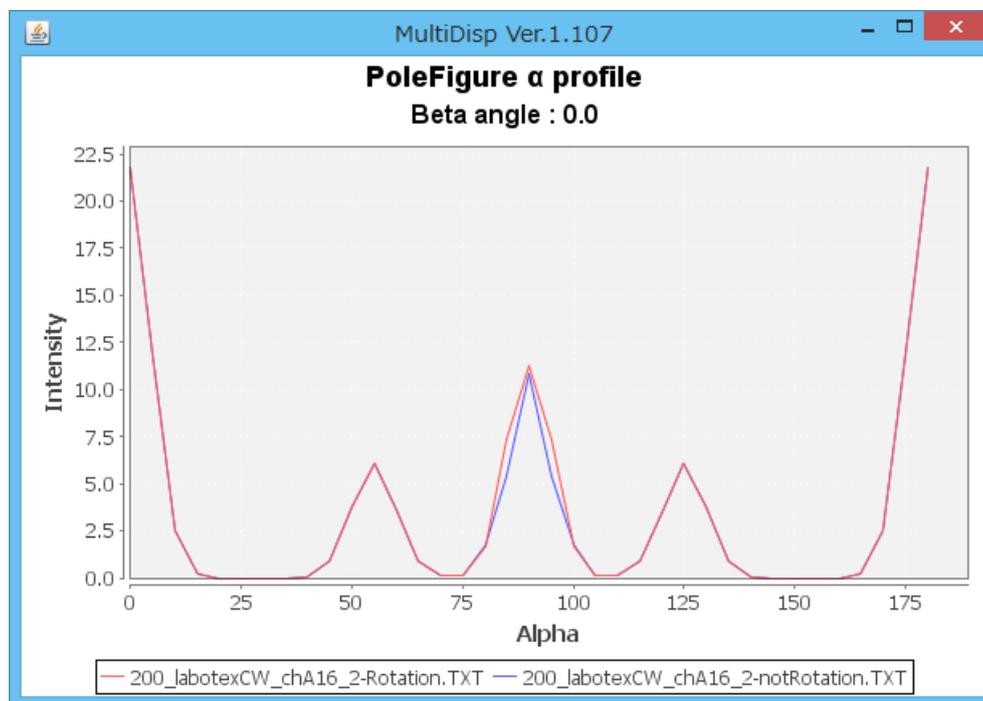


不完全極点図の平滑化評価（TD回転なし）

TD軸回転有り無し比較



TD軸回転し75→90を中心極点図に上書きすると
極点図中心付近の広がりが大きくなる。

2017年03月06日

HelperTex Office

概要

XRDによる極点図測定は反射法極点図測定が主流で測定範囲は極点図の中心から75度である。

このような極点図からVolume Fraction（結晶方位の定量）を計算する場合、粒径の影響を避けるため、極点図の平滑化を行うことがあります。

平滑化には、単純移動平均法、Savitzky-Golay法、CTRのADC向け平均法があるが、不完全極点図の場合、CTRのADC法が最適と考えられます。

理由は、終端データに対する必要とする周辺データの数である。

例えば、Savitzky-Golay法の最小平離散点は5で測定されていない2点を必要とします。

「科学計測のための波形データ処理」南茂夫編集を参考にすると

離散点番号	25	23	21	19	17	15	13	11	9	7	5
-12	-253										
-11	-138	-42									
-10	-33	-21	-171								
-09	62	-2	-76	-136							
-08	147	15	9	-51	-21						
-07	222	30	84	24	-6	-78					
-06	287	43	149	89	7	-13	-11				
-05	342	54	204	144	18	42	0	-36			
-04	387	63	249	189	27	87	9	9	-21		
-03	422	70	284	224	34	122	16	44	14	-2	
-02	447	75	309	249	39	147	21	69	39	3	-3
-01	462	78	324	264	42	162	24	84	54	6	12
00	467	79	329	269	43	167	25	89	59	7	17
01	462	78	324	264	42	162	24	84	54	6	12
02	447	75	309	249	39	147	21	69	39	3	-3
03	422	70	284	224	34	122	16	44	14	-2	
04	387	63	249	189	27	87	9	9	-21		
05	342	54	204	144	18	42	0	-36			
06	287	43	149	89	7	-13	-11				
07	222	30	84	24	-6	-78					
08	147	15	9	-51	-21						
09	62	-2	-76	-136							
10	-33	-21	-171								
11	-138	-42									
12	-253										
正規化定数	5178	805	3059	2261	323	1105	143	429	231	21	35

この測定されていないデータを通常最終端データで代用します。

平滑化点数を増やすと、2, 3, 4, 5と増えます。

しかし、CTRのADC法ではどのようなパラメータでも、測定されていない α 方向の点数は常に1で計算されています。

このような理由で、Volume Fractionを計算する場合、CTRのADC法が最適と考えられます。

このADC向け平均化法は

ODFPoleFigure1.5

ODFPoleFigure2

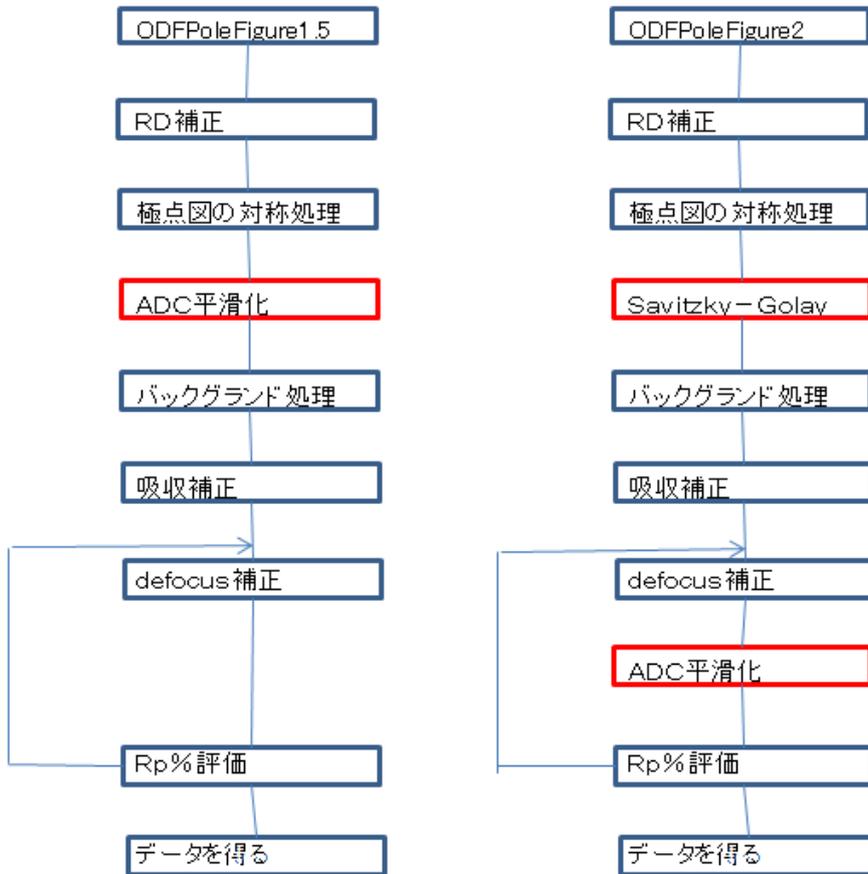
LaboTextPFtoPFtoODF3

ソフトウェアに使われています。

ソフトウェアによる平均化の違い

ODFPoleFigure1.5

ODFPoleFigure2



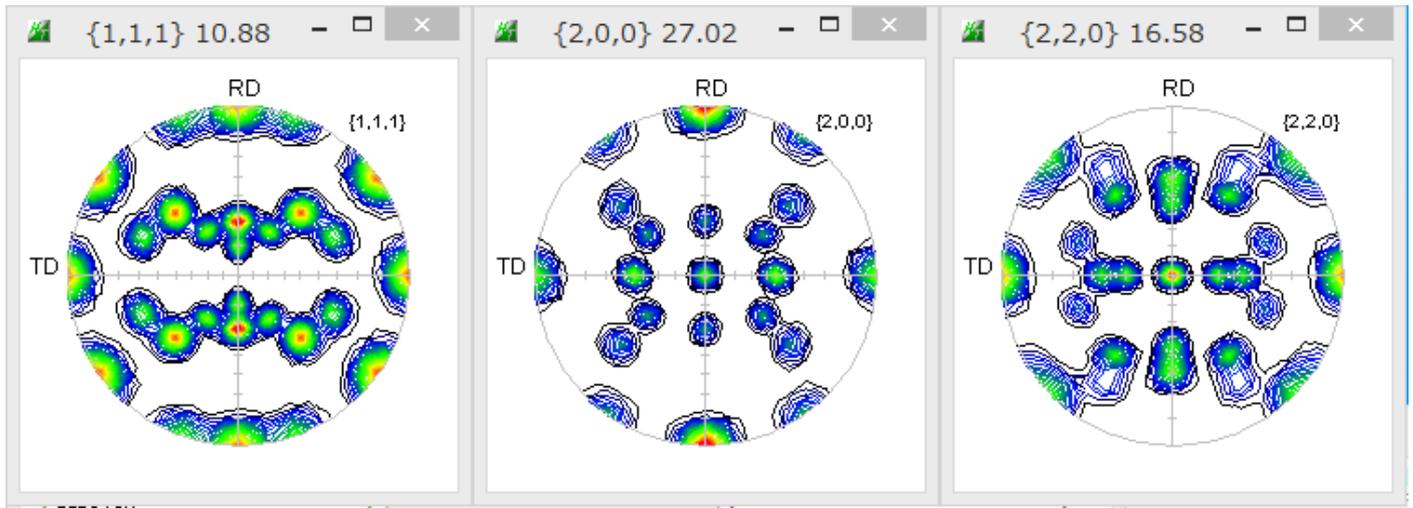
ODFPoleFigure2には2つの平均化手法があるが、両方を選択することは出来ません。



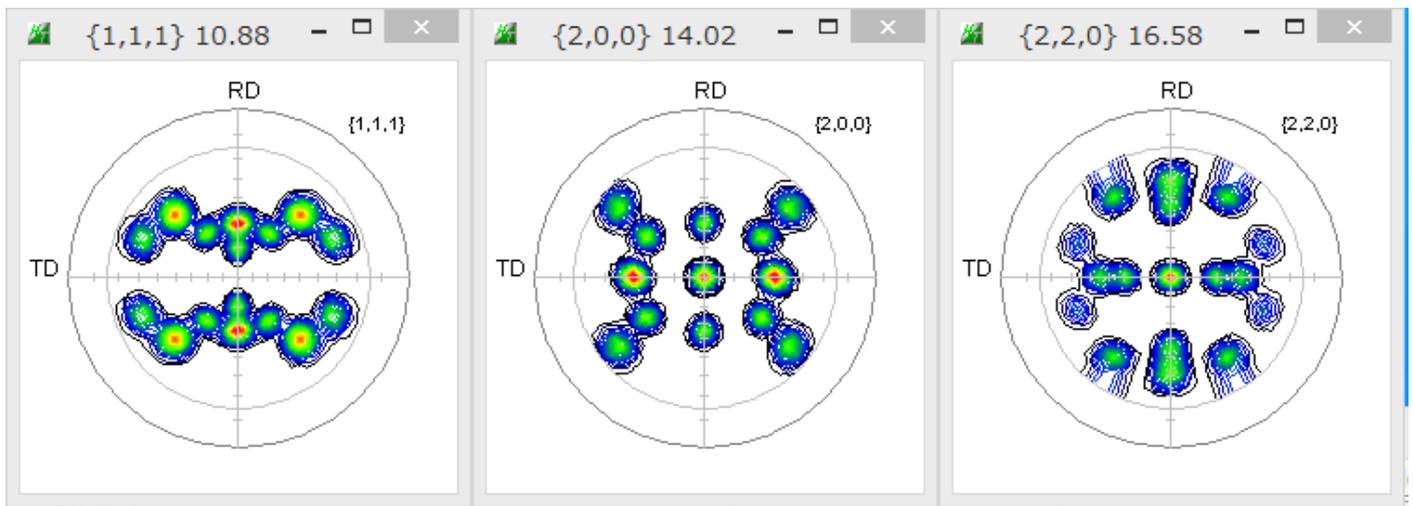
LaboText to PF to ODF3 ソフトウェアは完全極点図を扱う。

評価に使用するデータ

LaboTexでgoss、cube、brass、copper方位の半価幅10deg
VolumeFraction25%を作成し、完全極点図をExportした極点図



不完全極点図



評価

完全極点図を再度LaboTexでVolumeFrct ion (VF) 計算

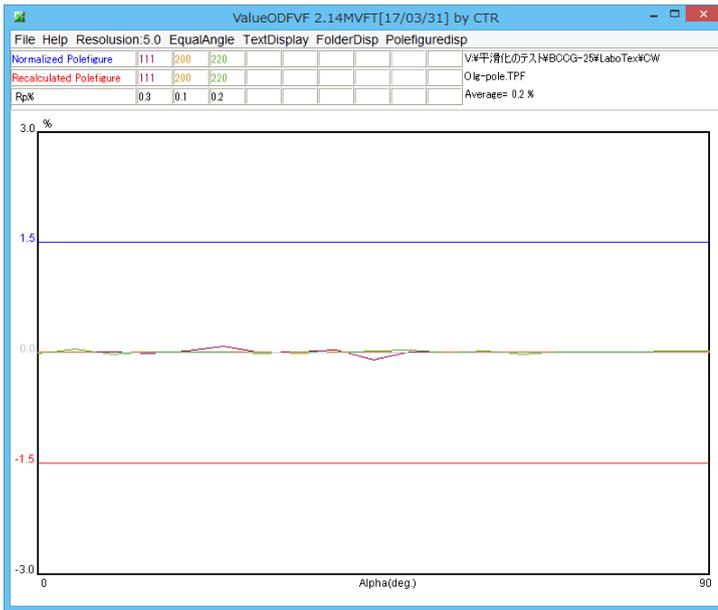
完全極点図をADC平滑化1 cycle-Weight 6 (ADC 1-6) で平滑化し、VF計算

不完全極点図のVF計算

不完全極点図をADC 1-6 平滑化し、VF計算

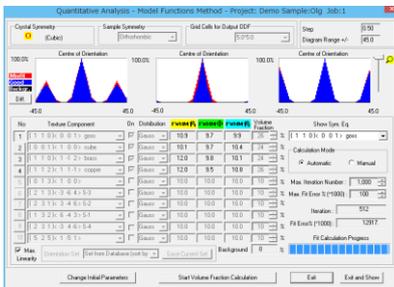
LaboTexTPF toPF toODF 3によるADC 1-6 平滑化によるVF計算

完全極点図を再度LaboTexでVolume Fraction (VF) 計算



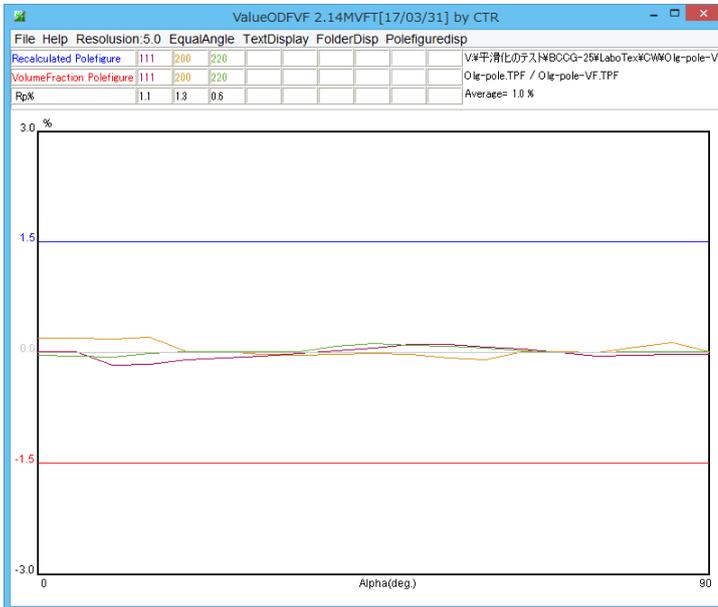
Normalized Polefigure	111	200	220
Recalculated Polefigure	111	200	220
Rp%	0.3	0.1	0.2

V平滑化のテスト#BCCG-25#LaboTex#CW
 Olg-pole.TPF
 Average= 0.2 %



Volume Fraction	FWHM Phi1	FWHM Phi	Phi2	Orientation
Component No 1 - Distribution :Gauss 25.9	10.9	9.7	9.9	[1 1 0] < 0 0 1 > goss
Component No 2 - Distribution :Gauss 24.0	10.1	9.7	10.4	[0 0 1] < 1 0 0 > cube
Component No 3 - Distribution :Gauss 24.0	12.0	9.8	10.1	[1 1 0] < 1 -1 2 > brass
Component No 4 - Distribution :Gauss 25.9	12.0	9.5	10.8	[1 1 2] < 1 1 -1 > copper
0.20		Background Volume Fraction		

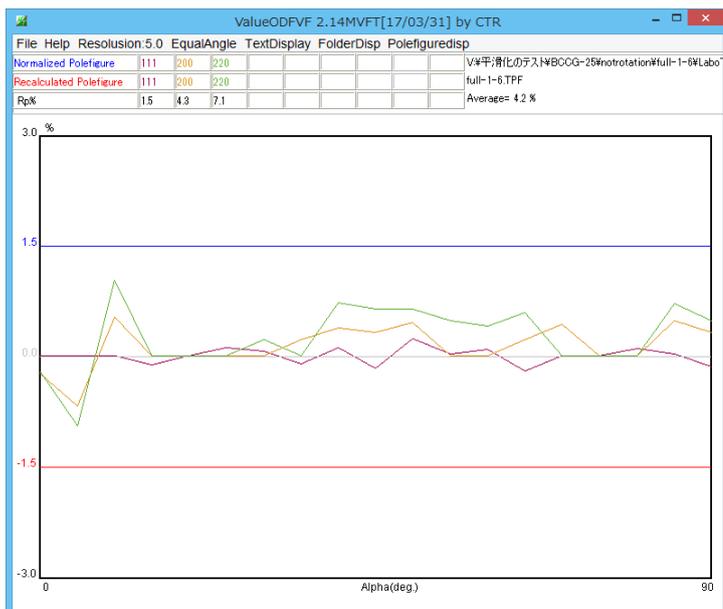
Goss=25.9%, cube=24.0%, brass=24.0%, copper=25.9%



Recalculated Polefigure	111	200	220
VolumeFraction Polefigure	111	200	220
Rp%	1.1	1.3	0.6

V平滑化のテスト#BCCG-25#LaboTex#CW#C
 Olg-pole.TPF / Olg-pole-VF.TPF
 Average= 1.0 %

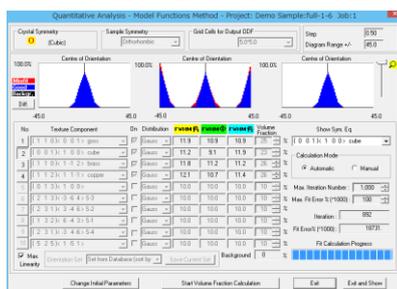
完全極点図をADC平滑化1 cycle-Weight 6 (ADC 1-6) で平滑化し、VF計算



Normalized Polefigure	111	200	220
Recalculated Polefigure	111	200	220
Rp%	1.5	4.3	7.1

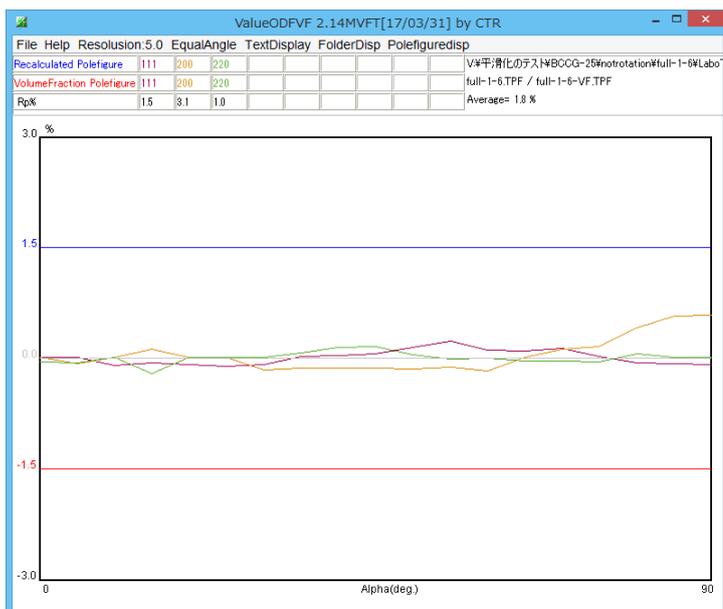
V平滑化のテスト#BCCG-25#notrotation#full-1-6#l
full-1-6.TPF
Average= 4.2 %

{200}、{220} の $\alpha = 10 \text{ deg}$ は、入力極点図の密度がほとんどゼロのため、平滑化により半価幅が広がり、Rp%が低下しています。



Volume Fraction	FWHM Phi1	FWHM Phi2	Phi2	Orientation
Component No 1 - Distribution :Gauss	24.7	11.9	10.9	[1 1 0] < 0 0 1 > goss
Component No 2 - Distribution :Gauss	22.8	11.2	9.1	[0 0 1] < 1 0 0 > cube
Component No 3 - Distribution :Gauss	26.4	11.8	11.2	[1 1 0] < 1 -1 2 > brass
Component No 4 - Distribution :Gauss	26.0	12.1	10.7	[1 1 2] < 1 1 -1 > copper
0.18 Background Volume Fraction				

Goss=24.7%, cube=22.8%, brass=26.4%, copper=26.0%

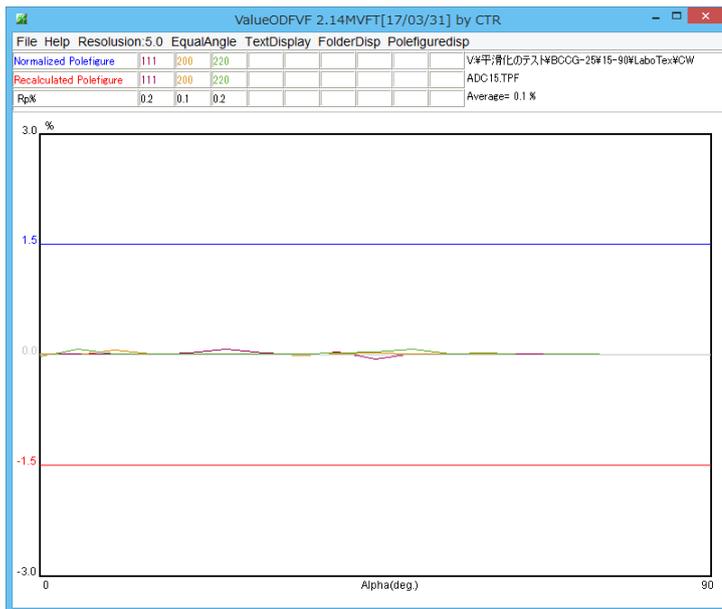


Recalculated Polefigure	111	200	220
VolumeFraction Polefigure	111	200	220
Rp%	1.5	3.1	1.0

V平滑化のテスト#BCCG-25#notrotation#
full-1-6.TPF / full-1-6-VF.TPF
Average= 1.8 %

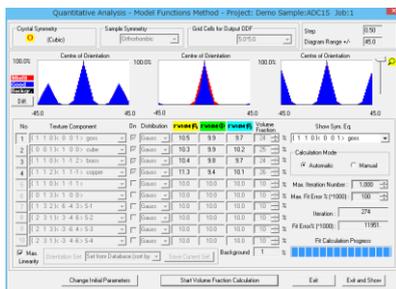
平滑化前より、半価幅が広がるが、VF値は求められています

不完全極点図のV F計算



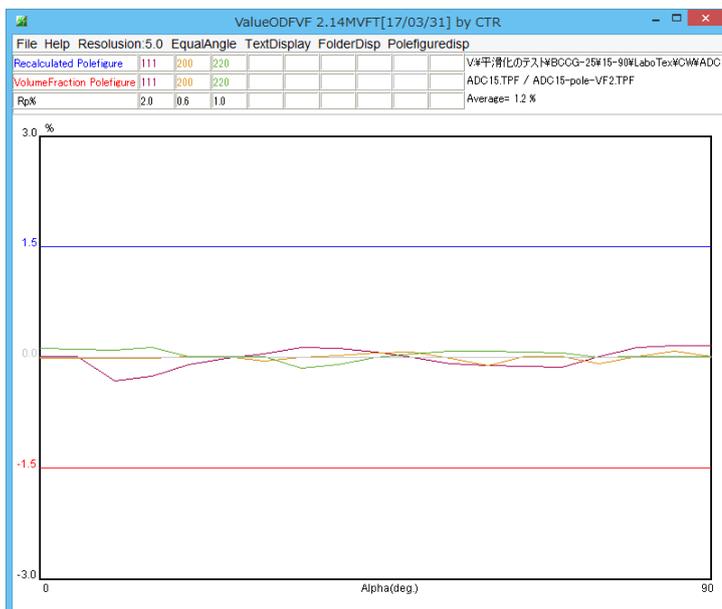
Normalized Polefigure	111	200	220
Recalculated Polefigure	111	200	220
Rp%	0.2	0.1	0.2

V平滑化のテスト#BCCG-25#15-90#L
 ADC15.TPF
 Average= 0.1 %



Volume Fraction	FWHM Phi1	FWHM Phi	FWHM Phi2	Orientation
Component No 1 - Distribution :Gauss	24.1	10.5	9.9	[1 1 0] < 0 0 1 > goss
Component No 2 - Distribution :Gauss	25.1	10.3	9.9	[0 0 1] < 1 0 0 > cube
Component No 3 - Distribution :Gauss	24.2	10.4	9.8	[1 1 0] < 1 -1 2 > brass
Component No 4 - Distribution :Gauss	26.1	11.3	9.4	[1 1 2] < 1 1 -1 > copper
0.61		Background Volume Fraction		

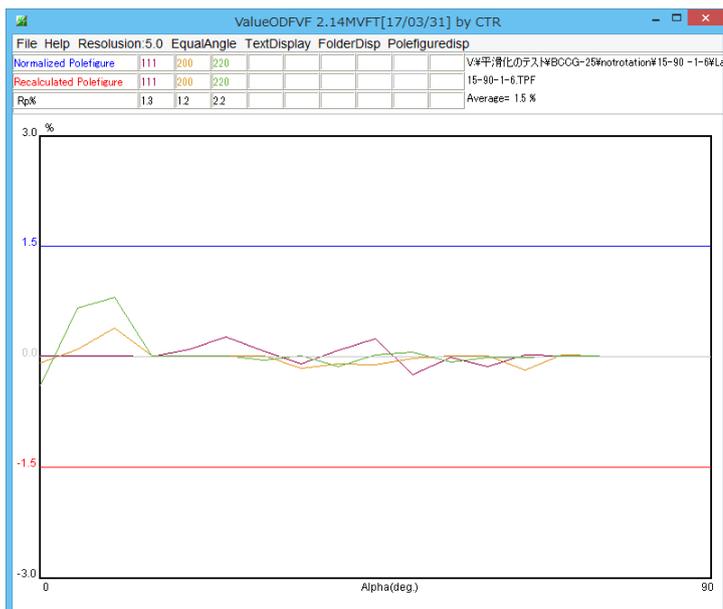
Goss=24.1%, cube=25.1%, brass=24.1%, copper=26.1%



Recalculated Polefigure	111	200	220
VolumeFraction Polefigure	111	200	220
Rp%	2.0	0.6	1.0

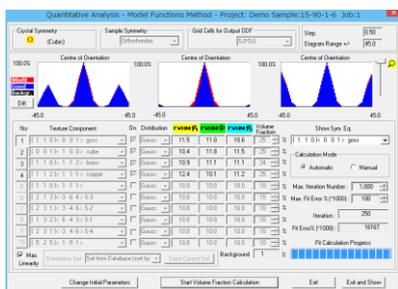
V平滑化のテスト#BCCG-25#15-90#LaboTex#CW#
 ADC15.TPF / ADC15-pole-VF2.TPF
 Average= 1.2 %

不完全極点図をADC 1 - 6 平滑化し、VF計算



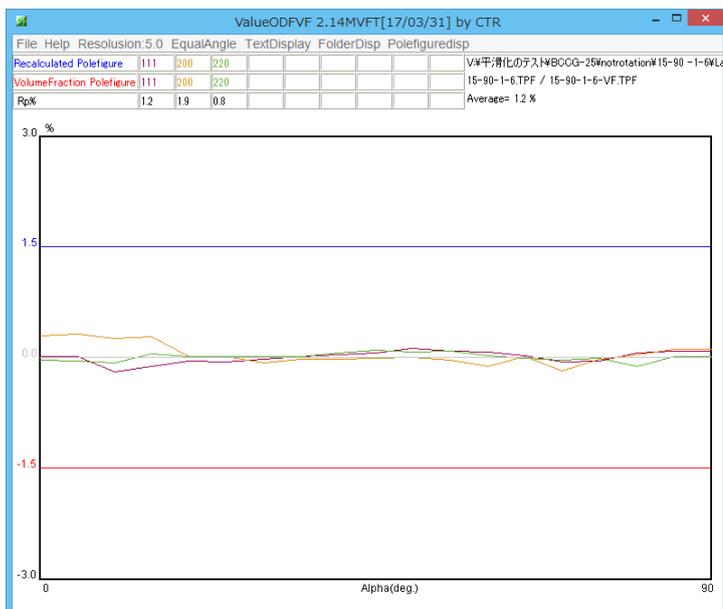
Normalized Polefigure	111	200	220
Recalculated Polefigure	111	200	220
Rp%	1.3	1.2	2.2

V%平滑化のテスト#BCCG-25#notrotation#
15-90-1-6.TPF
Average= 1.5 %



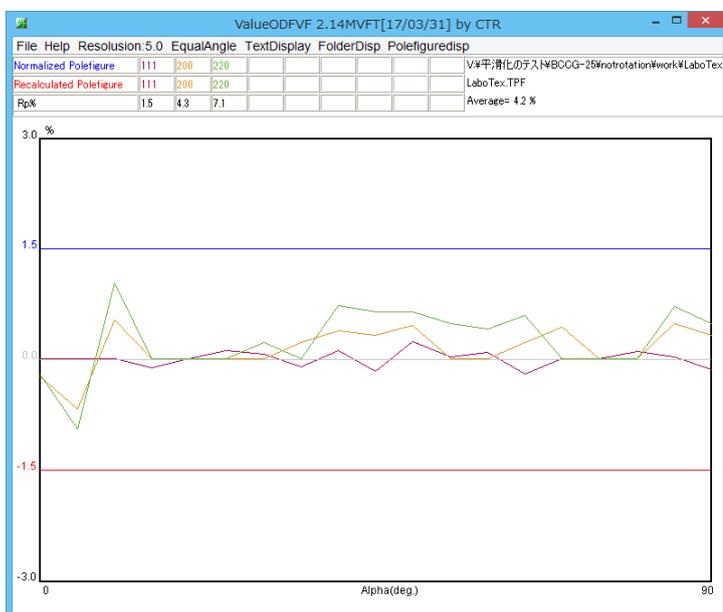
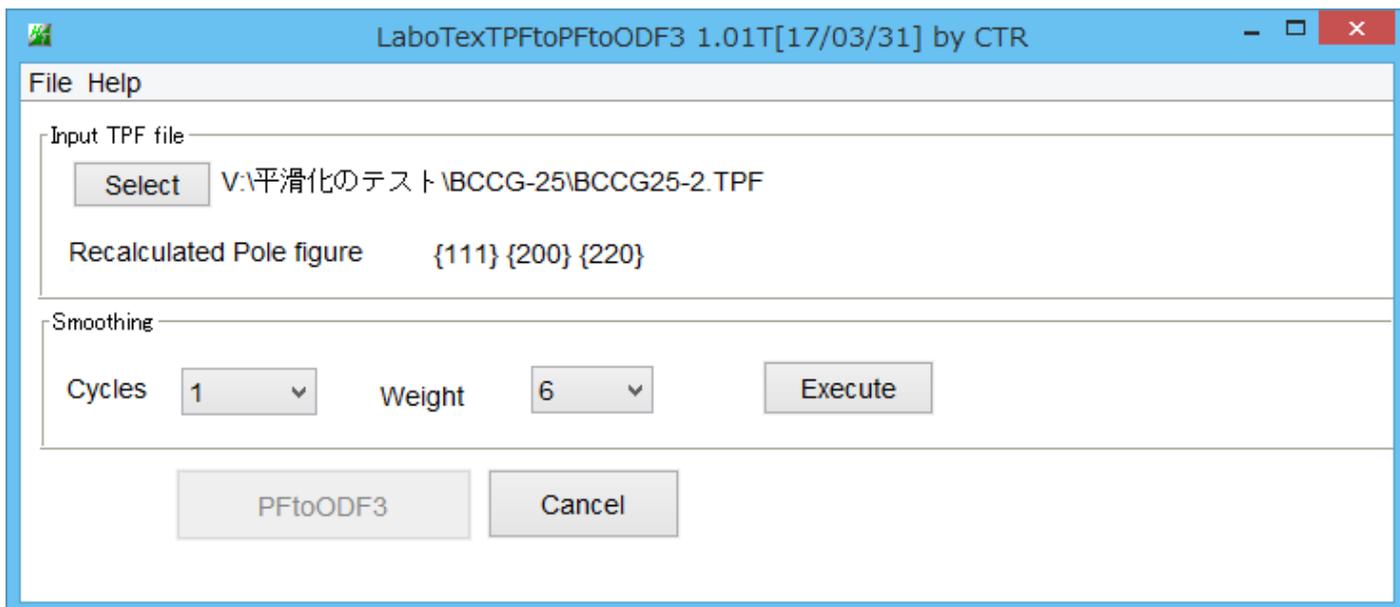
Volume Fraction	FWHM Phi1	FWHM Phi	Phi2	Orientation
Component No 1 - Distribution :Gauss				
25.3	11.5	11.0	10.6	[1 1 0] < 0 0 1 > goss
Component No 2 - Distribution :Gauss				
25.1	10.4	11.8	11.5	[0 0 1] < 1 0 0 > cube
Component No 3 - Distribution :Gauss				
24.3	10.9	11.1	11.1	[1 1 0] < 1 -1 2 > brass
Component No 4 - Distribution :Gauss				
25.2	12.4	10.1	11.2	[1 1 2] < 1 1 -1 > copper
0.09 Background Volume Fraction				

Goss=25.3%, cube=25.1%, brass=24.3%, copper=25.2%



Recalculated Polefigure	111	200	220
VolumeFraction Polefigure	111	200	220
Rp%	1.2	1.9	0.8

V%平滑化のテスト#BCCG-25#notrotation#1
15-90-1-6.TPF / 15-90-1-6-VF.TPF
Average= 1.2 %



Normalized Polefigure	111	200	220
Recalculated Polefigure	111	200	220
Rp%	1.5	4.3	7.1

V:\平滑化のテスト\BCCG-25\notation\LaboTex.TPF
Average= 4.2 %

ODFPoleFigure2 で平滑化した値と同じになります。