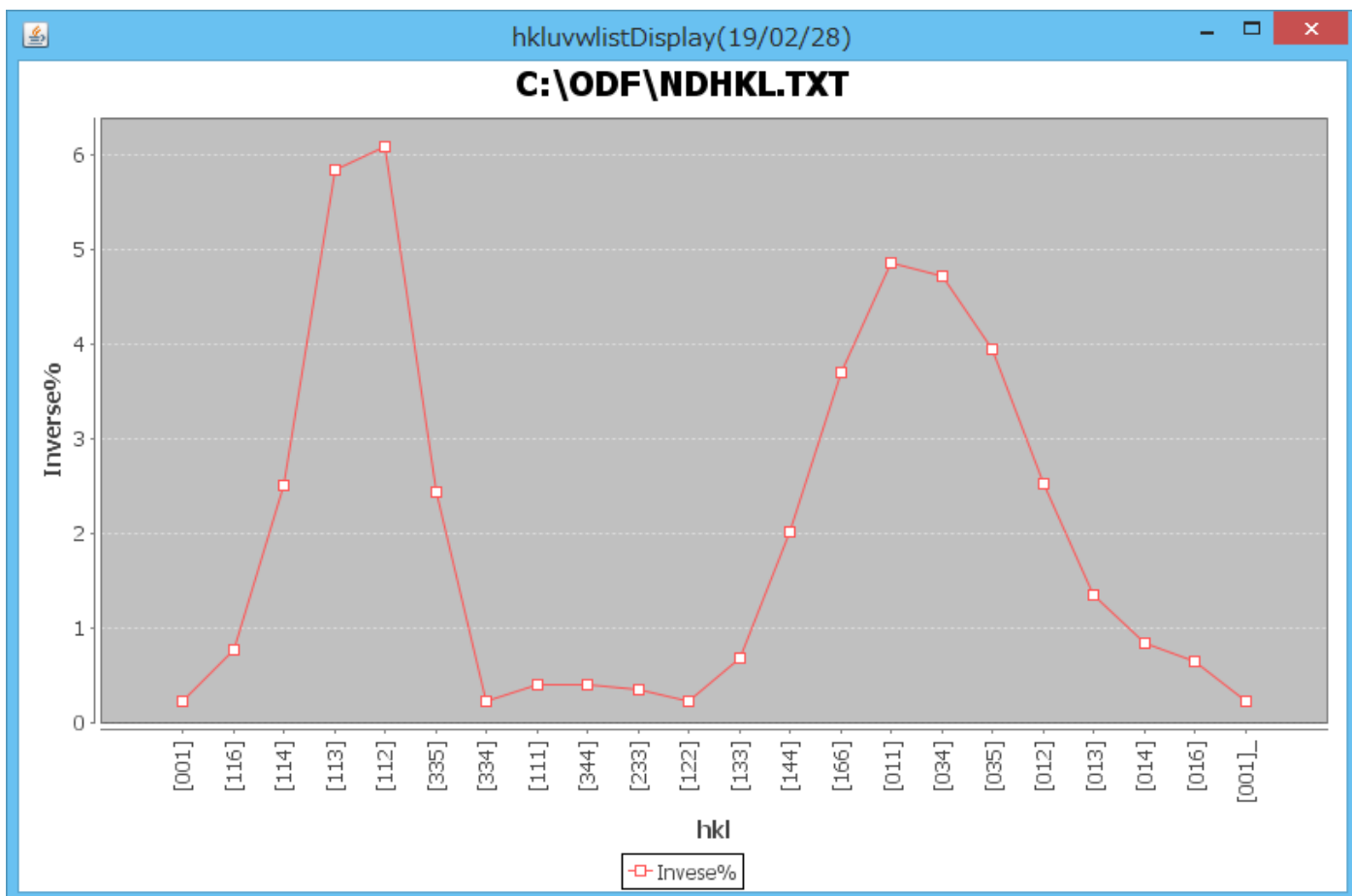
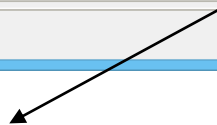
```
ファイル(F) 編集
1 0.869
2 0.977
3 0.985
4 0.858
5 0.893
6 1.047
7 0.92
```

```
31 0.885
32 0.735
33 0.68
34 0.68
35 0.705
36 0.773
```

HKLPeofile の追加

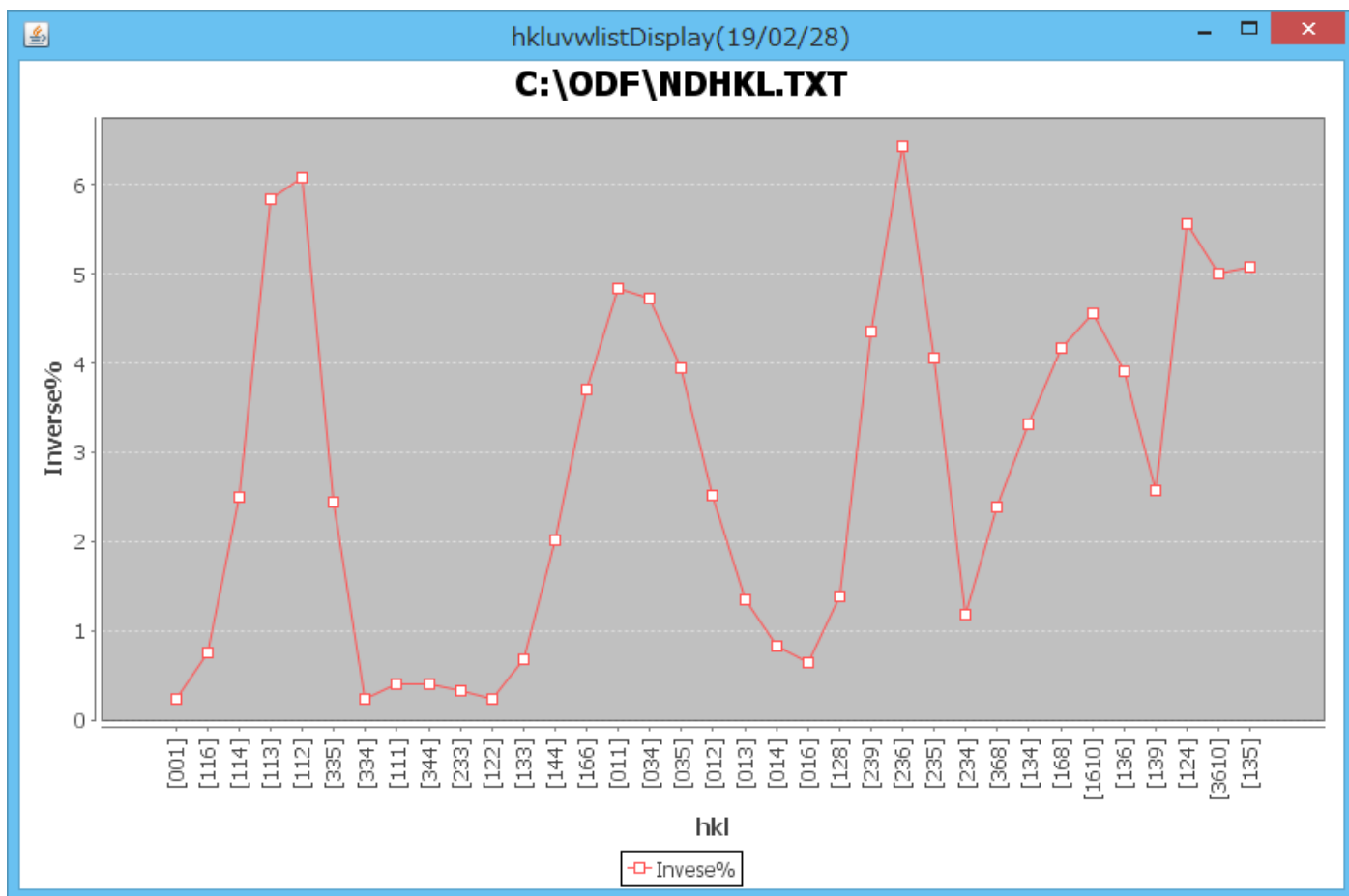


逆極点図の外周部分を表示



すべて表示するには

HKLProfile Full NDHKL



ソフトウェアに関しては、

<http://helertex.sakura.ne.jp/Soft/Soft-index.html>

を参考にしてください。