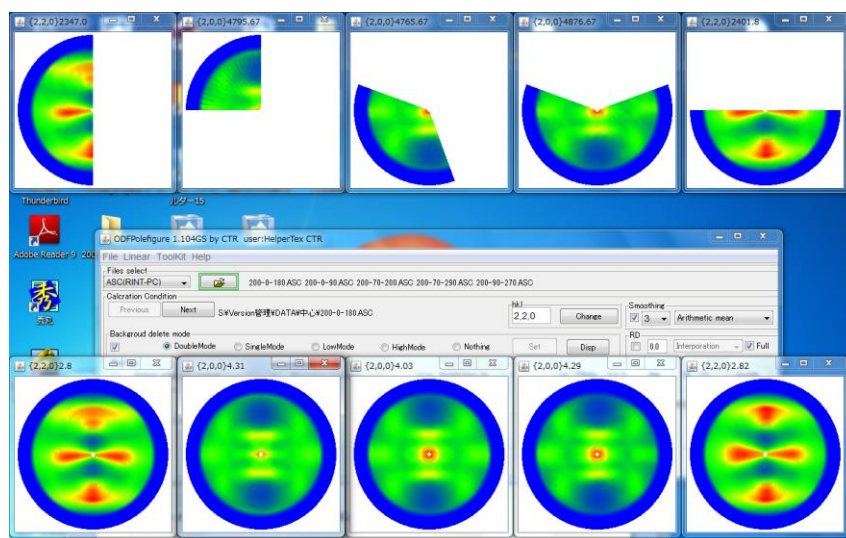
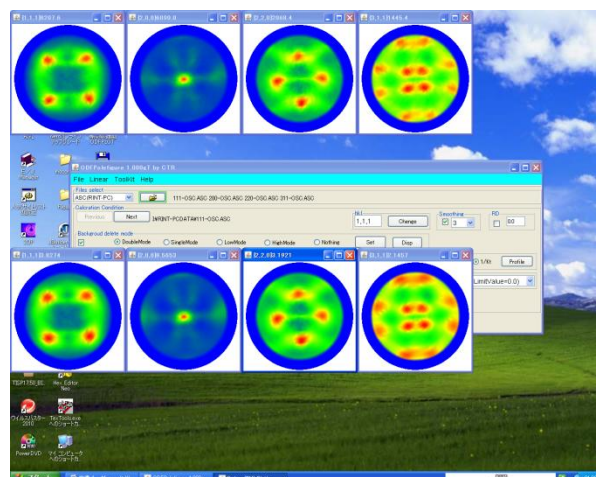


ODF解析の為の極点処理とODF入力ファイル作成

ODF Pole Figureソフトウェア

Ver.1.08M

複数の極点測定ファイルの一括データ処理を行い、各種ODF用入力ファイルを作成



2016年09月21日



HelperTex Office

<http://www.geocities.jp/helpertex2>

- * <p>タイトル:ODFの為の極点データ処理</p>
- * <p>説明: 複数の極点をを一括処理を行い、PFtoODF3に直接引き渡し</p>
- * <p>著作権: Copyright (c) 2011</p>
- * <p>会社名: HelperTex</p>
- * @author 未入力
- * @version 1.106
- * Version 1.001 2010-09-30 Asc変換をサポート,透過法確認
- * Version 1.002 2010-10-03 Defocusfile check
- * Version 1.003 2010-10-06 buttonの順序入れ替え
- * Version 1.004 2010-10-09 バックグラウンド削除が複数のデータに対して独立になっていなかったバグ修正
- * Version 1.005 2010-10-26 TXT2 ファイルの拡張子をtxt->TXTに変更
- * Version 1.006 2010-11-04 メニューにPFtoODF3を追加
- * Version 1.007 2010-11-10 setで指数変更を可能とした
- * Version 1.008 2010-12-03 ZeroCut ファイル名で1文字足りないバグ修正
- * Version 1.100 2010-12-30 平滑化にSavitzkeyGolay追加
- * Version 1.101 2010-12-30 RDにSpline、Spline+2.5追加
- * Version 1.102 2010-01-19 repaint()
- * Version 1.103 2010-01-28 β 範囲 70-200,70-280,0-90,0-180,のRDおよびfullPoleをサポート,
- * Version 1.104 2010-02-01 RD,360度化を最初に行うRD,FULL,SM,BG,DEF,規格化の順とした
- * Version 1.105 2010-02-09 RAPIDのzeroデータ数の数値の指定 0:全てCut 100:従来と同じ
- * Version 1.106 2010-02-10 72点データの対応(RINT-HP)
- * Version 1.107 2010-02-13 Ver.1.106修正にバグがあり、RAPID処理が連続で出来なかった
- * Version 1.108 2011/02/18 java -jar c:\R¥bin¥ODFPoleFigure.jar ascmode n file1 file2 filen 対応
- * Version 1.109 2011/02/20 StandardODFの極点図データ変換用ファイル_S.TXTを作成
- * Version 1.110 2011/03/21 RAPIDのzeroデータ数の扱いを変更 0:従来と同じ 100:全て0以上
- * Version 1.111 2011/03/31 α 点数9以下でエラー Ver.1.105--1.110
- * Version 1.112 2011/04/06 バックグラウンド削除方法変更が出来なくなっていた。
- * Version 1.113 2011/04/22 バックグラウンド変更時setkeyをred表示
- * Version 1.114 2011/04/23 RINT2000Polefigure RD,SmoothingのinitSetを追加
- * Version 1.115 2011/04/26 バックグラウンド除去なしでASCファイルにバックグラウンド登録に対応
たとえば、hk1のみ変更の場合
- *Version 1.05 2014/05/14 異なる α 、 β 測定間隔に対応
- *Version 1.06 2016/09/29 stdNrom変更
- *Version 1.07 2016/10/01 ODFPoleFigure2で切り替えた規格化モードにより規格化
- *Version 1.08 2016/10/04 極点図の中心の平均化をON-OFF

概要

従来の極点処理は測定極点データ毎に極点解析を行い、一旦処理結果ファイルを作成し、その複数の極点処理結果を各種ODF向けに纏めていた。しかし、処理点数が増すと煩雑である。そこで、複数の極点測定結果を一括処理するアプリケーションを作成した。

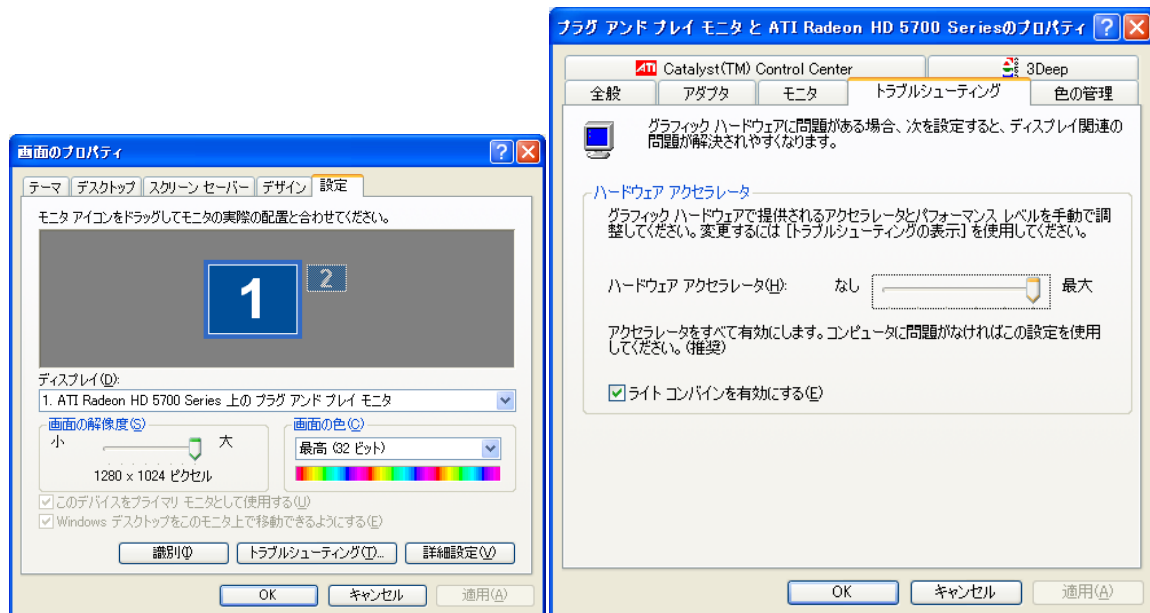
ODF Pole Figure ソフトウェアの処理内容

- 複数の極点 A s c ファイルを一括選択 (測定極点図の表示)
- 対応 A s c ファイル (HP, PC, SmartLab RINT-RAPID)
- 平滑化処理(単純移動平均、Savitzkey-Golay(適合化移動平均))
- R D 処理(単純補間、spline 補間)
- バックグラウンド処理 (α 毎に β 方向の最大値、最小値、BG1, BG2 プロファイル表示)
- 吸収補正処理(吸収補正曲線を表示)
- D e f o c u s 処理 (Defocus 補正曲線表示)
- 規格化処理
- 処理結果極点図の表示
- ODF 作成ソフトウェア PFtoODF3 (Ver7.000 以降) の立ち上げ
(処理データ、指数、 2θ 角度、 α 範囲を表示)

対応 ODF ソフトウェア

- L a b o T e x
- S t a n d a r d O D F
- T e x T o o l s
- p o p L A

画面



1280x1024 ピクセル (標準文字)

ハードウェアアクセラータを働かせる

1280x1024 では、入力データが 10 ファイルまで、同時に画面表示が可能

このサイズより小さい設定では、表示が重なってしまうが、解析処理は正常

j a v a 環境

j a v a r u n t i m e

j a v a 0 - 3 D

がインストールされていること

直接関係する他のソフトウェア

- PoleDisplayTXT2 (極点図の表示)
- TXtDisplay (テキスト画面表示)
- MultiDisplay (バックグラウンド、吸収補正、Defocus 画面表示)
- PFtoODF3 (ODF ファイル作成)

最新のバージョンと組み合わせして下さい

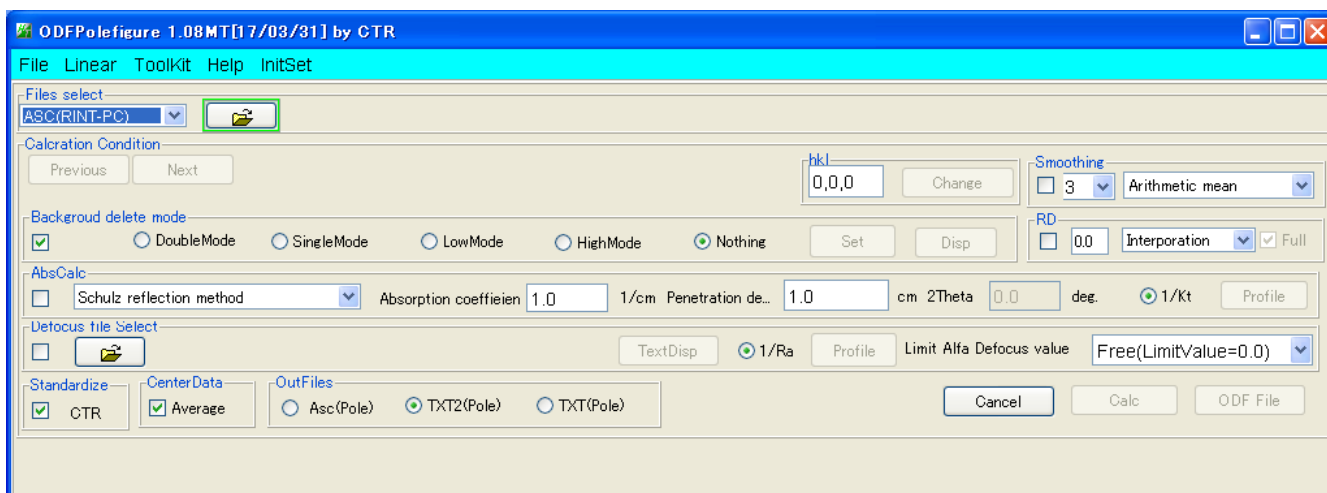
注意

- 入力極点図ファイル名、ディレクトリにはスペースが含まれないこと
- 出来たらファイル名の先頭は指数を表すことが望ましい (例 111_7mm,111-7mm..)

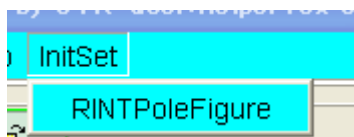
ソフトウェアの起動

c:\CTR\bin\ODFPoleFigure.jar

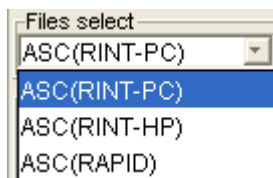
ソフトウェアの使い方



RINT2000PoleFigure と同一処理を実現



対応 A s c ファイルの指定



S m a r t L a b の A s c は R I N T - P C で対応

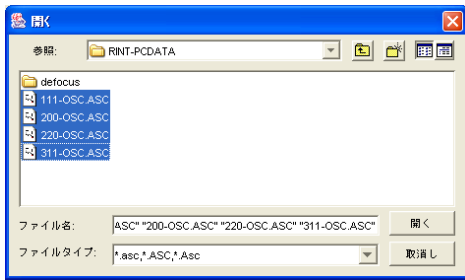
P C 版と H P 版ではバックグラウンドの扱いが異なるので、間違わないでください

R A P I D は 2 D P 作成の A s c を直接読み込む (内部で Z e r o C u t が行われる)

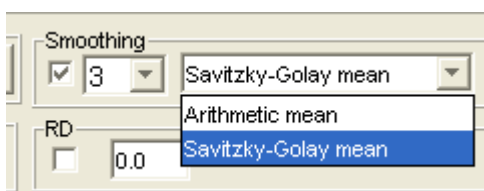
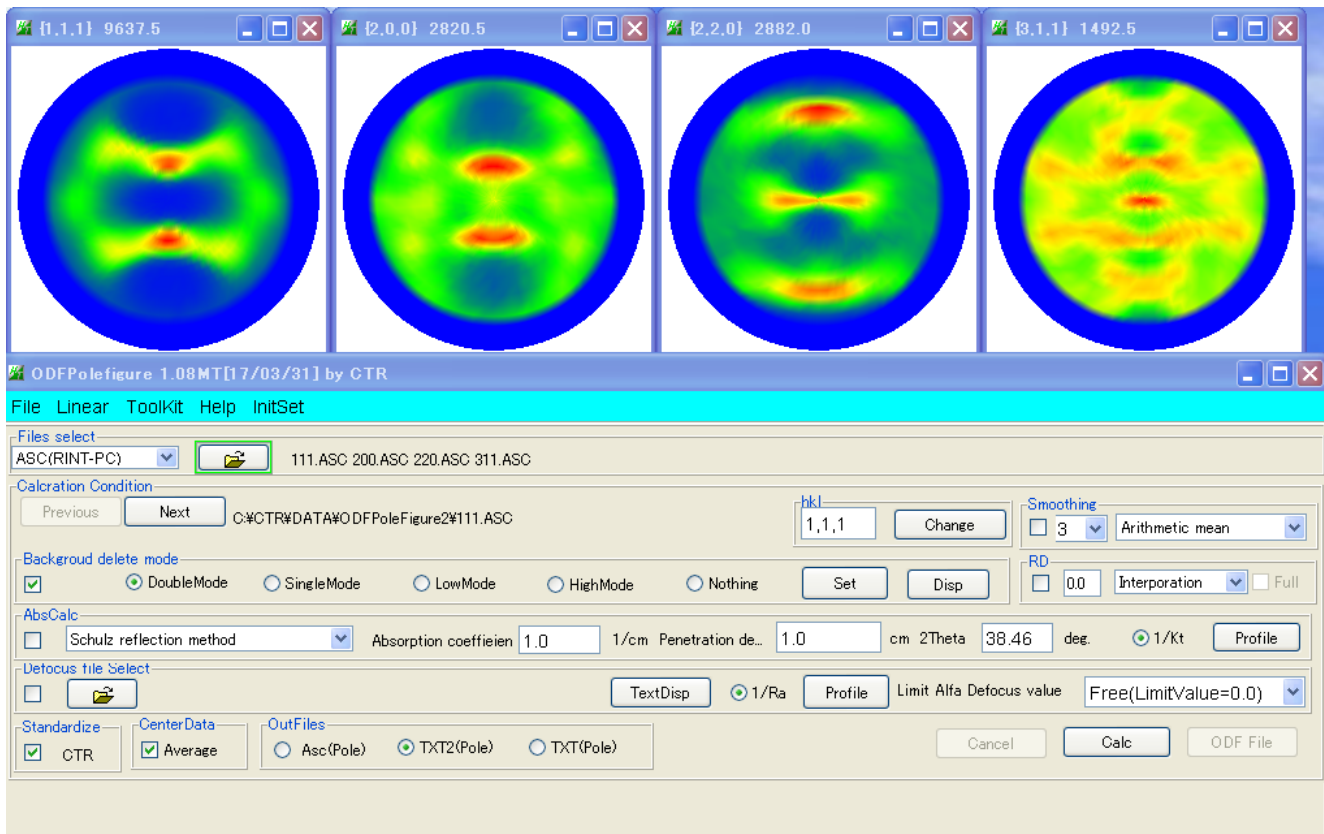
極点図ファイルの選択



C t n l K e y を使って複数選択



選択したファイル名と極点図が表示される。

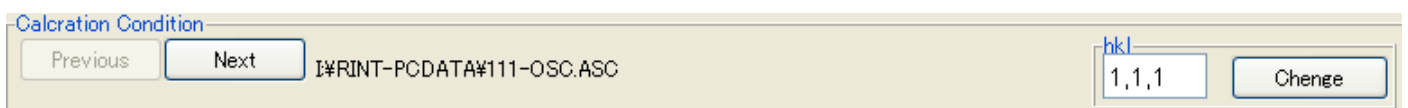


平均化点数とRD角度が指定できる。

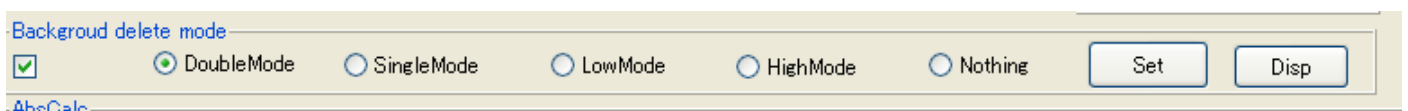
Savitzkey-Golay では平均点数 1, 3 では平均化されません。

単純移動平均はファイル名に M, 適合化移動平均では G で表現されます。

複数選択した場合個々に指数変更、バックグラウンド処理方法が指定できる

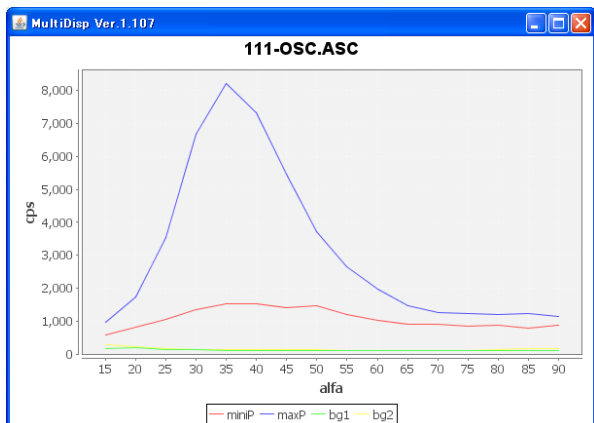


指数変更はChange Keyによる。

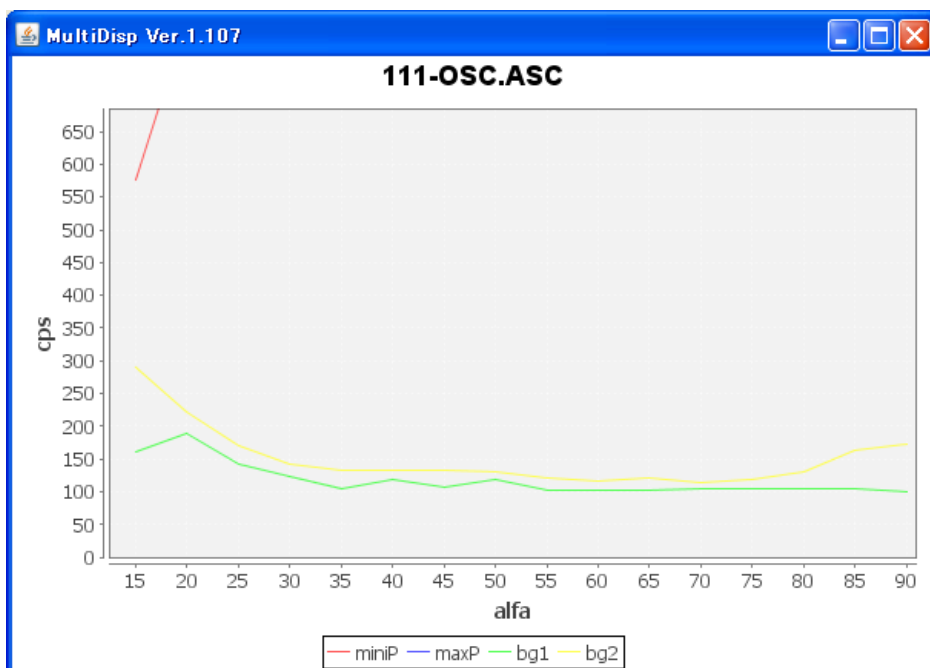


バックグラウンド削除方法の変更は `Set key`

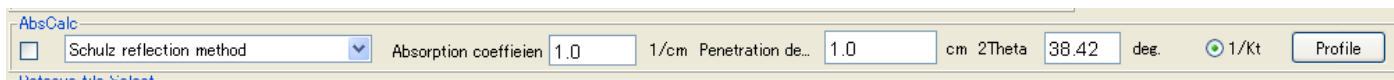
`DispKey` はバックグラウンド測定が正常に行われているか確認出来る。



マウスでバックグラウンド部分を拡大して確認する。



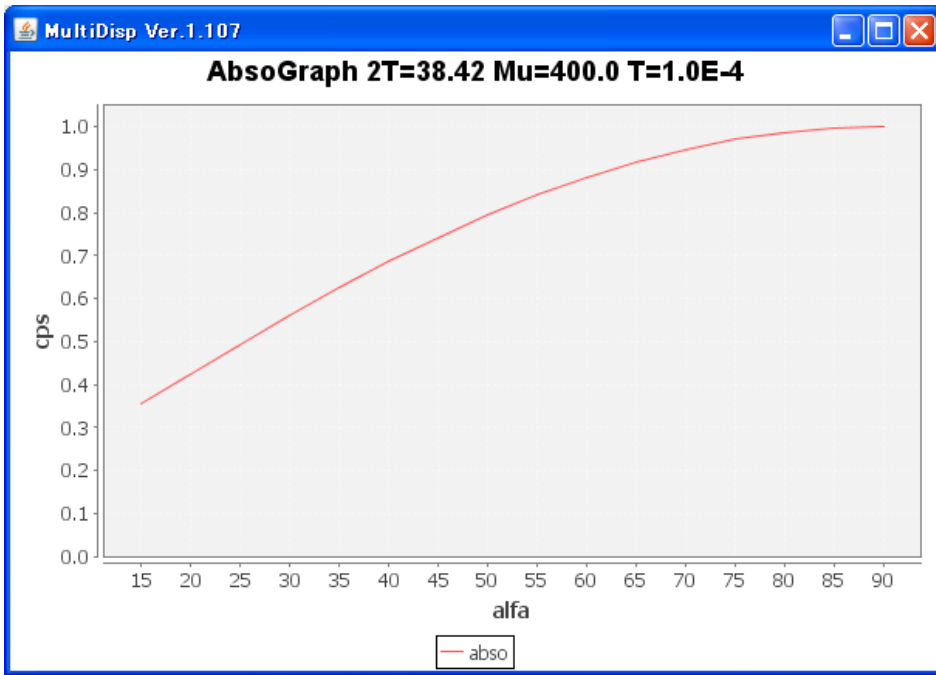
吸収補正



入力ファイルから自動的に測定方法が切り替わる。間違っている場合は修正してください。

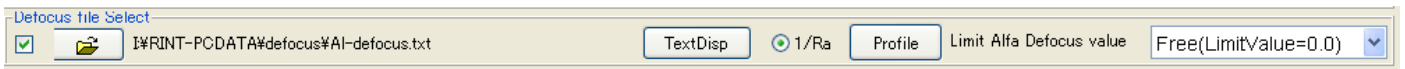
UTを入力し `Profile` で確認する。

例えば、`U=400, T=0.00001`

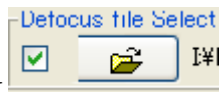



極点図に上記プロファイルで補正する。
 極点図の外側の強度を下げる様に働く

Defocus 補正

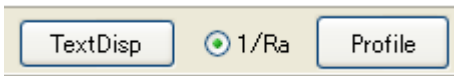


Defocus は反射法のみ対応です。

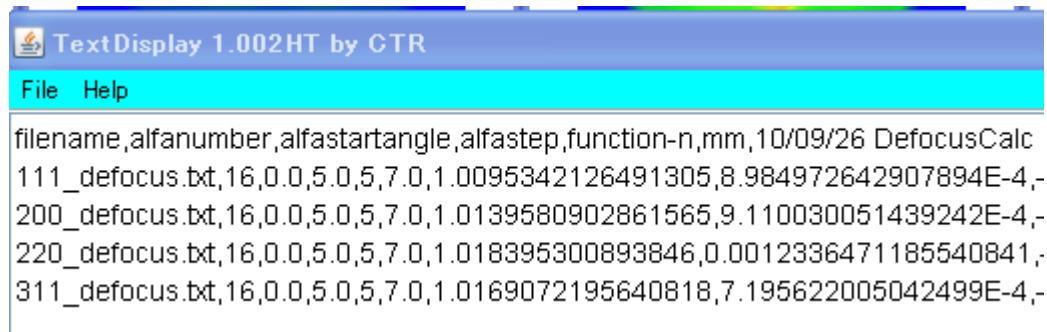


Defocus ファイルの指定は  I:\RINT-PCDATA\defocus\AI-defocus.txt で行う。

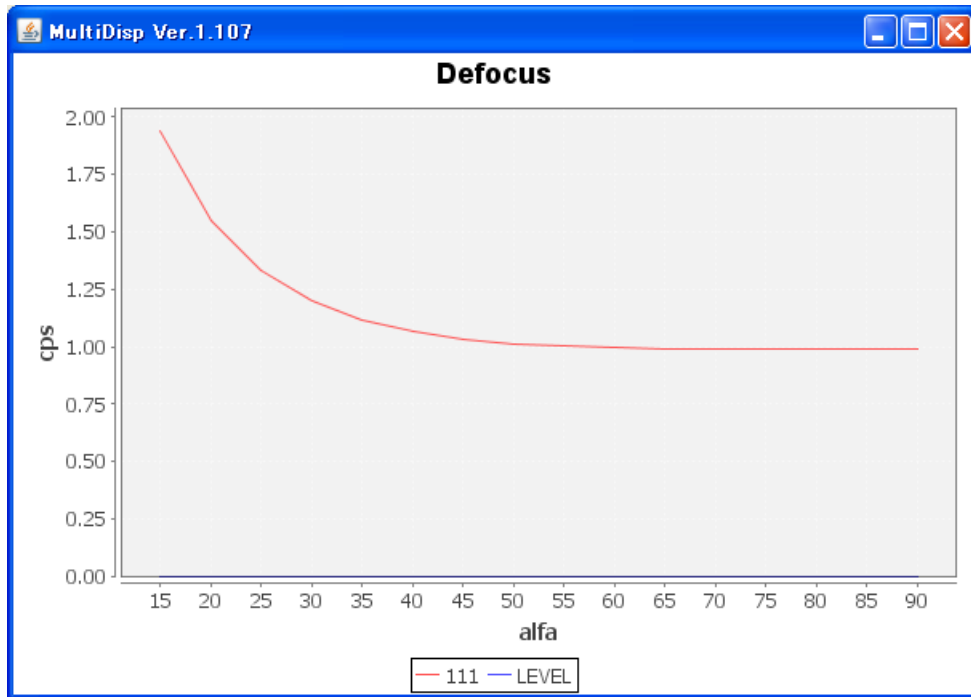
Defocus ファイルの作成は、MakeDefocusTABLE ソフトウェア



TextDisp でファイル内容が確認出来る。



Profile で補正曲線が確認出来る。



上のグラフは、極点図の外側強度を上げる補正が行われる。

Standardize CTR
 CenterData Average

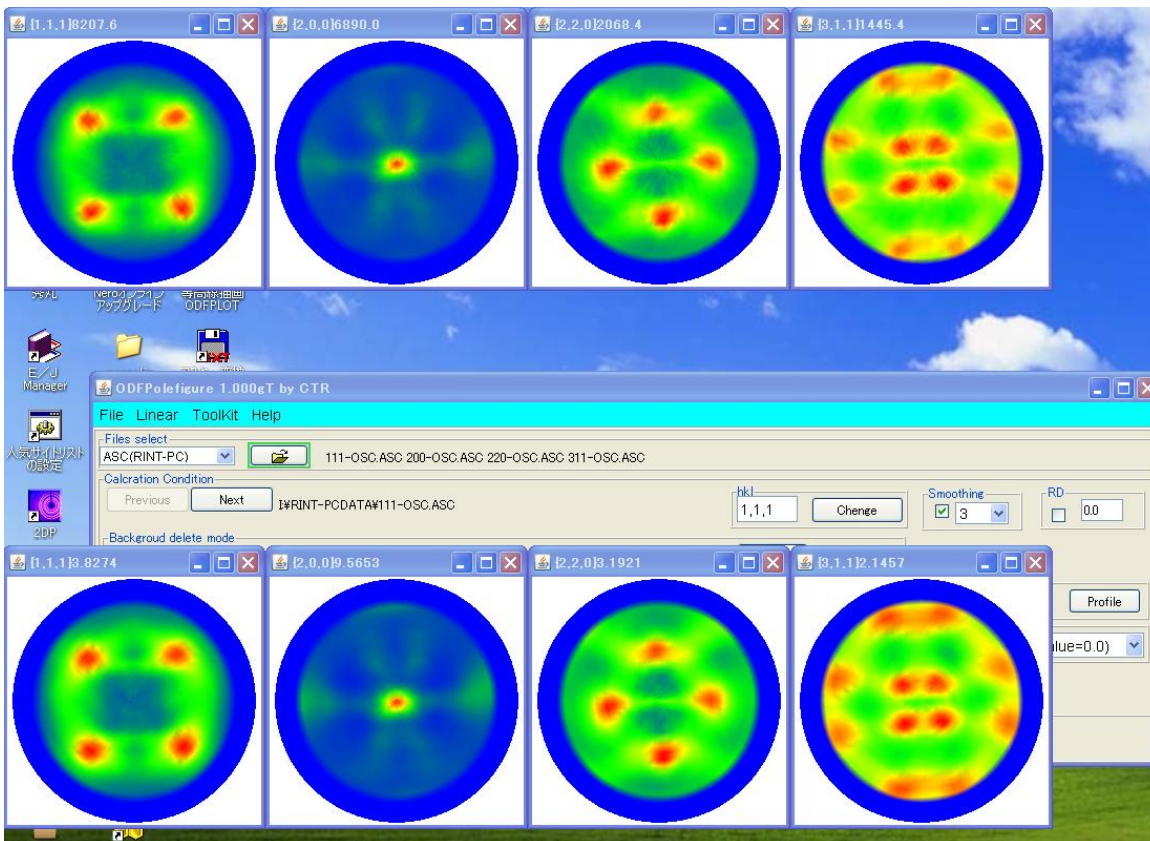
は処理極点図に対して平均強度が1.0に規格化が行われる。

又、極点図中心を平均化するか指定する。

Asc (Pole) は処理結果のAscファイル作成、TXT2はPF t ODF 3用ファイル作成

Calc ODF File Cancel

Calc Key で処理が行われる。



処理結果極点図が表示される。

ODF File

ODF用ファイル作成は で行う。

Calcを行っても、ODF File Keyが押せない状態は画面の下にエラー表示がされる。

ODF File Keyを押すと、ODF Pole Figure 関係の画面が消えて

PF to ODF 3 ソフトウェア画面が表示される。

PF to ODF 3 (Ver 7.0以降) は update 版であるため、許可されたユーザのみ使用が可能です。

(popLAは全てのユーザで使用可能)

SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens.))	h,k,l	2Theta	Alfa Area	AlfaS	AlfaE	Select
111-OSC_chMB0DS_2.TXT	1,1,1	38.42	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
200-OSC_chMB0DS_2.TXT	2,0,0	44.64	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
220-OSC_chMB0DS_2.TXT	2,2,0	65.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
311-OSC_chMB0DS_2.TXT	3,1,1	78.12	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
	2,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	3,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	4,0,0	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	3,3,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	4,2,2	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	5,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	4,4,0	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	5,3,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>

Ver 1.001以降はComment欄に入力ファイル名を表示

上記ファイル名111-OSC_chMB0DS_2.txtの意味は

S : 平滑化处理

B0 : バックグラウンド処理がB1, B2の平均値で行われた。

D : Defocus 補正が行われた。

S : 強度の規格化处理が行われた。

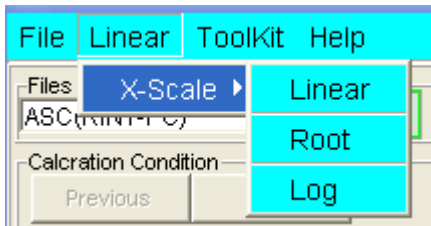
Dの後に数字がある場合、Limit Valueを表す。

SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens.))	h,k,l	2Theta	Alfa Area	AlfaS	AlfaE	Select
111-OSC_chMB0DL90S_2.txt	1,1,1	38.42	0.0->50.0	0.0	50.0	<input type="checkbox"/>
200-OSC_chMB0DL90S_2.txt	2,0,0	44.64	0.0->55.0	0.0	55.0	<input type="checkbox"/>
220-OSC_chMB0DL90S_2.txt	2,2,0	65.0	0.0->60.0	0.0	60.0	<input type="checkbox"/>
311-OSC_chMB0DL90S_2.txt	3,1,1	78.12	0.0->65.0	0.0	65.0	<input type="checkbox"/>
	2,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>

Limit Value 0.90で行った場合、Dの後に90があり極点図の範囲が狭くなっている。

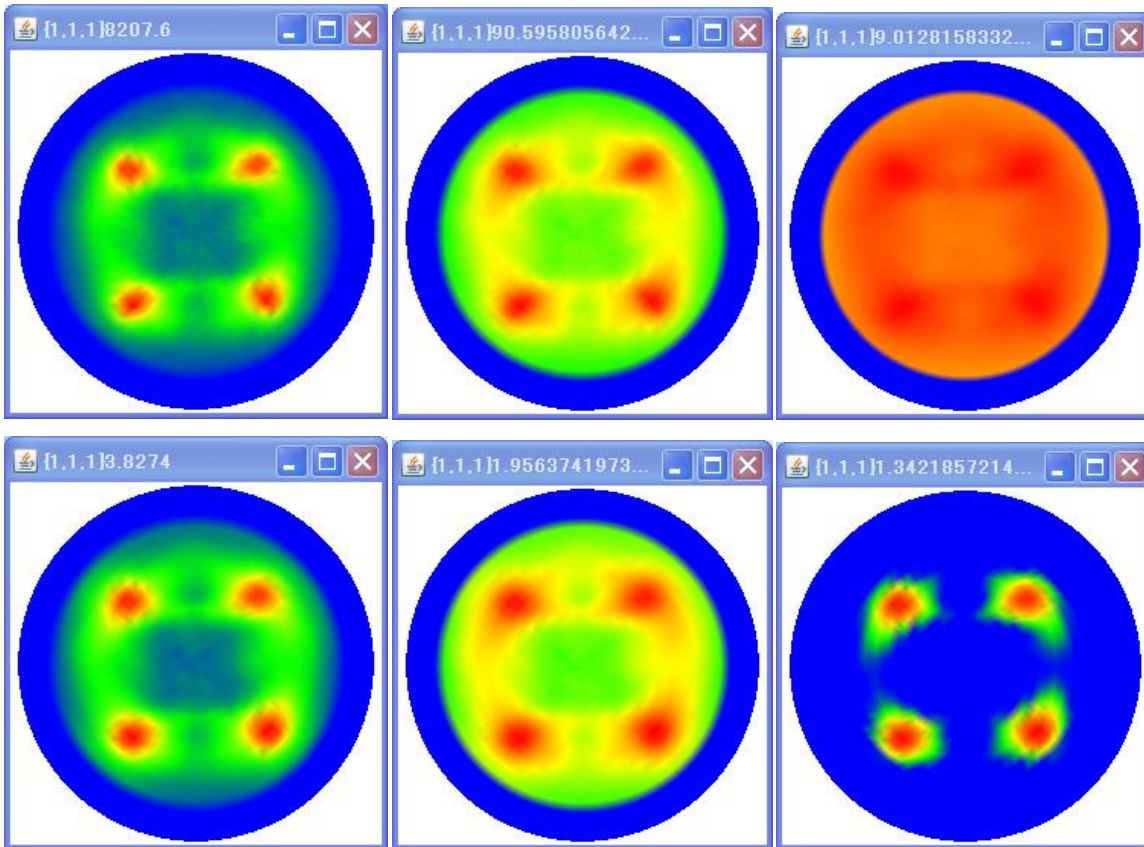
メニュー部分

File Linear Toolkit Help



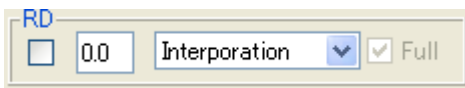
は極点図の極密度スケール（表示のみ）

左から、Linear、Root、Log、上下は、データ処理前と後

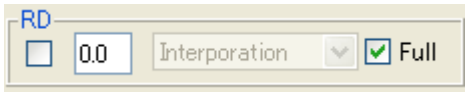


は他のソフトウェアの起動が可能になる。

1 / 4, 1 / 2 極点図の 3 6 0 度化



極点図が 3 6 0 度のデータではない場合、F U L L の指定が可能



R D 補正も可能であるが、R D 補正後、1 / 4 象限以上でなければならない

ソフトウェアの詳細は、H e l p e r T e x サイトの説明書を参考にして下さい。

Software では

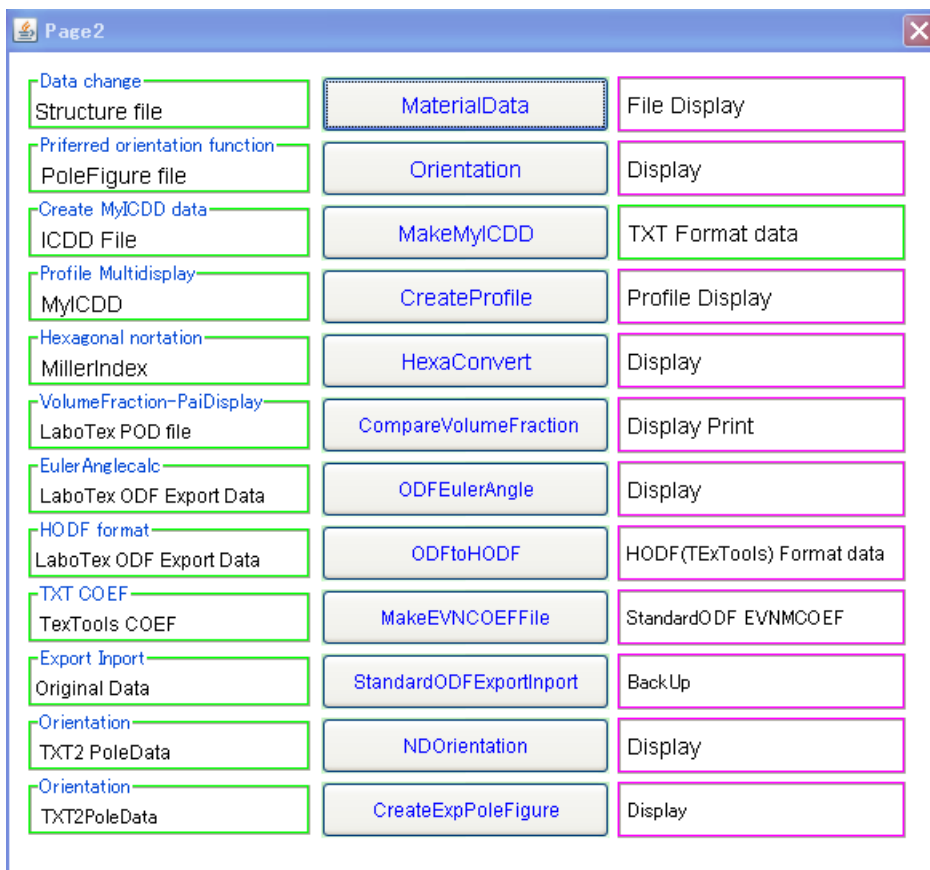


この機能は、p a c k a g e をインストールした場合に限定されます、H e l p e r t e x サイトから最新 p a c k a g e を要求し、インストールして下さい (i n d e x ファイルが必要になります)

Page

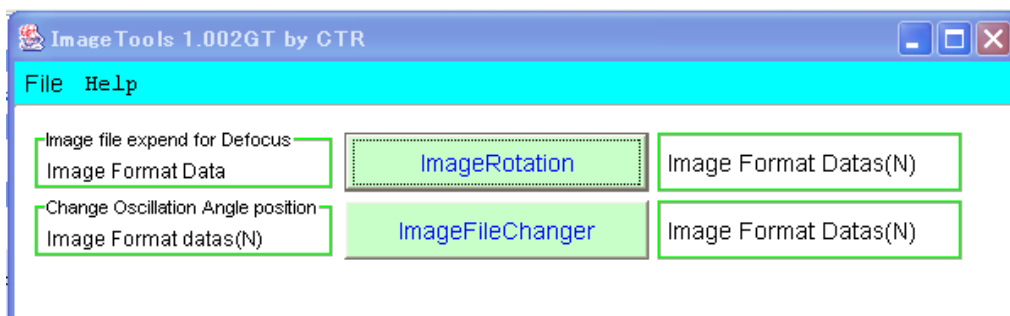
Next

から



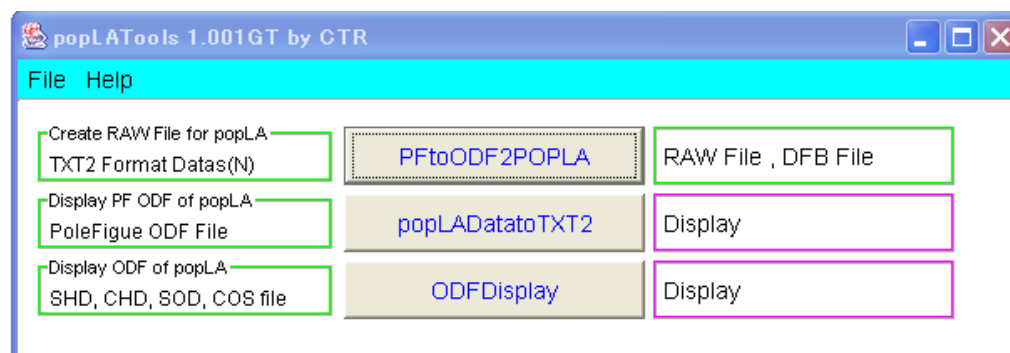
ImageTools

から



PopLATools

から



ファイルの遷移

入力ファイル

A S Cファイル

d e f o c u sファイル

出力ファイル

M u l t i D i s p用ファイル

入力ファイルディレクトリに作成

P F t o O D F 3用T X T 2 (***_2. T X T)

入力ファイルディレクトリに作成

S t a n d a r d O D F用T X T S (***_S. T X T)

入力ファイルディレクトリに作成

外部起動

本ソフトウェアは、以下の方法で直接A S Cファイルを入力出来ます。

```
java -jar c:\CTR\ODFPoleFigure.jar ascmode n file1 file2 filen
```

java -jar : j a rファイルの起動

c:\CTR\ODFPoleFigure.jar : 本プログラム

ascmode : 0: RINT-PC 1: RINT-HP 2: RAPID

n : A S Cファイルの数

file1以降 : 絶対パスのA S Cファイル