

CrystalOrientationDispによる極点図の描画

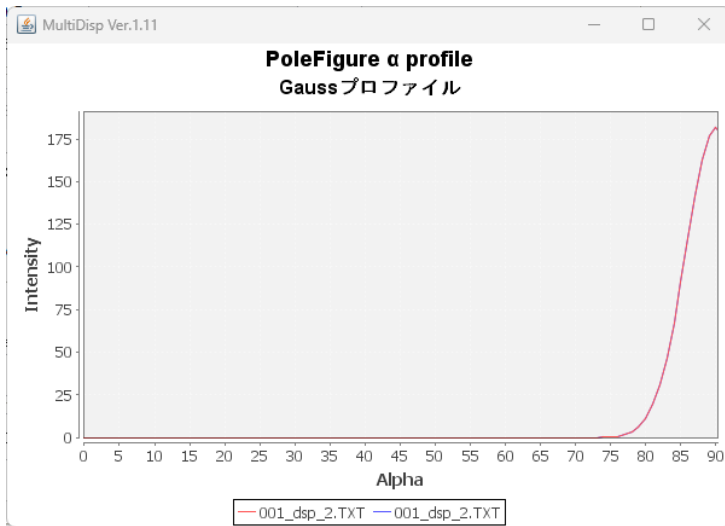
2025年03月25日

*HelperTex Office*

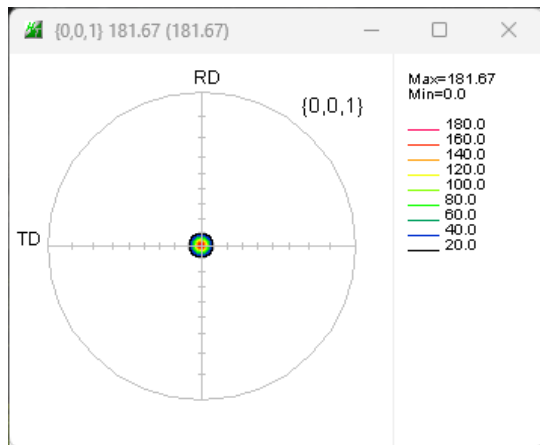
# 1. 概要

CrystalOrientationDispソフトウェアでは、Gauss, Lorentz関数によるプロファイルから極点図を表示しています。

関数は、FWHM、Gratio、Maxによってプロファイル ( $\alpha$ 軸0  $\rightarrow$  90) が作成される。このプロファイルは極点図の中心 ( $\alpha = 90$ ) から極点図の外周 ( $\alpha = 0$ ) までのプロファイル



極点図の中心 (ND 方向) を回転して極点図を作成

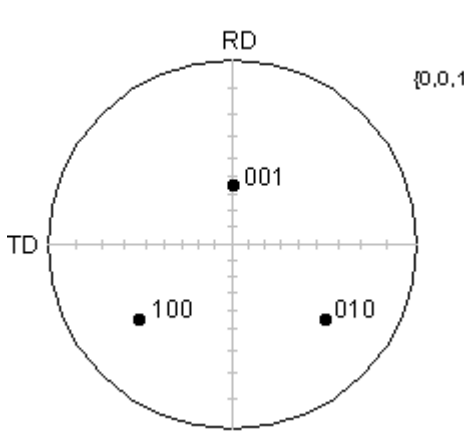


極点図の中心に極がある。

次に表示する極点図の ( $\alpha$ 、 $\beta$ ) 角度を計算する。

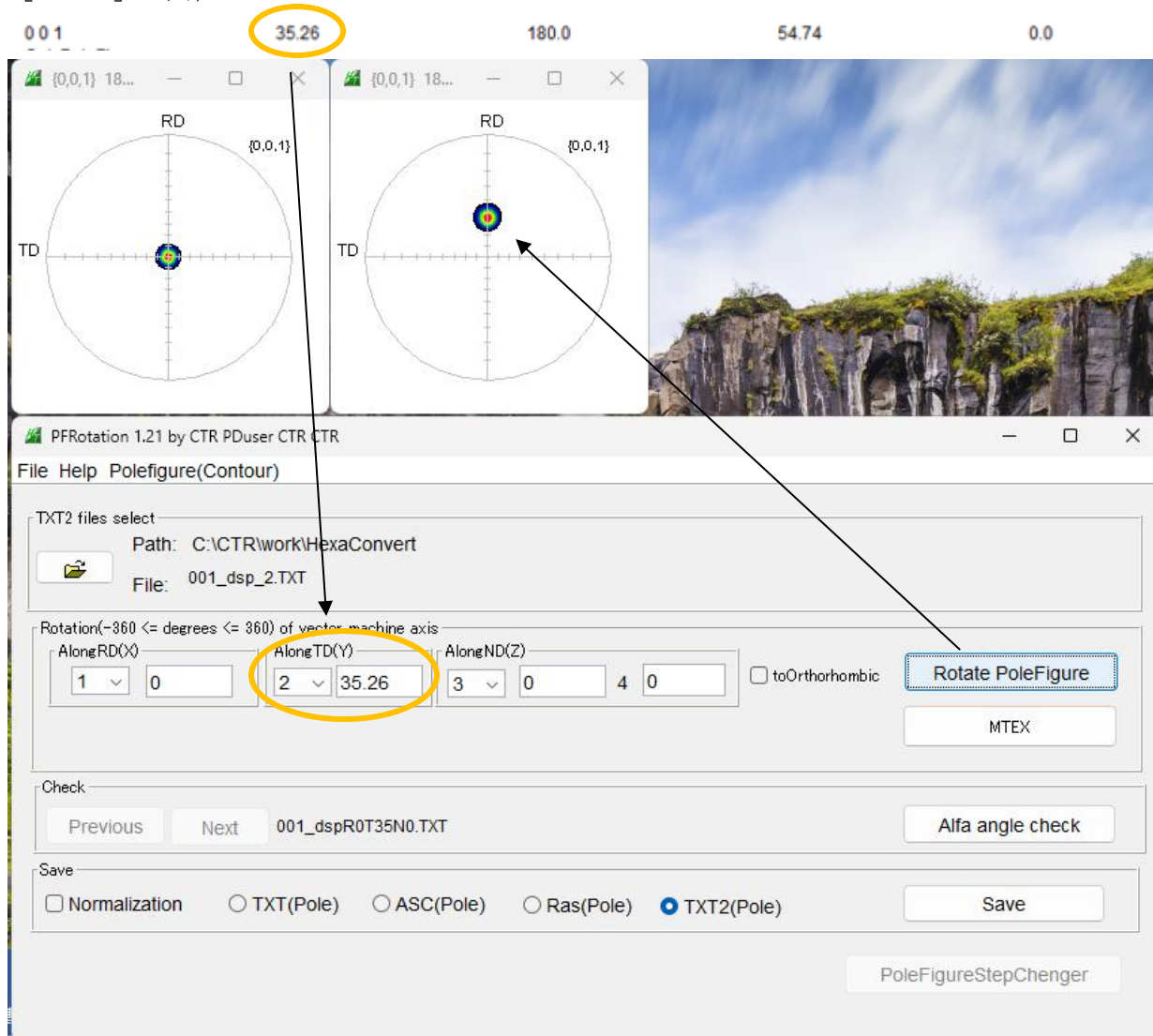
例えば、copper方位の {001} であれば (CrystalOrientationD ソフトウェア)

Direction	Alpha	Beta	Center=90	
100	65.91	-50.77	24.09	129.232
010	65.91	50.77	24.09	230.768
001	35.26	180.0	54.74	0.0

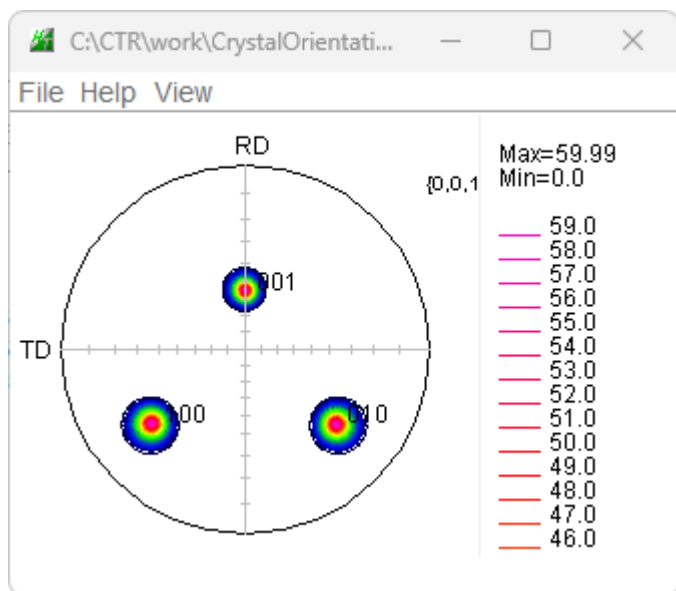


極点図の中心の極がある極点図を計算した角度に軸回転する。

[0 0 1] の回転

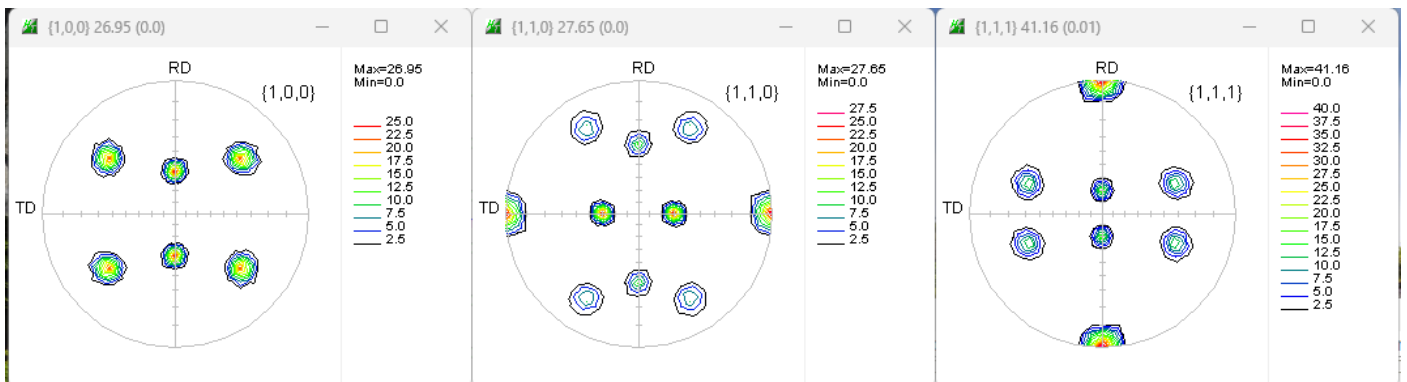
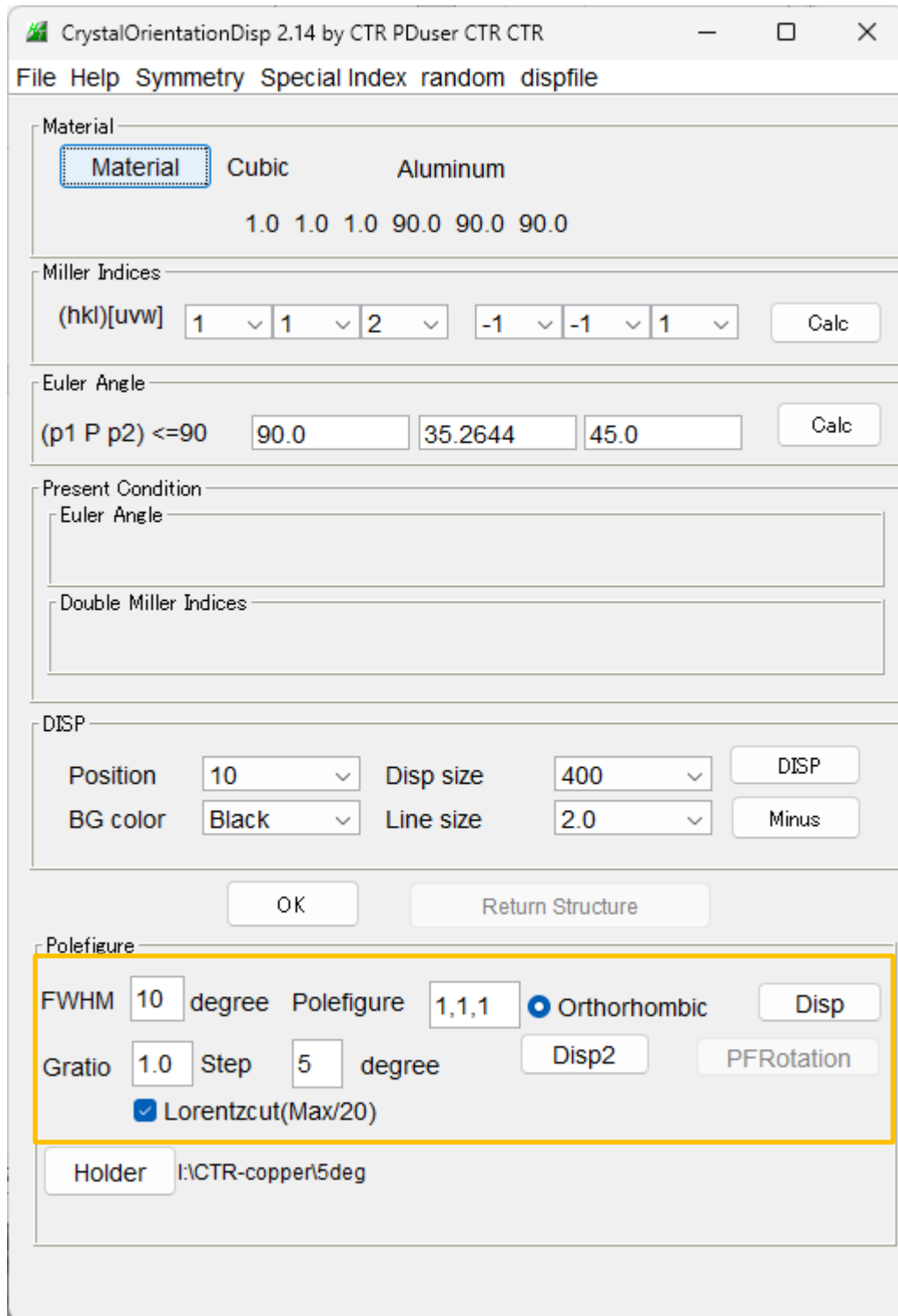


計算した複数の極点図を加算すれば、全体の極点図が表示できます。



加算した極点図の normalize (重み付き平均値で規格化) を行い表示

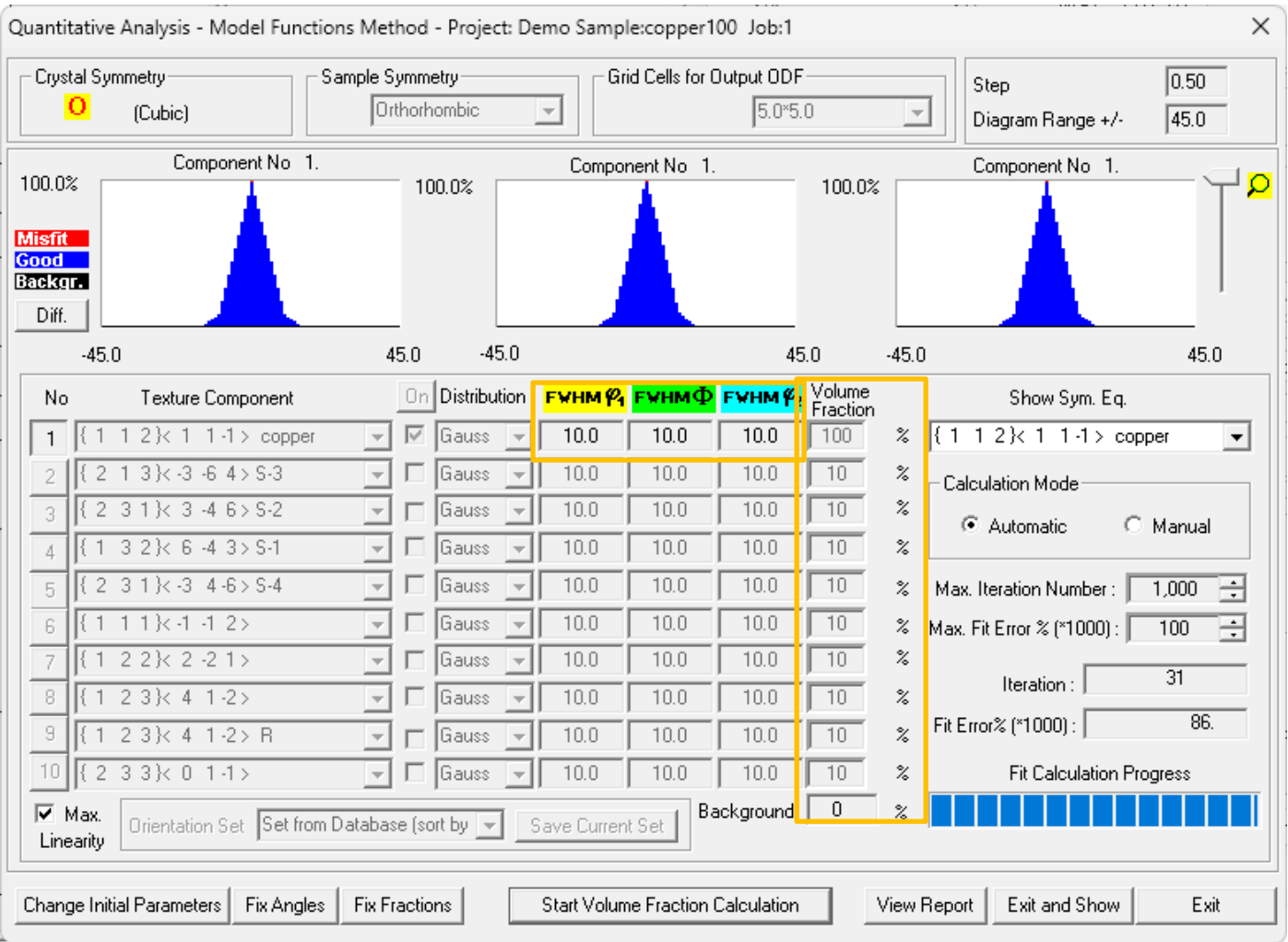
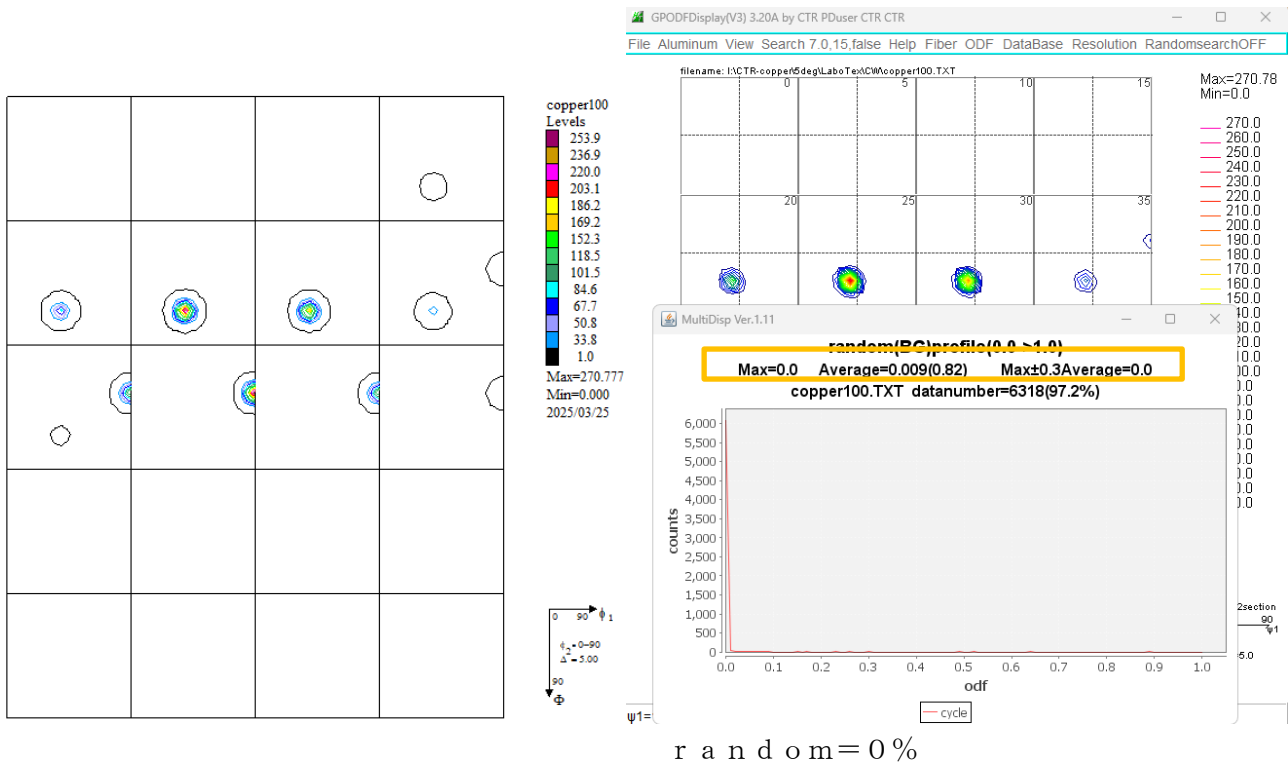
## 2. Copper 方位の作成



### 3. 極点図から体積分率 (VolumeFraction) の計算

#### 3. 1 LaboTex

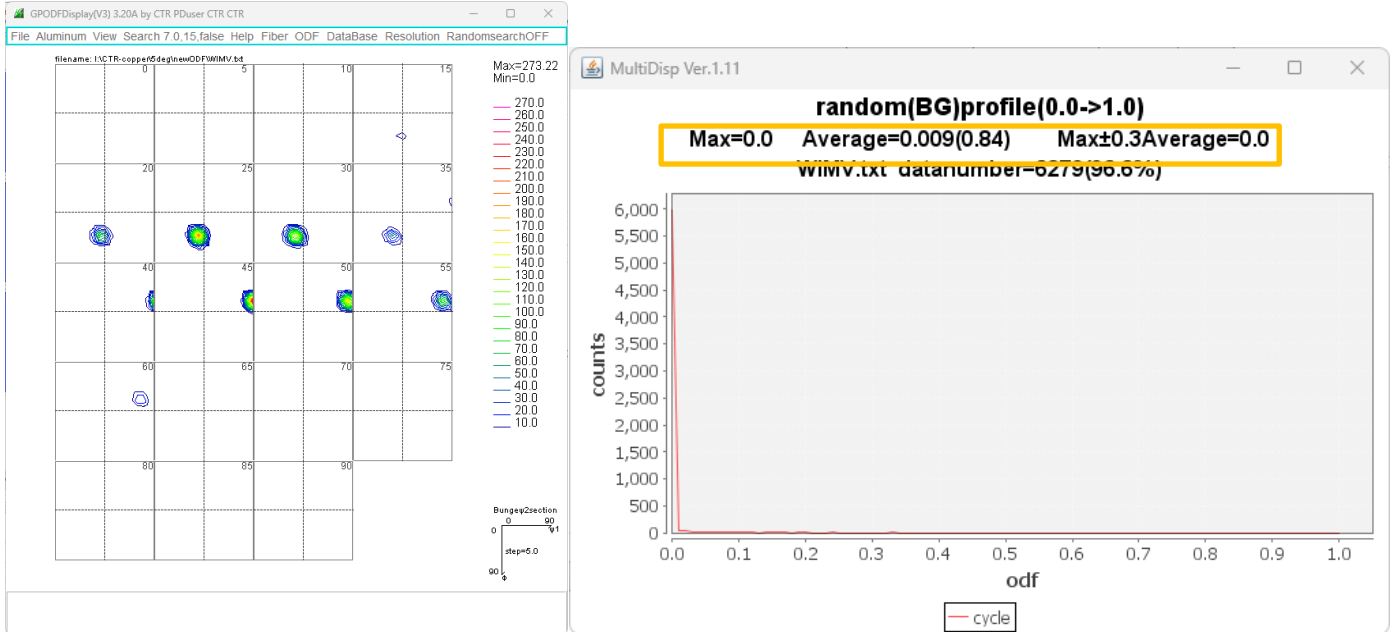
#### ODF 図を Export し、GPODFDisplay で random 計算



Copper=100%、random=0%が計算される。

### 3. 2 newODF

#### WIMV 結果を Export



random = 0%

#### コンポーネント解析結果

##### パラメーター

結晶相:  ODFをシミュレート

最小化アルゴリズム:

母集団:  個体数:  ターゲット $\chi^2$ :

重み:  クロスオーバー:

RP因子=10.46 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 の 分率  最小:  最大:  フィッティング:

体積分率 (%):

コンポーネント

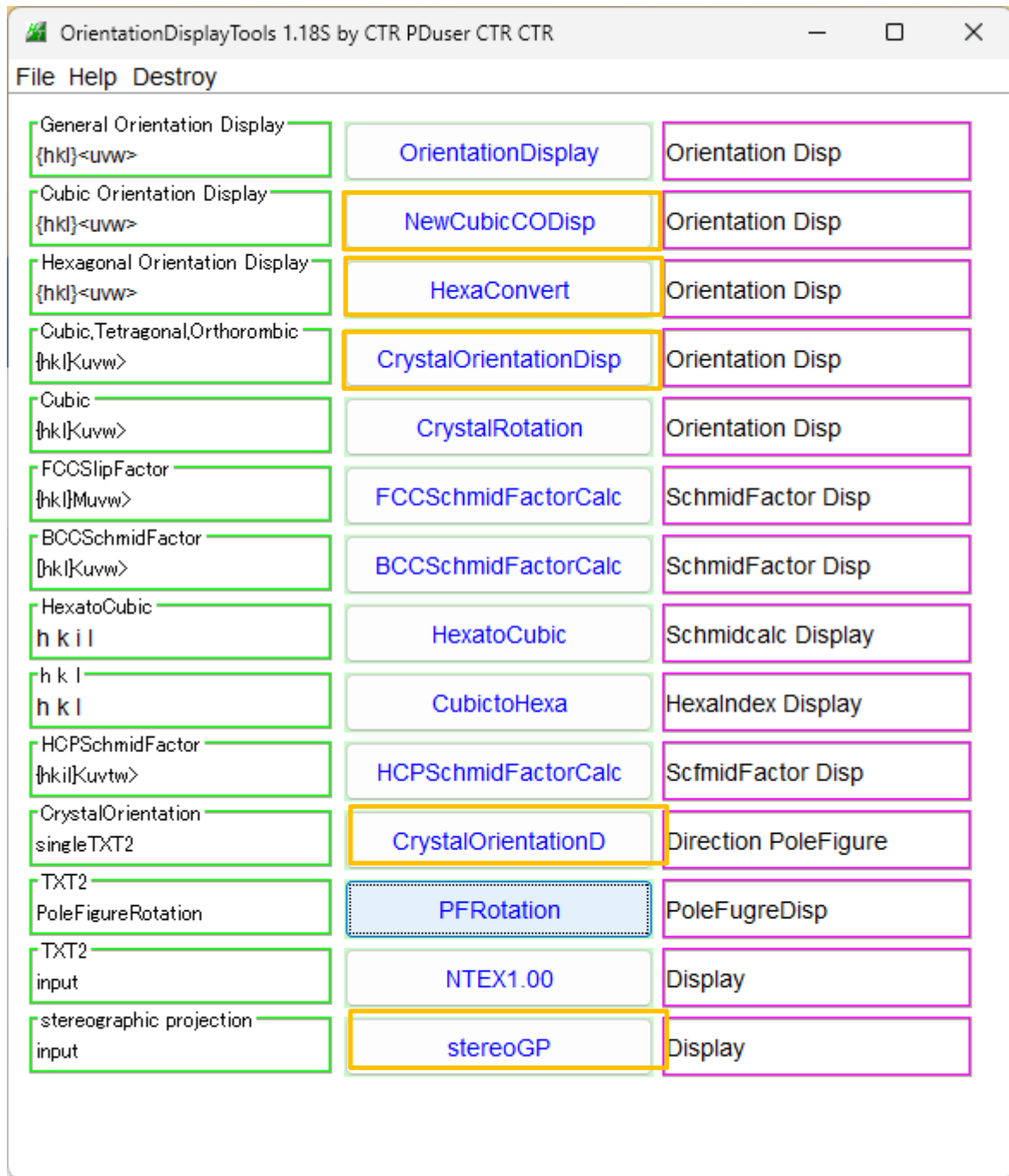
N	タイプ	名称	色	極点図に 表示	方位	体積分率(%)
1	ピーク	Copper	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	(1 2 1)[1 -1 1]	100.00

##### 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 (°)	10.64	1.00	40.00	<input checked="" type="checkbox"/>
$\varphi_1$ (°)	39.23	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>
$\Phi$ (°)	65.91	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>
$\varphi_2$ (°)	26.56	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>

Copper = 100% random = 0% が計算される。

この表示方法は

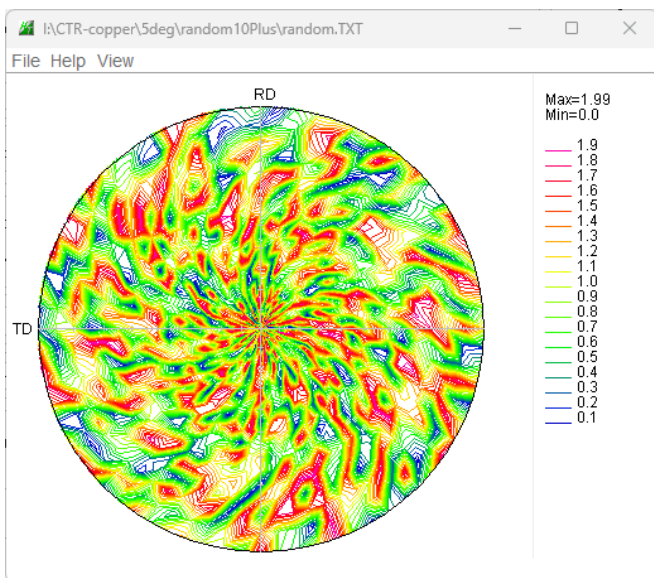


で行われています。

#### 4. LabotexとnerwODFの解析の違い

0 → 1をrandomで発生し極点図作成し、規格化を行うと0 → 2の値の極点図が生成する。

0.0	0.0	0.7387162232803028↓
0.0	5.0	0.5037179675542255↓
0.0	10.0	0.4068678825888705↓
0.0	15.0	1.6080851597467256↓
0.0	20.0	1.6360479855835366↓
0.0	25.0	1.7855854223020864↓
0.0	30.0	0.2625346616019688↓
0.0	35.0	0.5227492924112717↓
0.0	40.0	0.5664369785449792↓
0.0	45.0	1.2445920184581556↓
0.0	50.0	1.8560281956126679↓
0.0	55.0	0.3441387940721023↓
0.0	60.0	1.8211708813064582↓
0.0	65.0	1.4974435467647198↓
0.0	70.0	1.9240413138954127↓
0.0	75.0	0.15270938706335752↓
0.0	80.0	1.213093854681053↓
0.0	85.0	0.1170663090460005↓
0.0	90.0	0.25183655460520554↓



この極点図をcopper極点図に加算し、VolumeFraction計算を行う。

NO2Datapercent (NO1+NO2\*P/100)  %

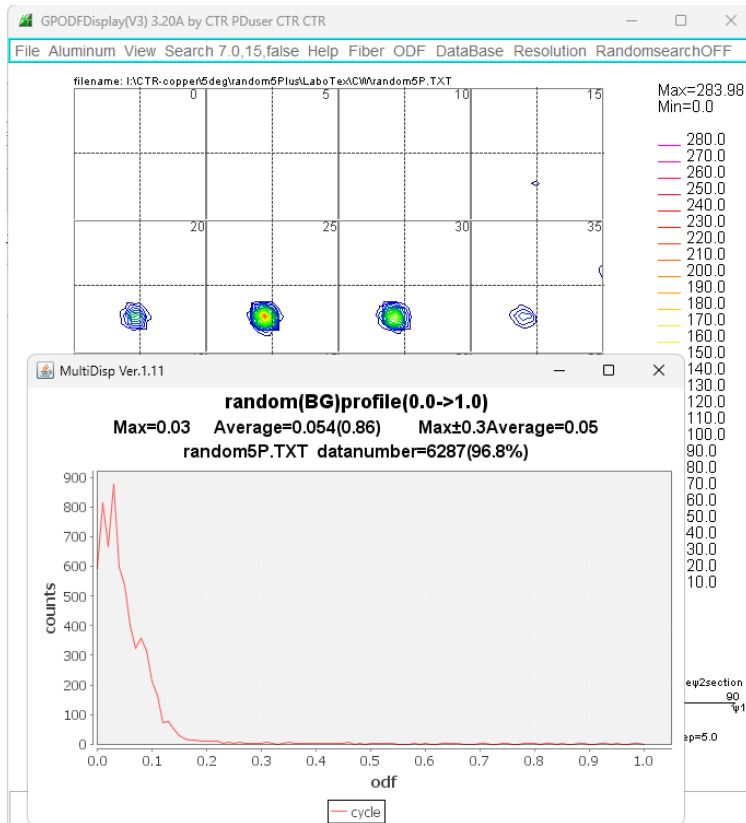
(NO1\*(100-P)+NO2\*P)/100

copper = 95% random = 5%

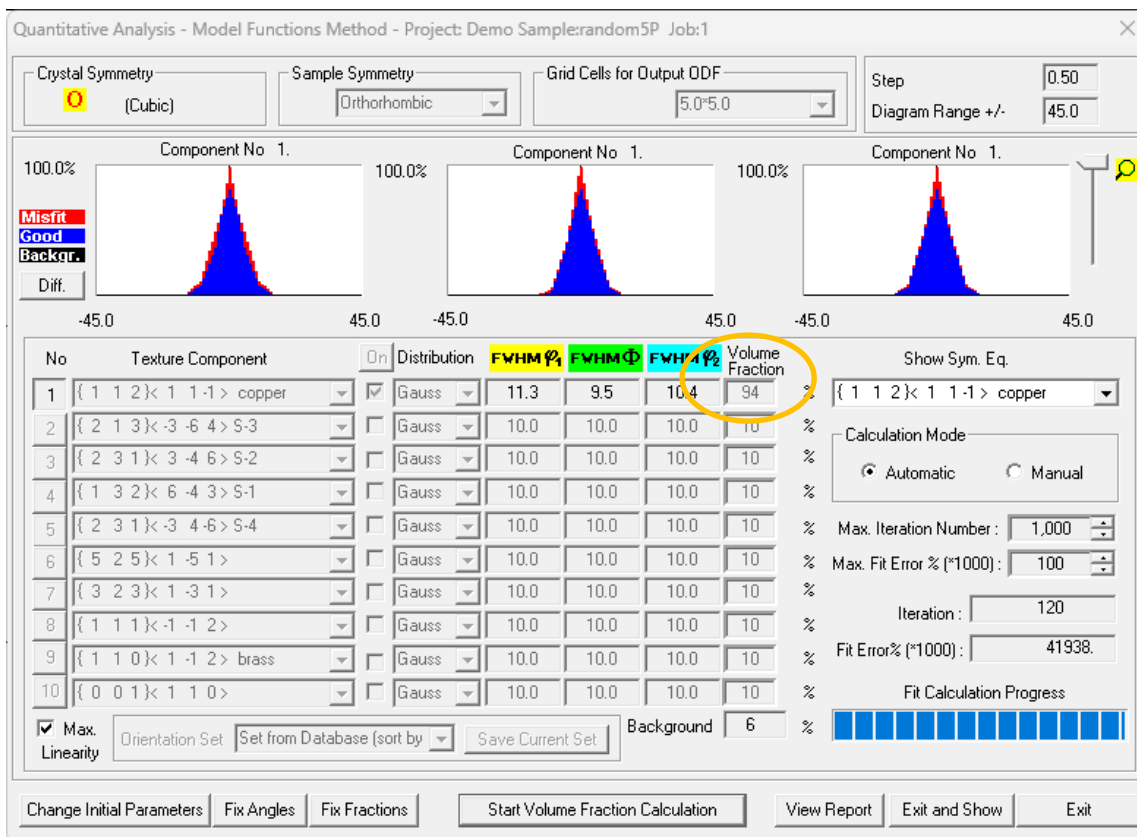


#### 4. 1 r a n d o m極点図5%を加算

LaboTeX



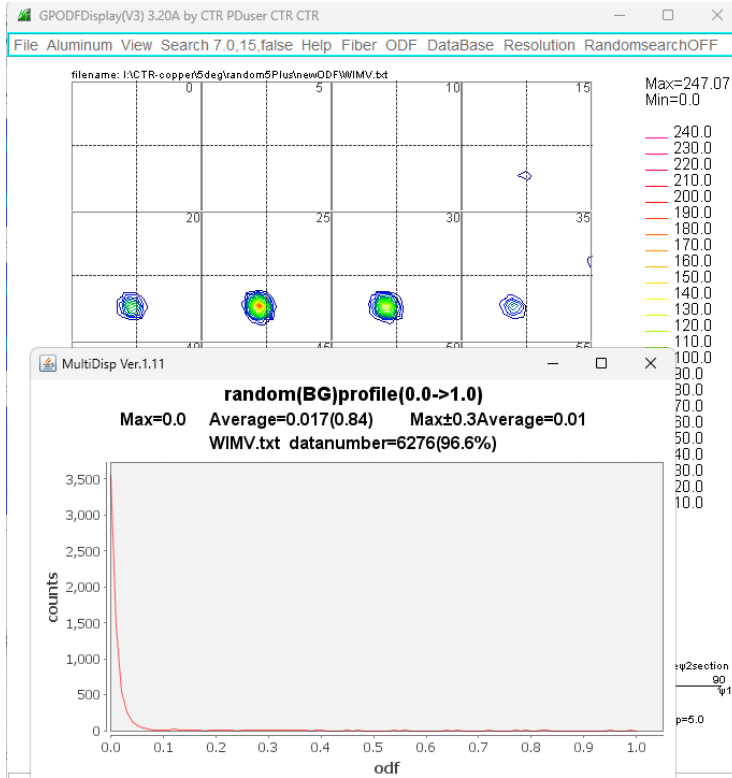
ODF 解析結果では、r a n d o mが3%から5%の可能性を示す。



V o l u m e F r a c t i o n 計算では体積分率94% r a n d o m6%が計算される。

n e w O D F

W I M V 結果



W I M V 解析結果では r a n d o m は 0 % から 1 % の可能性を示す。  
コンポーネント解析結果

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 $\chi^2$ : 0.1

重み: 50.00 クロスオーバー: 50.00

RP因子=10.17 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 0.00 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

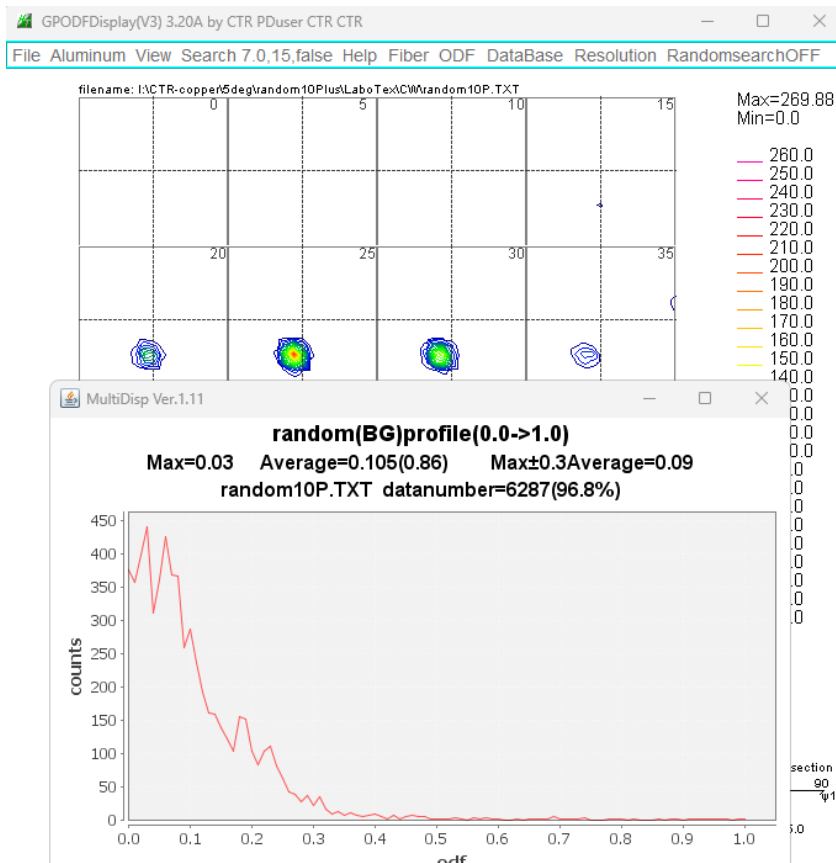
N	タイプ	名称	色	極点図上に表示	方位	体積分率(%)
1	.	Copper	■	<input checked="" type="checkbox"/>	( 1 2 1 ) [ 1 -1 1 ]	100.00

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 (°)	10.75	1.00	40.00	<input checked="" type="checkbox"/>
$\varphi_1$ (°)	39.23	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>
$\Phi$ (°)	65.91	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>
$\varphi_2$ (°)	26.56	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>

体積分率 100%、r a n d o m は 0 % と計算される。

#### 4. 2 r a n d o m極点図10%加算



ODF 解析結果では、r a n d o mが3%から9%の可能性を示す。

Quantitative Analysis - Model Functions Method - Project: Demo Samplerandom10P Job:1

Crystal Symmetry: (Cubic)    Sample Symmetry: Orthorhombic    Grid Cells for Output ODF: 5.0\*5.0    Step: 0.50    Diagram Range +/-: 45.0

Component No. 1.    Component No. 1.    Component No. 1.

No	Texture Component	On	Distribution	FWHM %	FWHM Φ	FWHM #2	Volume Fraction
1	{ 1 1 2 } < 1 1 - 1 > copper	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	11.3	9.5	10.9	89 %
2	{ 1 3 2 } < 6 - 4 3 > S-1	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
3	{ 2 3 1 } < 3 - 4 6 > S-2	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
4	{ 2 1 3 } < - 3 - 6 4 > S-3	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
5	{ 2 3 1 } < - 3 - 4 6 > S-4	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
6	{ 3 2 3 } < 1 - 3 1 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
7	{ 1 1 0 } < 1 - 1 2 > brass	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
8	{ 0 0 1 } < 1 1 0 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
9	{ 1 1 0 } < 1 - 1 1 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
10	{ 1 0 1 } < 5 2 - 5 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %

Background: 11 %

Max. Linearity:     Orientation Set: Set from Database (sort by)    Save Current Set

Show Sym. Eq: { 1 1 2 } < 1 1 - 1 > copper

Calculation Mode:  Automatic     Manual

Max. Iteration Number: 1,000    Max. Fit Error % (\*1000): 100

Iteration: 103    Fit Error% (\*1000): 43097.

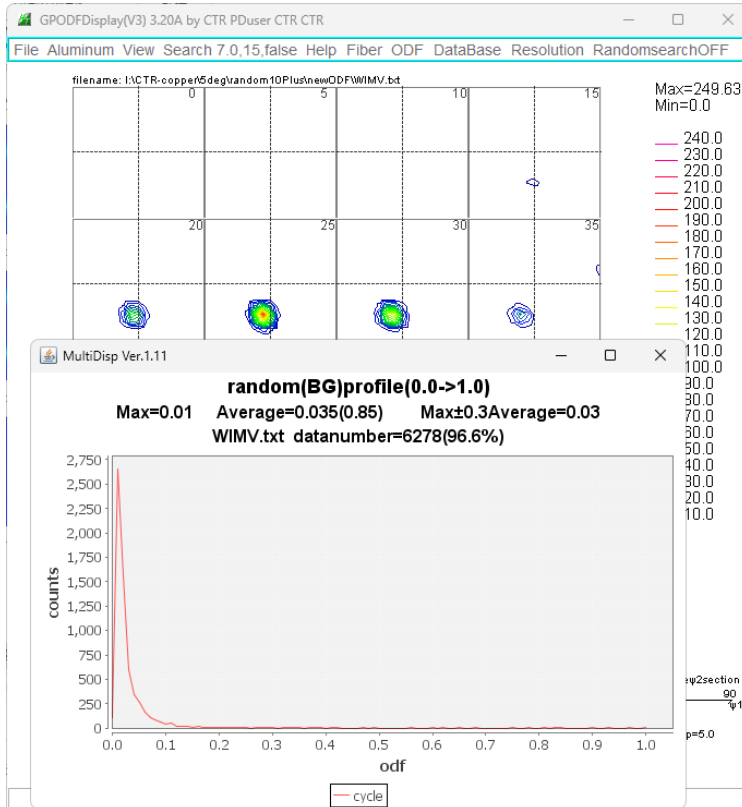
Fit Calculation Progress: [Progress Bar]

Change Initial Parameters    Fix Angles    Fix Fractions    Start Volume Fraction Calculation    View Report    Exit and Show    Exit

V o l u m e F r a c t i o n 計算では体積分率89% r a n d o m 11%が計算される。

n e w O D F

W I M V 結果



W I M V 解析結果では、r a n d o m が 1 % から 3 % の可能性を示す。  
コンポーネント

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 $\chi^2$ : 0.1

重み: 50.00 クロスオーバー: 50.00

RP因子=10.30 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 の 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	.	Copper	■	<input checked="" type="checkbox"/>	( 1 2 1 ) [ 1 -1 1 ]	100.00

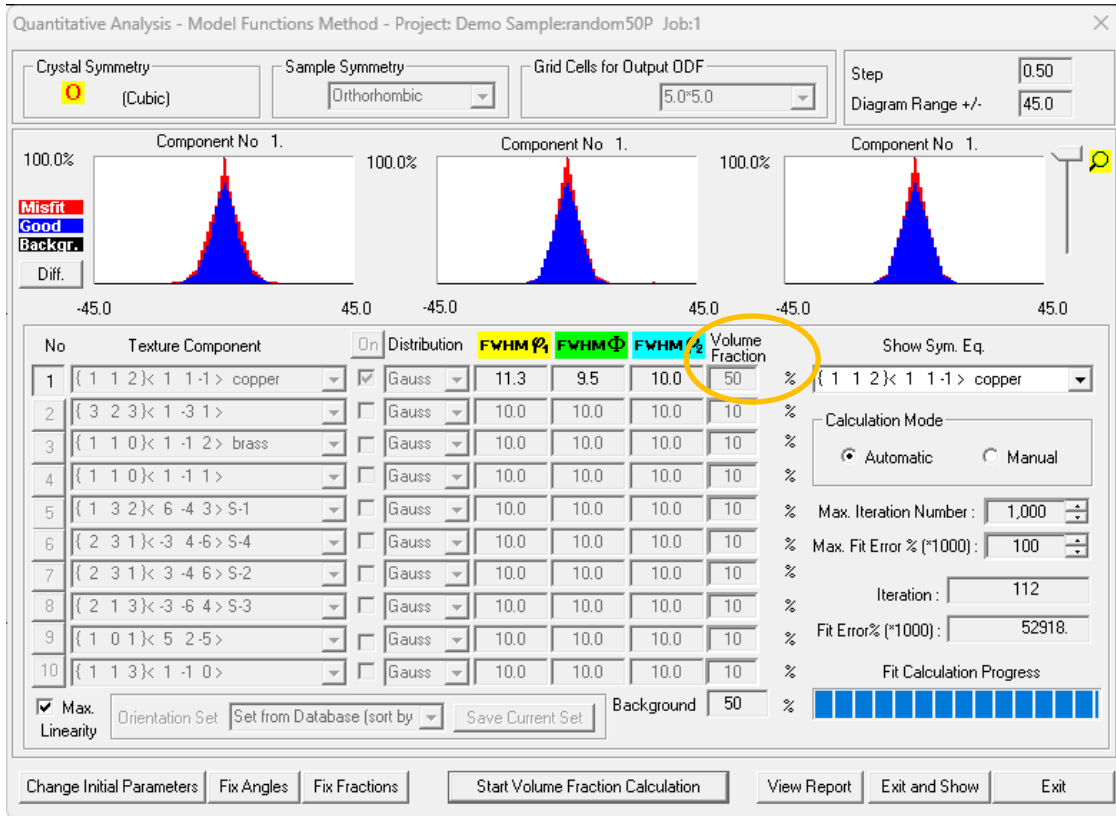
コンポーネントプロパティ

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 (°)	10.91	1.00	40.00	<input checked="" type="checkbox"/>
$\varphi_1$ (°)	39.23	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>
$\Phi$ (°)	65.91	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>
$\varphi_2$ (°)	26.56	0.00	90.00	<input type="checkbox"/>

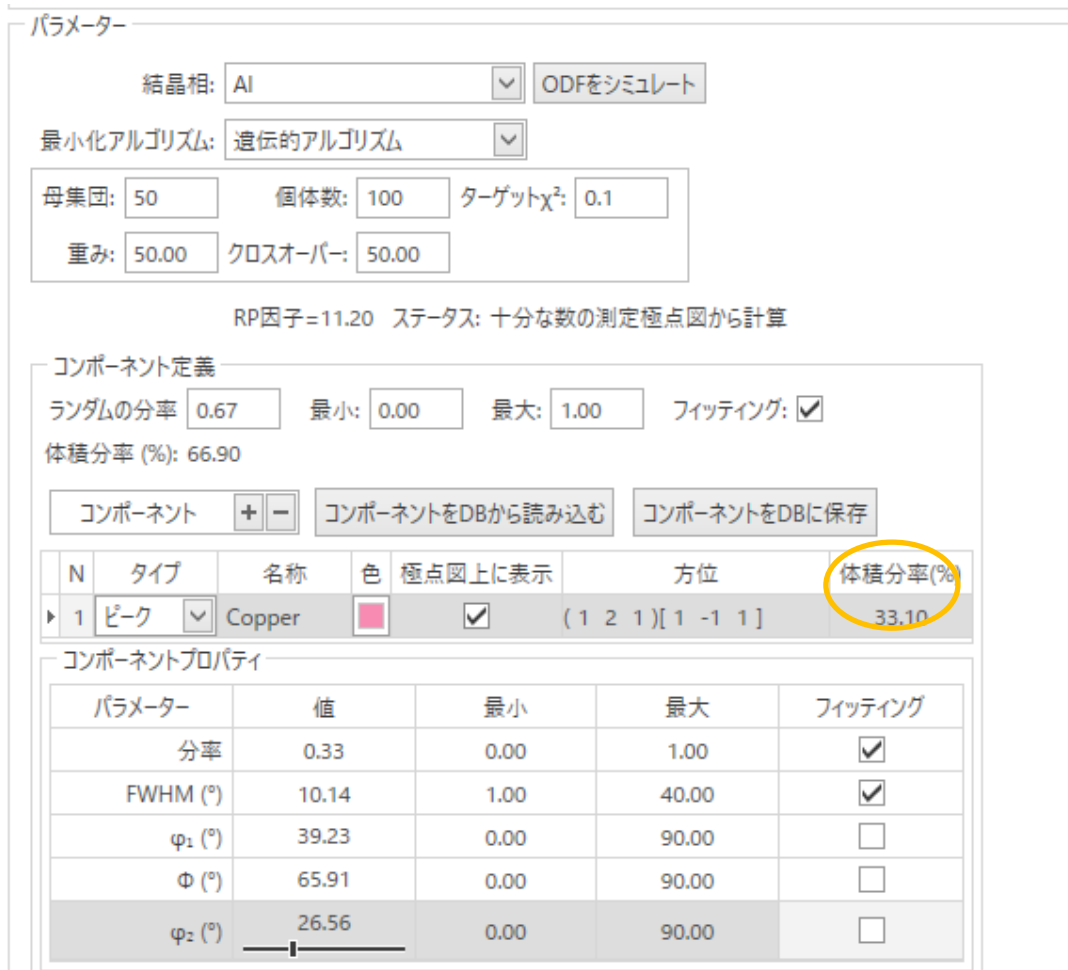
体積分率 1 0 0 %、r a n d o m は 0 % と計算される。

### 4. 3 極端な50%の場合

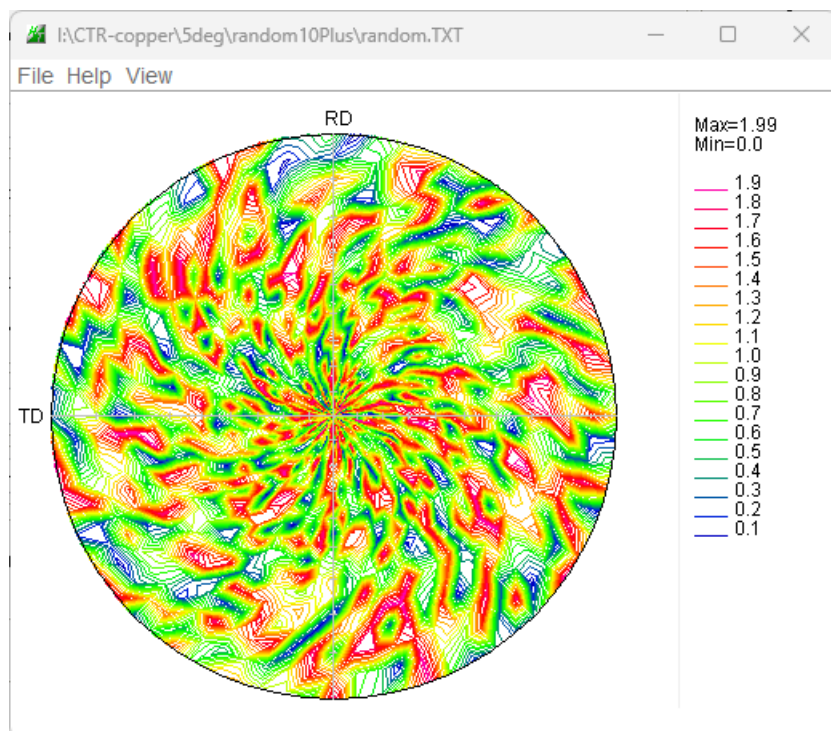
#### Labotex



#### newODF



#### 4. 4 L a b o T e x と n e w O D F の 違 い の ま と め r a n d o m で 生 成 し た 極 点 図



L a b o T e x では r a n d o m で 生 成 し た 極 点 図 を バ ッ ク グ ラ ン ド と し て 分 離 し て い る が  
n e w O D F では c o p p e r 曲 線 に 上 乗 せ ( 分 散 ) と し て 計 算 し て い る。

し かし、50%ではL a b o T e x は 分 離 す る が n e w O D F の 分 散 では 解 析 で き て い な い。

以 下 に T e x T o o l s で 同 様 な 解 析 を 行 っ た が、結 果 は L a b o T e x と 同 様 に 分 離 さ れ て い る。

た だ し、F l a t な r a n d o m の 場 合、解 析 結 果 は 全 て の O D F で 同 一 な 結 果 と な り ま す。

#### 4. 5 他のODF

Volume Fraction可能なODFとしてTexToolsで解析  
random極点図5%の加算

The dialog box is titled "Orientation Volume Fraction". It has two main sections: "Ideal Orientations" (selected) and "Fibers".

- Ideal Orientations:**
  - Dropdown: Copper component
  - $\phi 1$ : 90,  $\Phi$ : 35.26,  $\phi 2$ : 45
  - Tolerance (degree): 15
  - With sample symmetrical orientations (4 fold)
- Fibers:**
  - Dropdown: gama fiber (phi = 55, phi2 = 45)
  - h: 1, k: 1, l: 1
  - Tolerance (degree): 15

ODF File Name: I:\CTR-copper#5deg#random5Plus#TexTools#copper5.HODF

Result: Copper=94.21%

Buttons: Calculate, Cancel

random極点図10%の加算

The dialog box is titled "Orientation Volume Fraction". It has two main sections: "Ideal Orientations" (selected) and "Fibers".

- Ideal Orientations:**
  - Dropdown: Copper component
  - $\phi 1$ : 90,  $\Phi$ : 35.26,  $\phi 2$ : 45
  - Tolerance (degree): 15
  - With sample symmetrical orientations (4 fold)
- Fibers:**
  - Dropdown: gama fiber (phi = 55, phi2 = 45)
  - h: 1, k: 1, l: 1
  - Tolerance (degree): 15

ODF File Name: I:\CTR-copper#5deg#random10Plus#TexTools#copper10.HODF

Result: Copper=89.44%

Buttons: Calculate, Cancel

random極点図50%の加算

The dialog box is titled "Orientation Volume Fraction". It has two main sections: "Ideal Orientations" (selected) and "Fibers".

- Ideal Orientations:**
  - Dropdown: Copper component
  - $\phi 1$ : 90,  $\Phi$ : 35.26,  $\phi 2$ : 45
  - Tolerance (degree): 15
  - With sample symmetrical orientations (4 fold)
- Fibers:**
  - Dropdown: gama fiber (phi = 55, phi2 = 45)
  - h: 1, k: 1, l: 1
  - Tolerance (degree): 15

ODF File Name: I:\CTR-copper#5deg#random50P#TexTools#copper50.HODF

Result: Copper=51.68%

Buttons: Calculate, Cancel