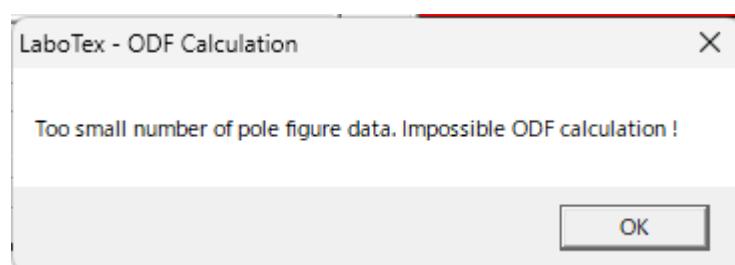


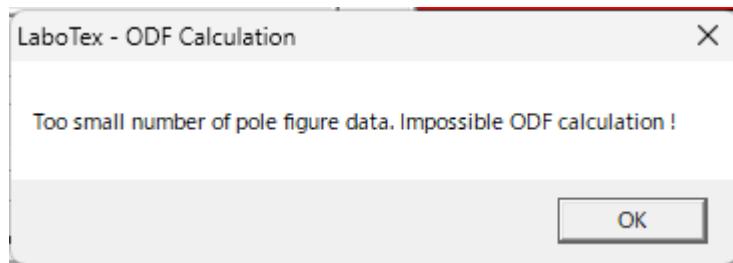
L a b o T e x 解析エラー対策



2025年12月06日
Helper Tex Office

概要

La b o T e x で O D F 解析時



が発生する事があります。

原因是、入力データにおいて、解析に必要なデータ点数が少ない場合発生します。

入力データは、0. 0 0 0 0 0 1以下は0. 0 0 0 0 0 0としているため、入力データに0. 0 0 0 0 0 1以下データが多い場合、上位エラーが発生しています。

0. 0 0 0 0 0 1以下は0. 0 0 0 0 0 1とする対策を行いました。

通常の極点測定ではこの現象は発生しません。

本来、極点図の最小値はrandomレベルであり、統計変動の影響で0. 0辺りをバラツクため、0. 0の値は少なくなり、上記現象は発生しません。

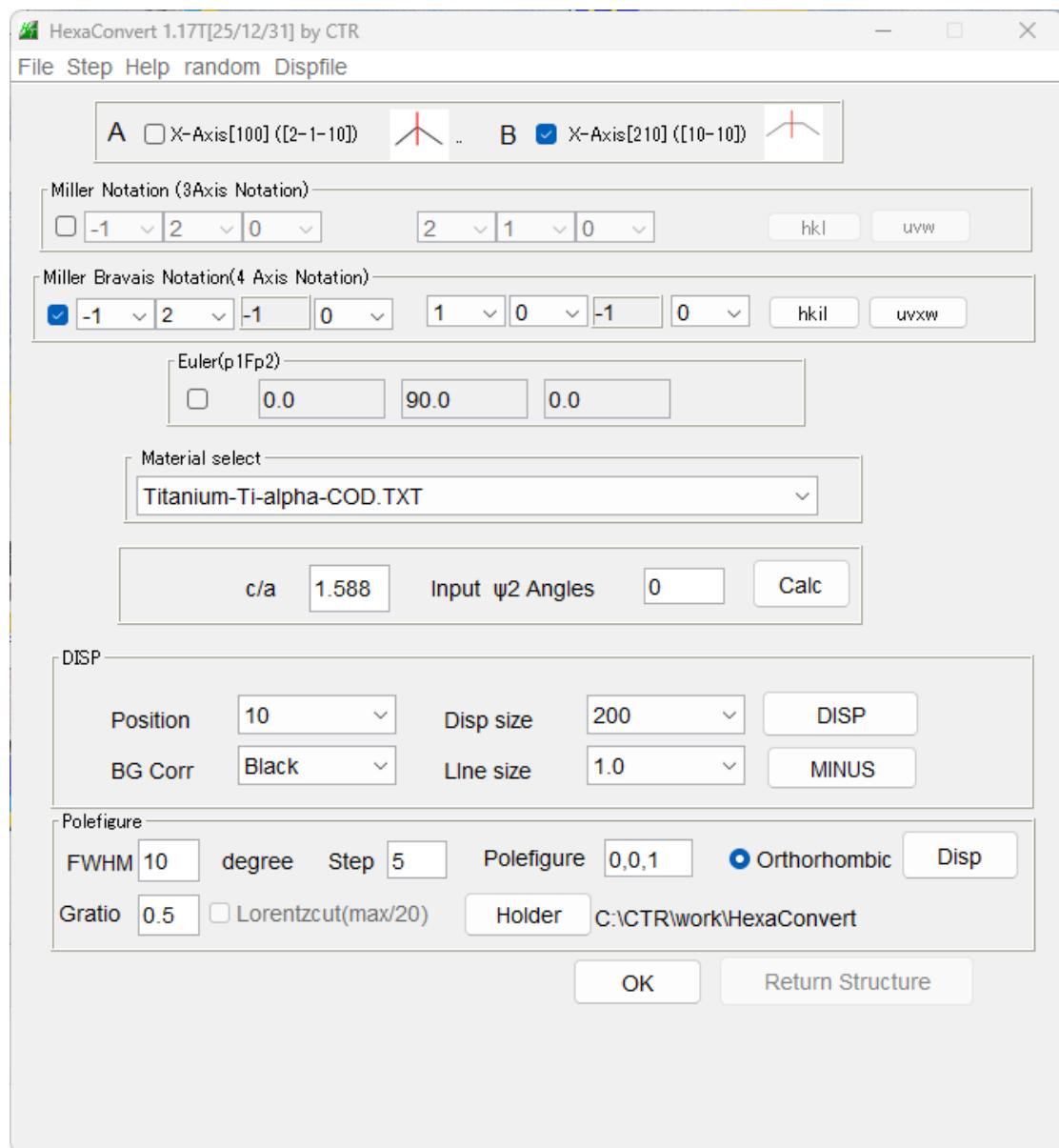
但し、単結晶のシュミレーション極点図や、バックグラウンドが高い測定データを扱う場合発生しています。

対策として、P F t o O D F 3 ソフトウェアに最小値、0. 0 0 0 0 0 1を追加することで対応します。

0. 0 0 0 0 0 1はrandomレベル+0. 0 0 0 1%になります。

以下に結果を示します。

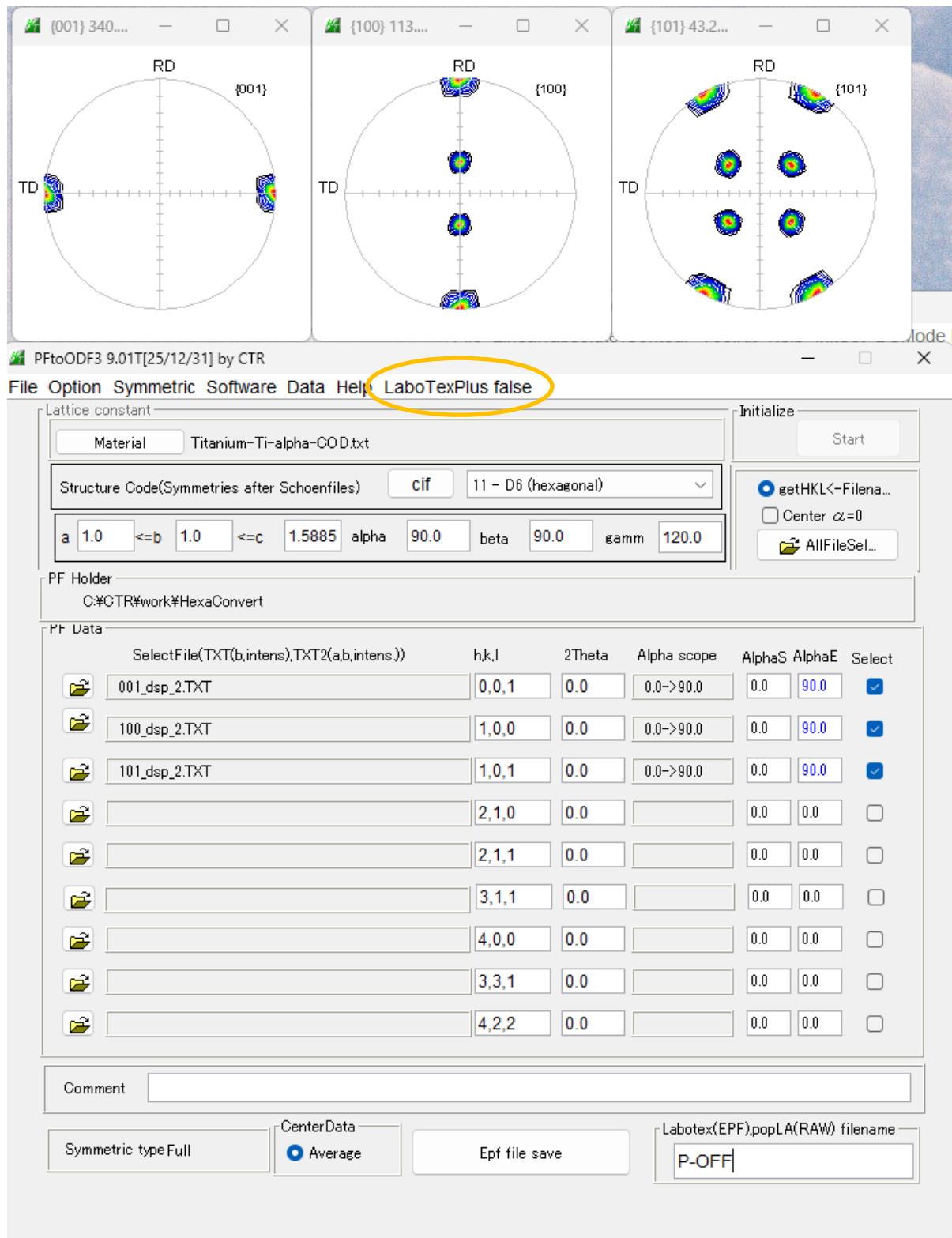
Titanium (-120) [210] シュミレーション



(100)

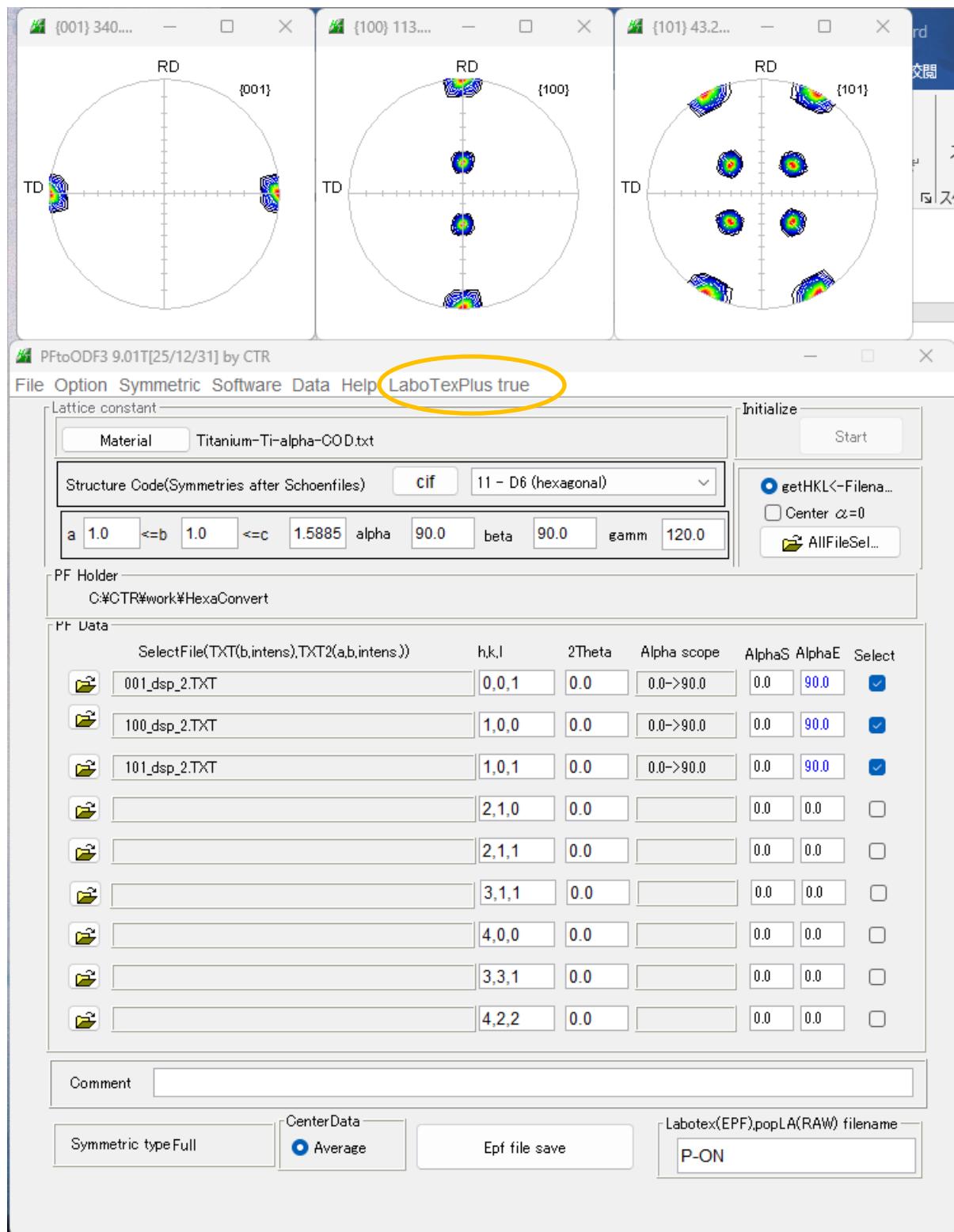
0.0	155.0	1.1253657160280552E-20	↓
0.0	160.0	7.389145310884662E-13	↓
0.0	165.0	8.886217909064711E-7	↓
0.0	170.0	2.22037649083899	↓
0.0	175.0	21.186513479159405	↓
0.0	180.0	113.7764121426672	↓
0.0	185.0	21.186513479159405	↓
0.0	190.0	2.22037649083899	↓
0.0	195.0	8.886217909064711E-7	↓
0.0	200.0	7.389145310884662E-13	↓
0.0	205.0	1.1253657160280552E-20	↓

從來



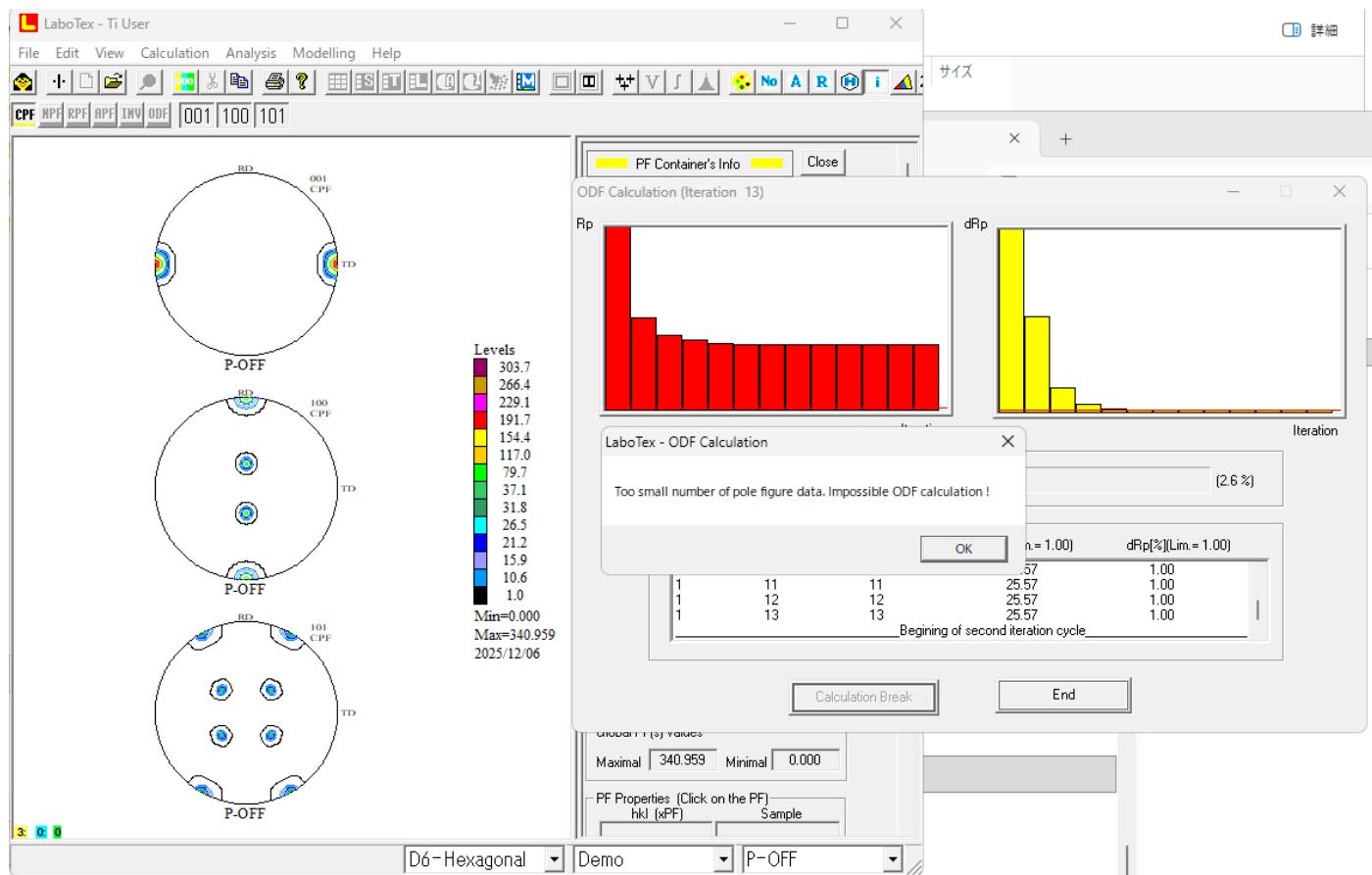
0.0000000 0.0000000 0.0000000 0.0000000 0.0000000 0.0000000 0.0000000 0.0000000
0.0000000 0.0000000 2.220376 21.18651 113.7764 21.18651 2.220376 0.0000000
0.0000000 0.0000000 0.0000000 0.0000000 0.0000000 0.0000000 0.0000000 0.0000000

变更



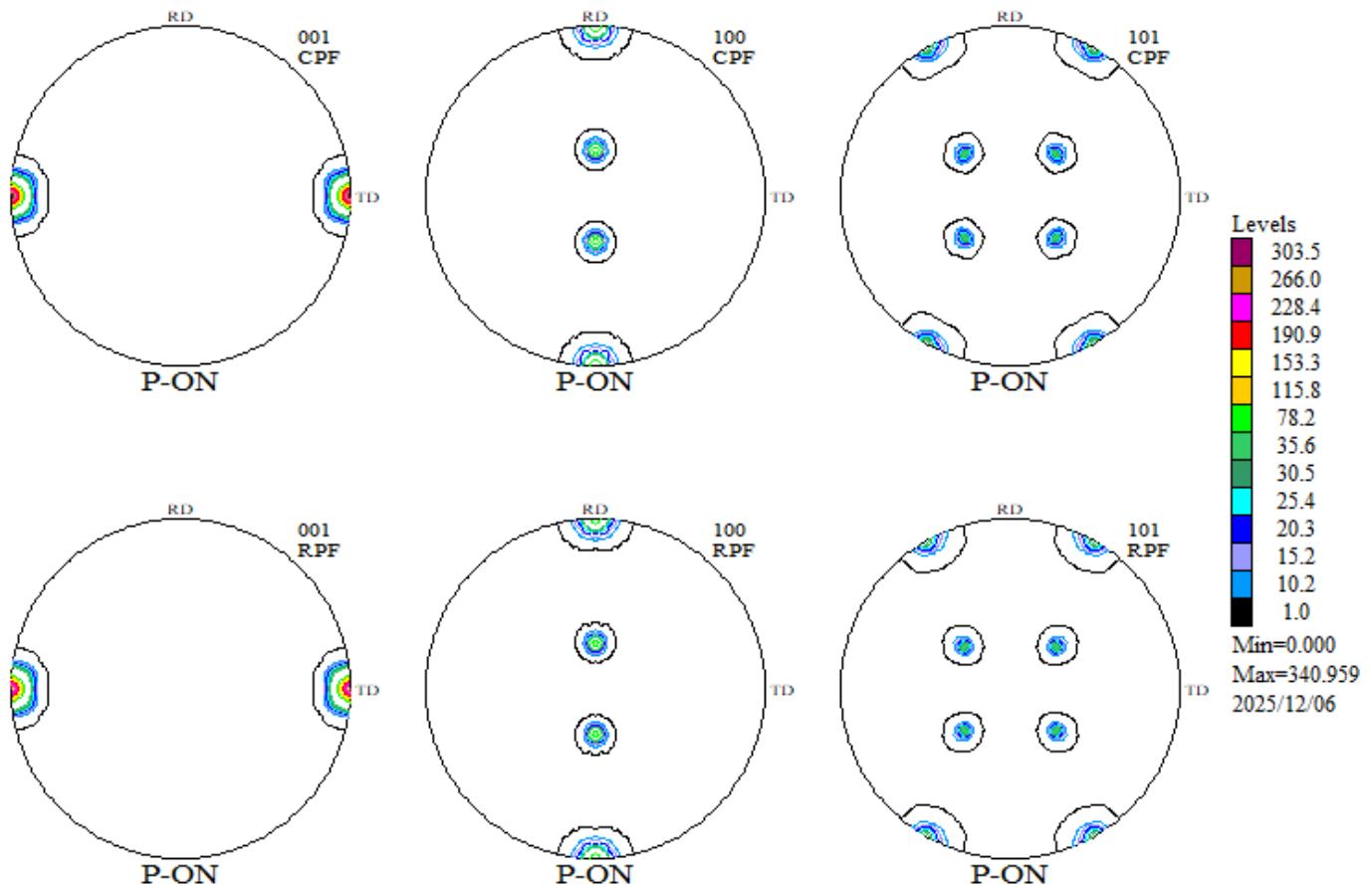
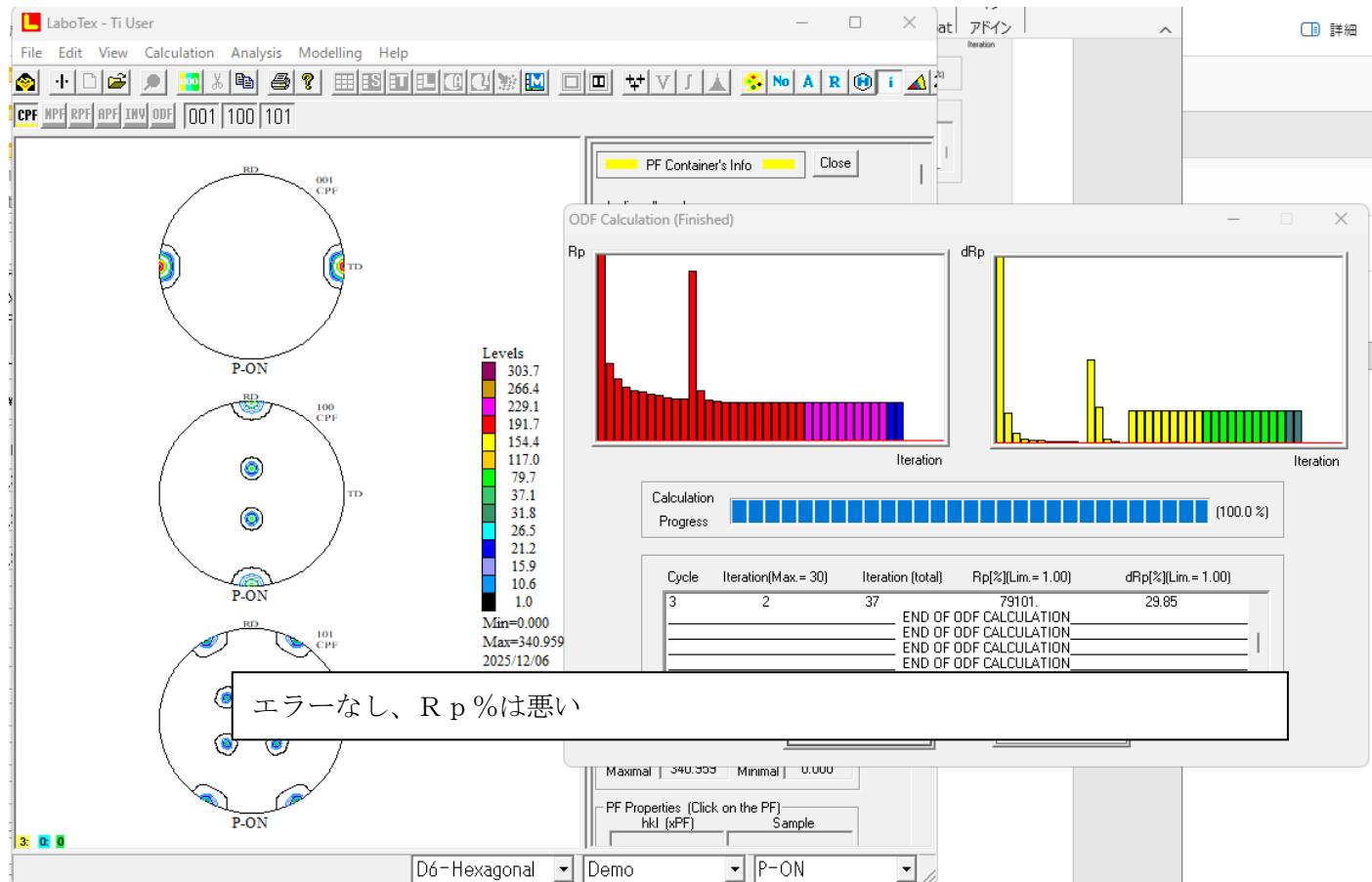
0.000001 0.000001 0.000001 0.000001 0.000001 0.000001 0.000001 0.000001
0.000001 0.000001 2.220376 21.18651 113.7764 21.18651 2.220376 0.000001
0.000001 0.000001 0.000001 0.000001 0.000001 0.000001 0.000001 0.000001

以前

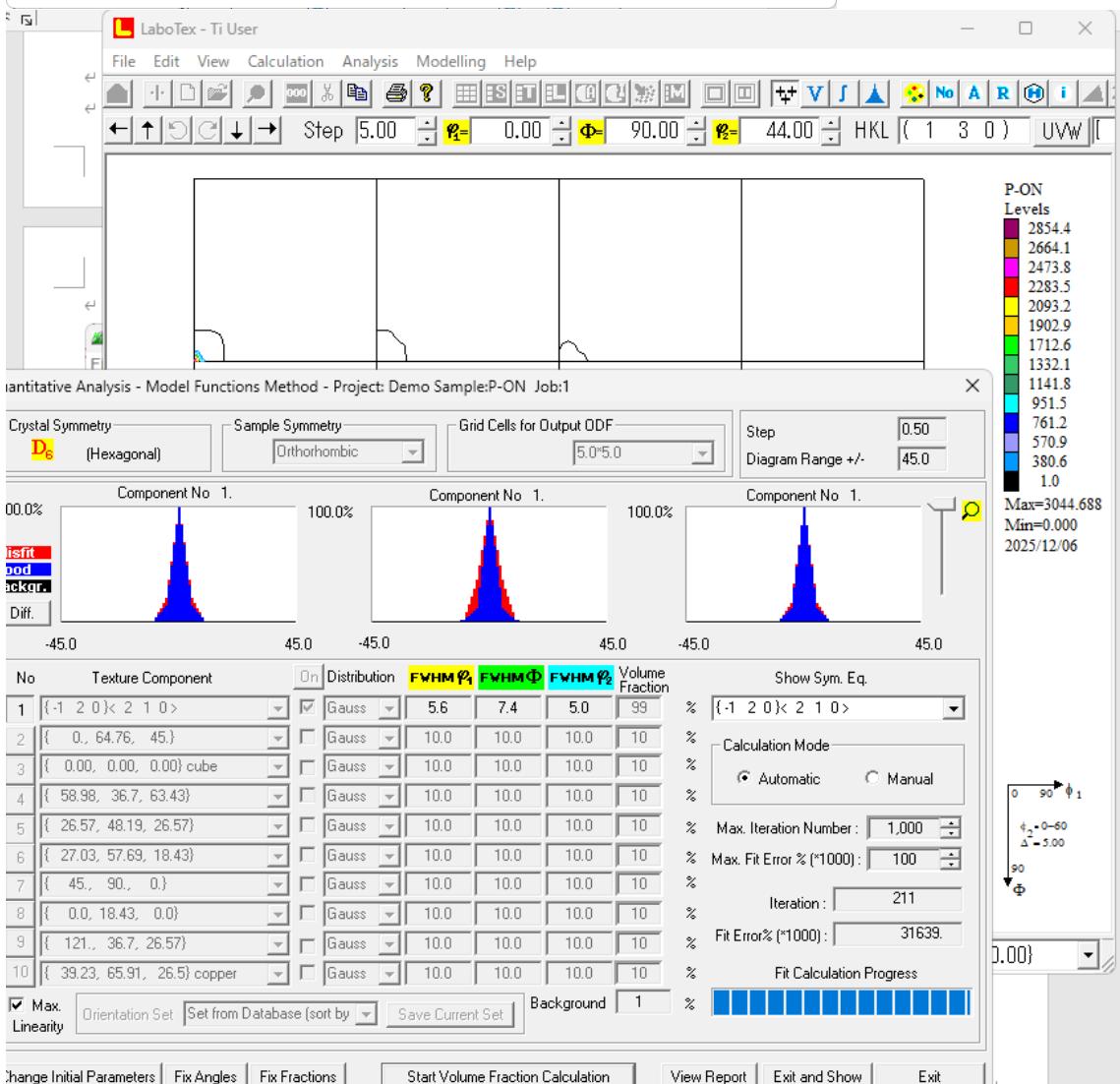


エラー

改良



ValueODFVF 2.39T[25/12/31] by CTR



Component No 1 - Distribution :Gauss
 99.32 5.6 7.4 5.0 { -1 2 0 } < 2 1 0 >
 0.68 Background Volume Fraction