

MTEXによるCube—Brass—S方位30%ODF図、random評価

MTEXでODF作成→再計算極点図をExport

Exportした完全極点図から不完全極点図（15→90）を3面

各種ODF(MTEX,LaboTex,TeXTools,StandardODF,newODF（評価版）)でrandom計算

MTEXデータでも正確なrandom計算はLaboTexのみであった。

比較の為に暫定版のnewODFも掲載したが、現在は改善されている可能性があります。

最新パッケージには、DATA/RandomLevel 以下にテストデータを収録しました。

2021年09月05日

*HelperTex Office*

## 概要

従来、VolumeFraction 解析用の ODF 図は LaboTex で作成していたが、作成されるプロファイルを変えるため、MTEX の機能を利用する。

MTEX で Cube (30%)、Brass (30%)、S (30%), random (10%) ODF 作成

```
CS= crystalSymmetry('cubic')
```

```
SS = specimenSymmetry('1')
```

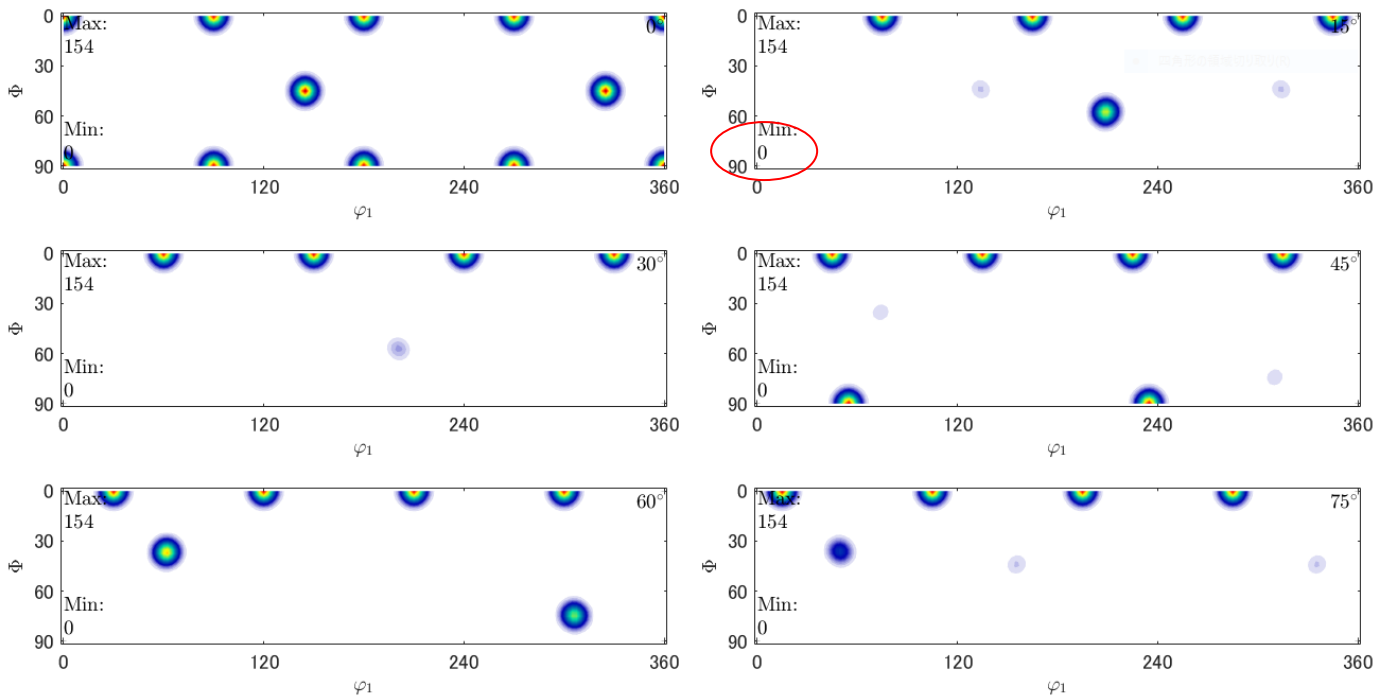
```
Ori1 = orientation.byMiller([1 0 0],[0 0 1],CS)
```

```
Ori2 = orientation.byMiller([1 1 0],[1 -1 2],CS)
```

```
Ori3 = orientation.byMiller([1 3 2],[6 -4 3],CS)
```

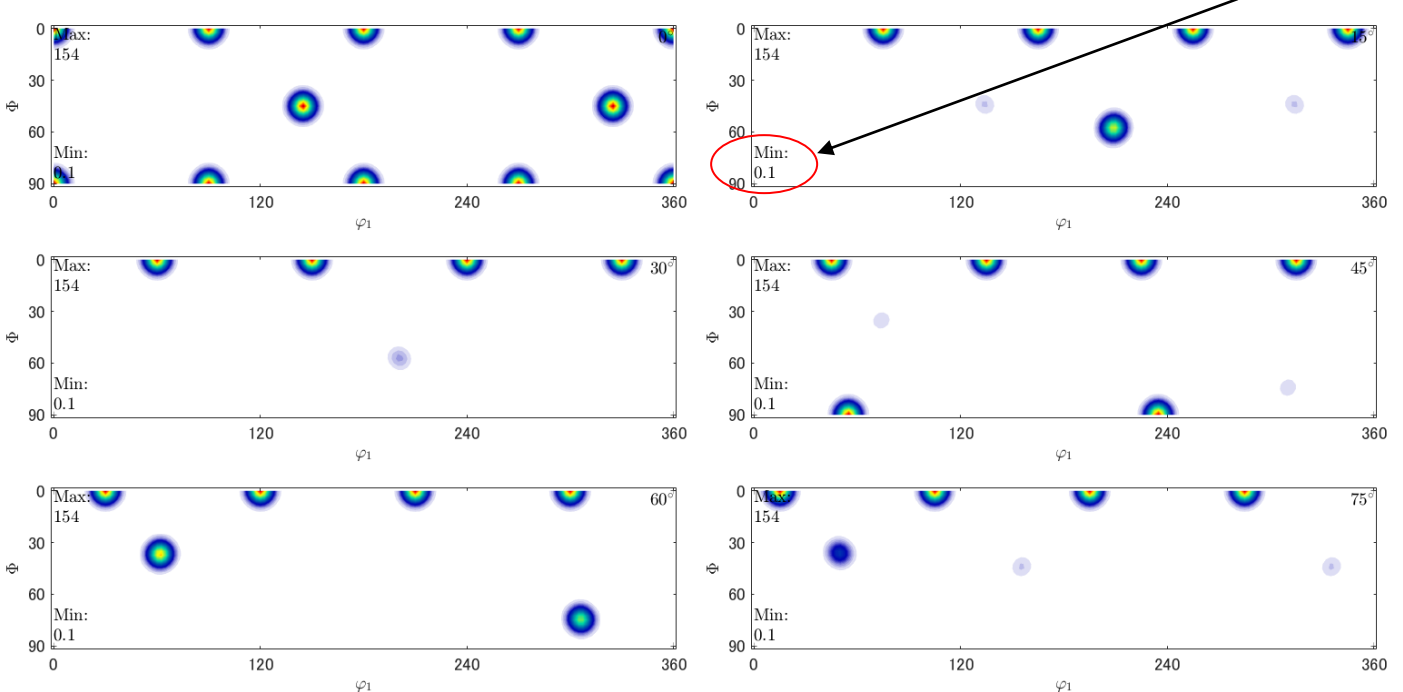
```
psi = vonMisesFisherKernel('HALFWIDTH',5*degree)
```

```
odf=0.3* unimodalODF(Ori1,psi)+0.3* unimodalODF(Ori2,psi)+0.3* unimodalODF(Ori3,psi)
```



```
random = uniformODF(CS,SS)
```

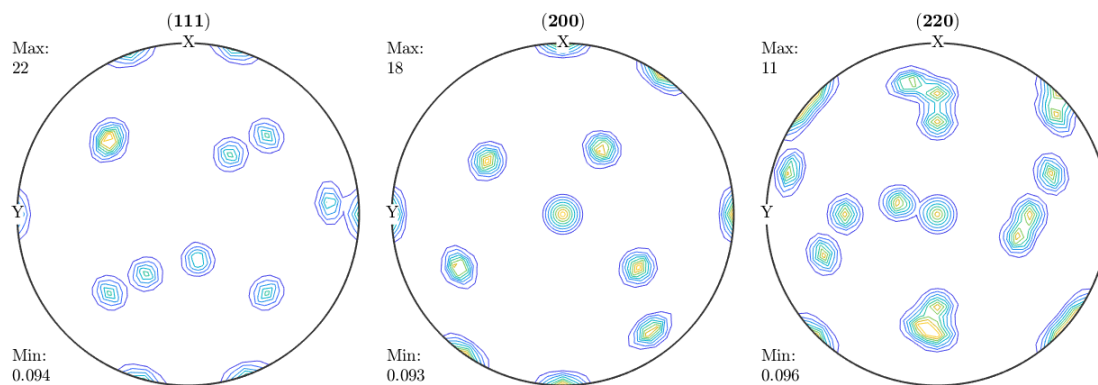
```
odf=0.3* unimodalODF(Ori1,psi)+0.3* unimodalODF(Ori2,psi)+0.3* unimodalODF(Ori3,psi)+0.1*random
```



ODF, 再計算極点図 Export

$h = \{\text{Miller}(1,1,1,CS), \text{Miller}(2,0,0,CS), \text{Miller}(2,2,0,CS)\}$

`rpf=calcPoleFigure(odf,h)`

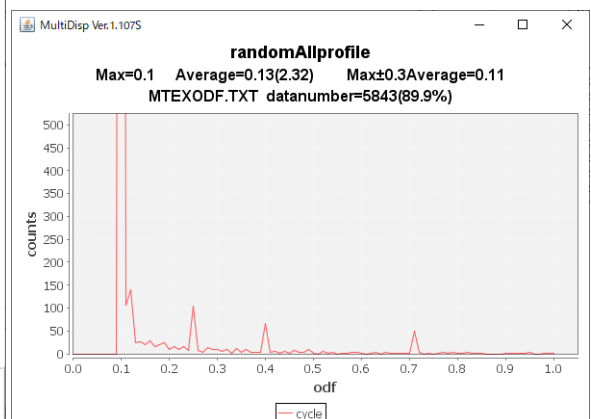
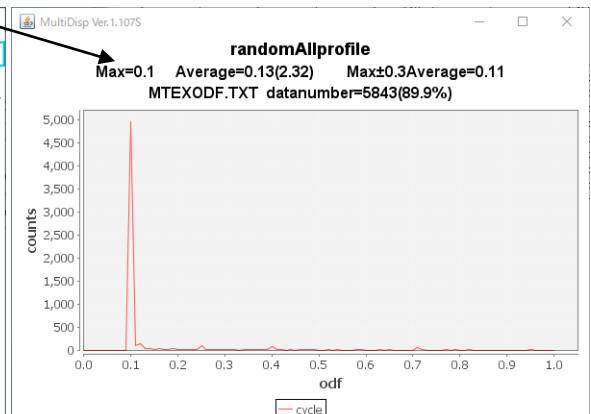
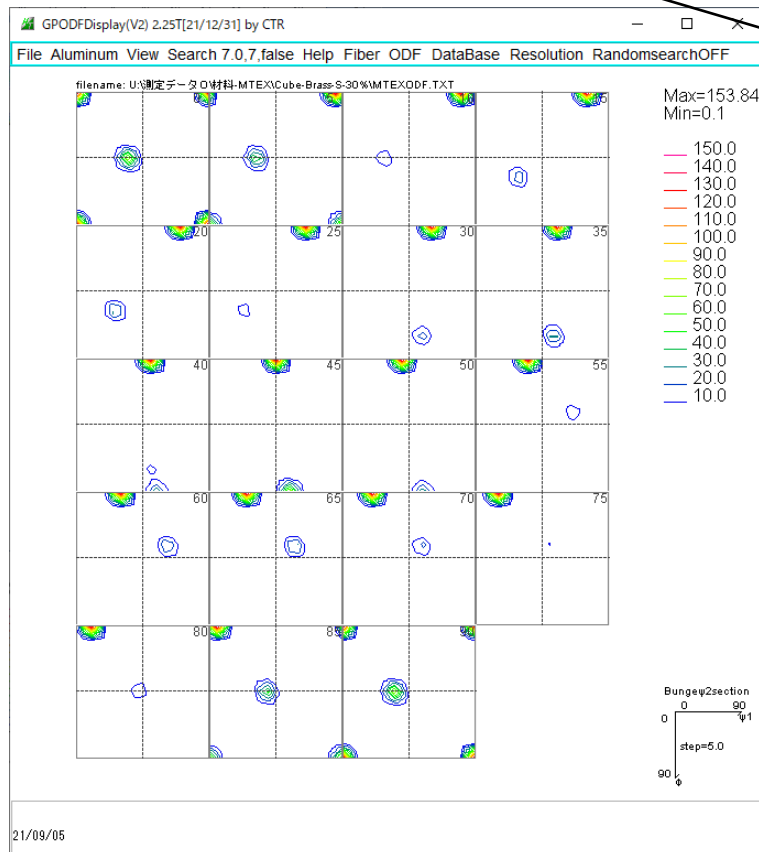


```
>> plot(rpf,'contour')
>> export(odf,'MTEXODF.TXT')
>> export(rpf,'pole')
fx >>
```

現在のフォルダー

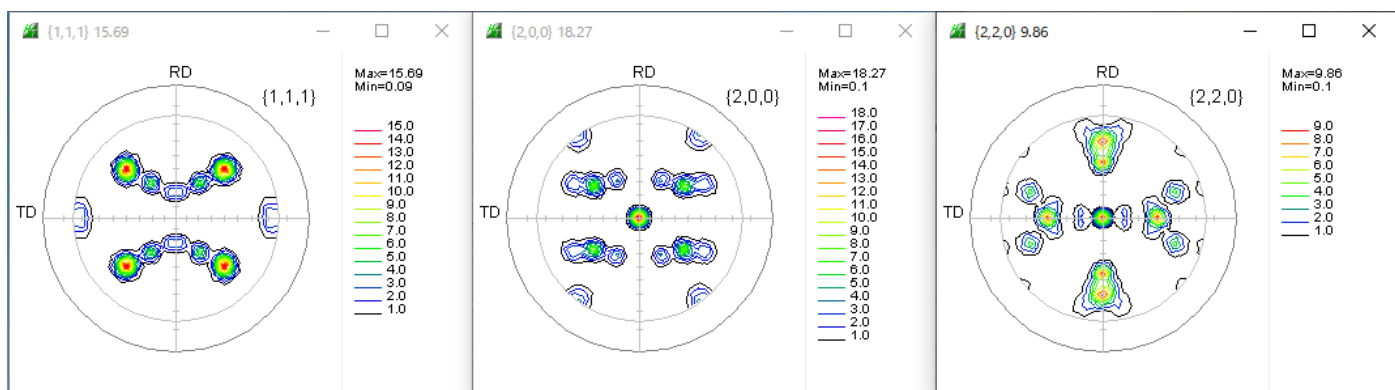
名前 ▲
MTEXODF.TXT
pole_(111).txt
pole_(200).txt
pole_(220).txt

作成したODFを評価 (randomは10%)



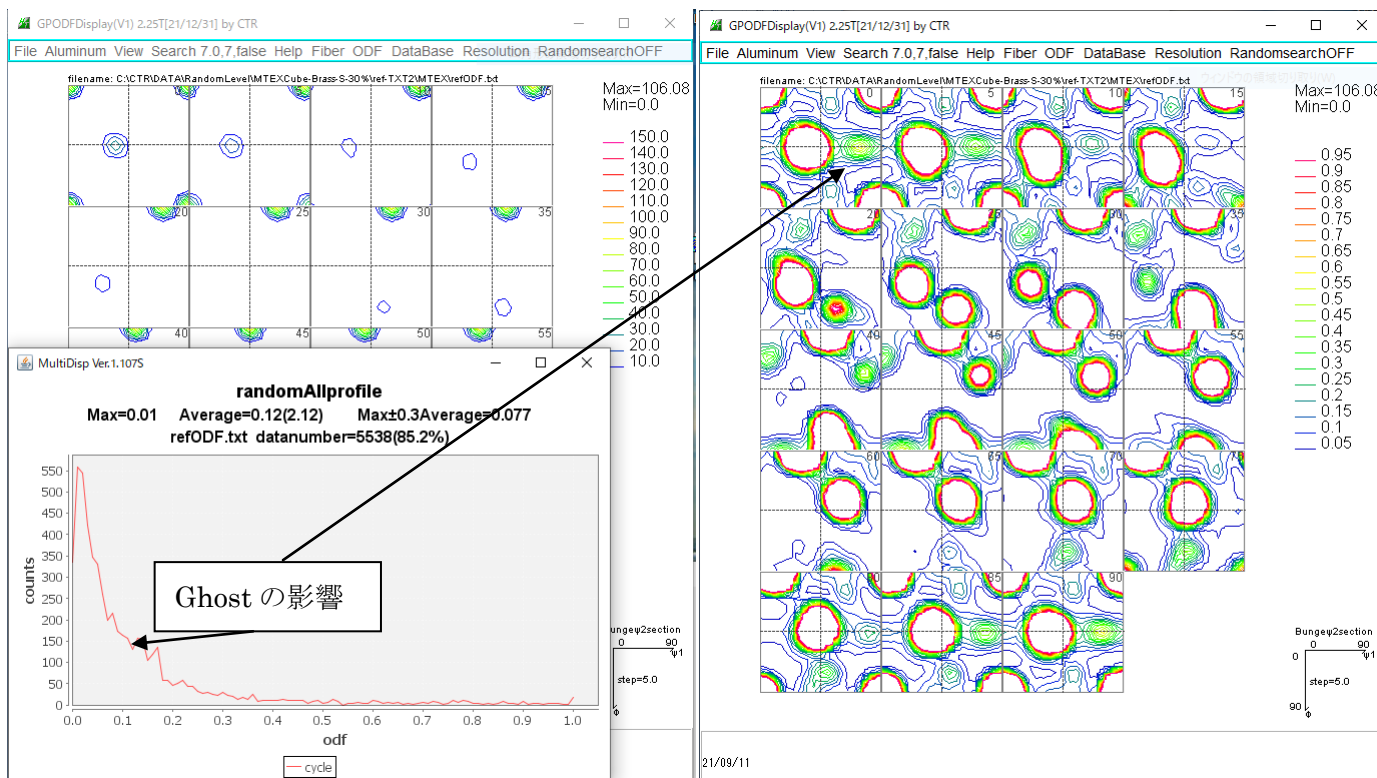
まだ、random=10%を保っている。

# 反射法極点図－triclinic->orthorhombic（CTRソフトウェア）



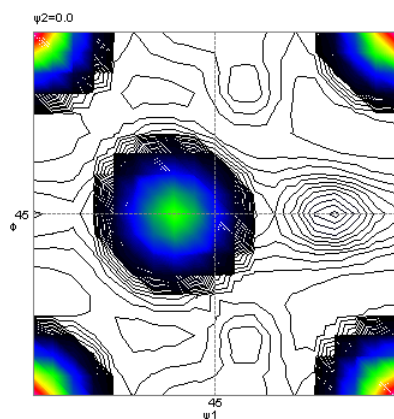
このデータから各種ODFで解析を行う。

MTEXでODF計算し、GPODFDisplayでrandom評価

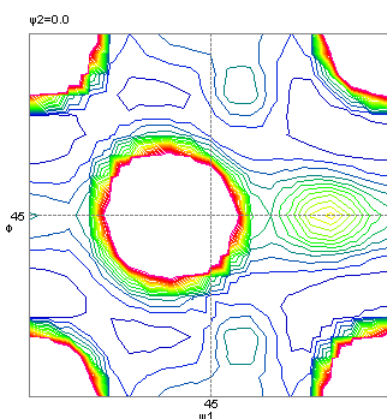


random=1% Ghostの影響でrandom計算できない。 **Max=0.015** (BOX1000)

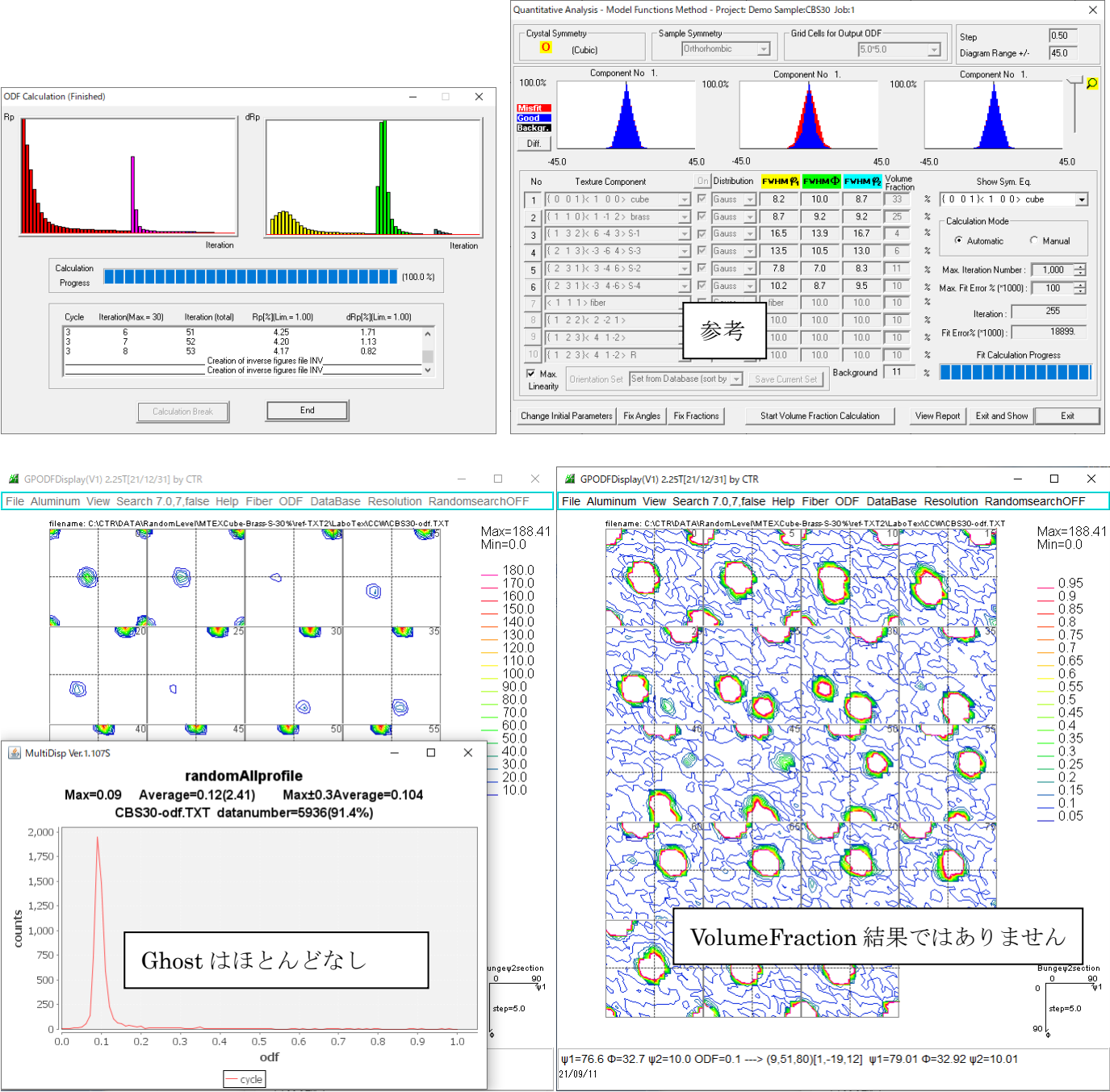
Step=0.05



0->1.0 Step=0.05

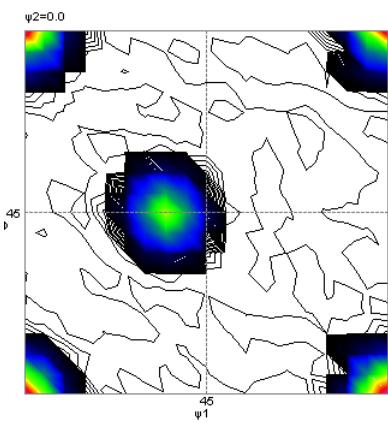


LaTeXでODF計算し、GPODFDisplayでrandom評価

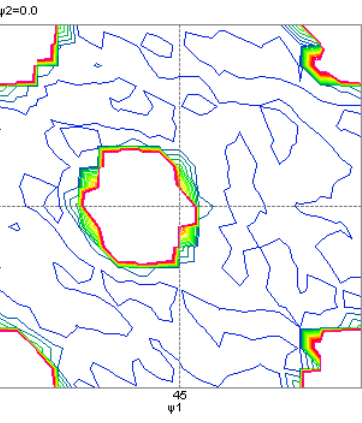


random = 9%を検出する。Max=0.097 (BOX1000)

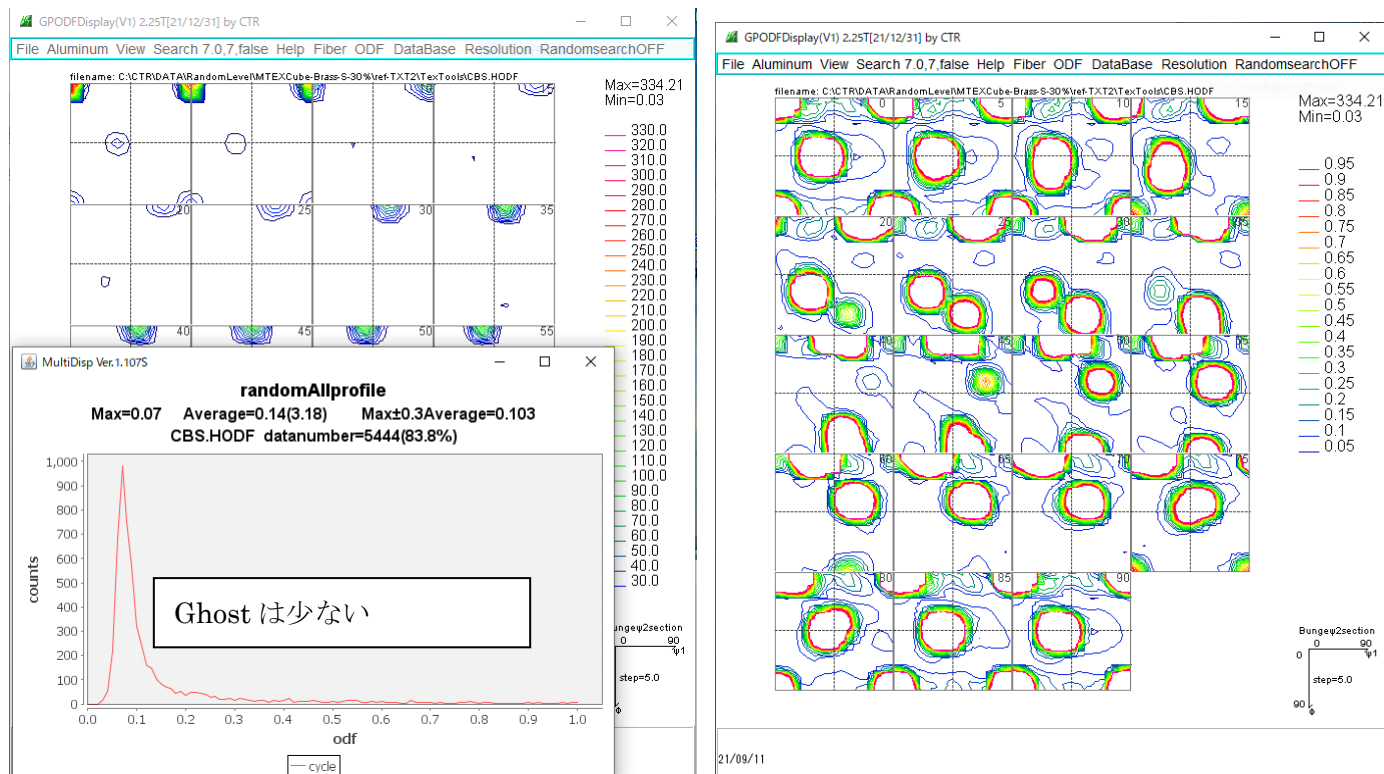
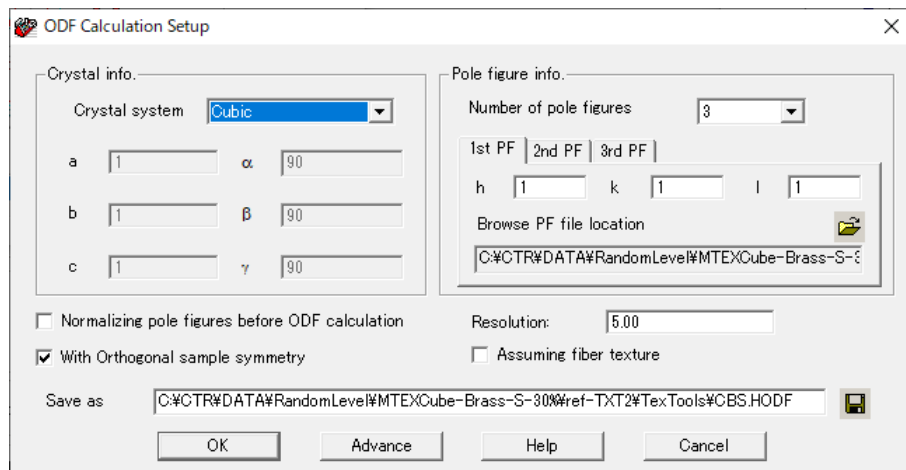
Step=0.05



0->1.0 Step=0.05



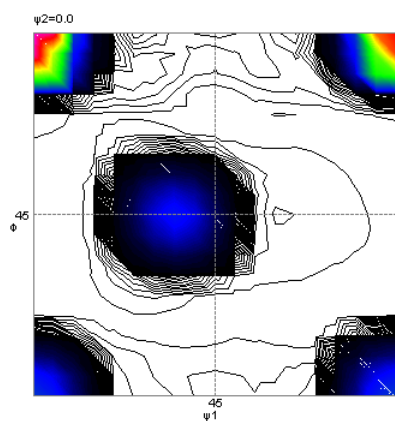
TexToolsでODF計算し、GPODFDisplayでrandom計算



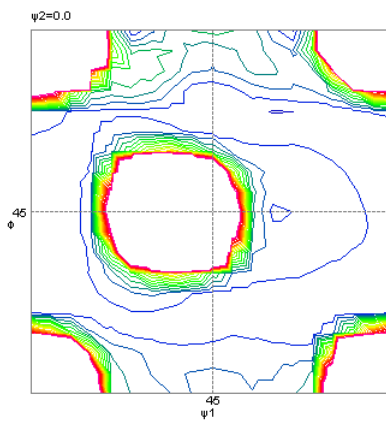
random = 7% **Max=0.075** (BOX1000)

Cube 方位が異常に大きい

Step=0.05

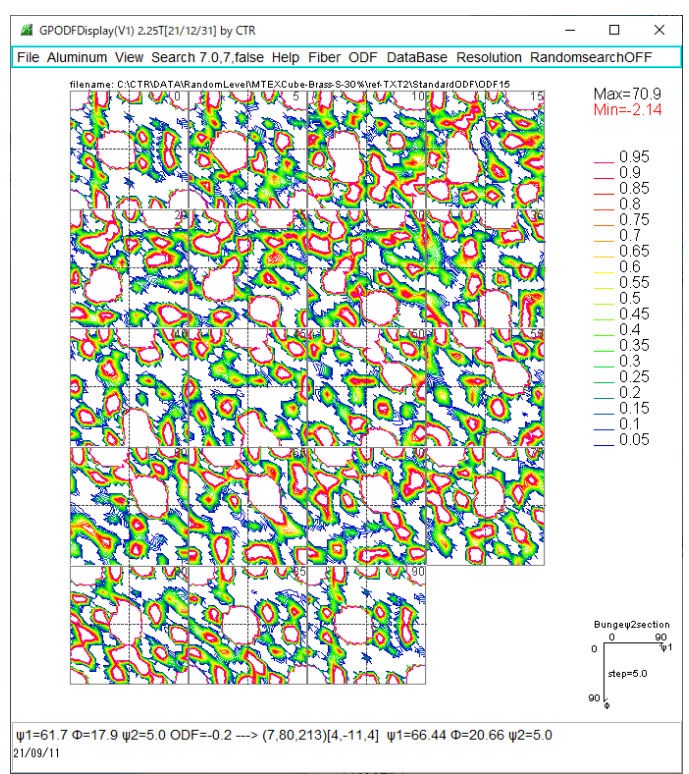
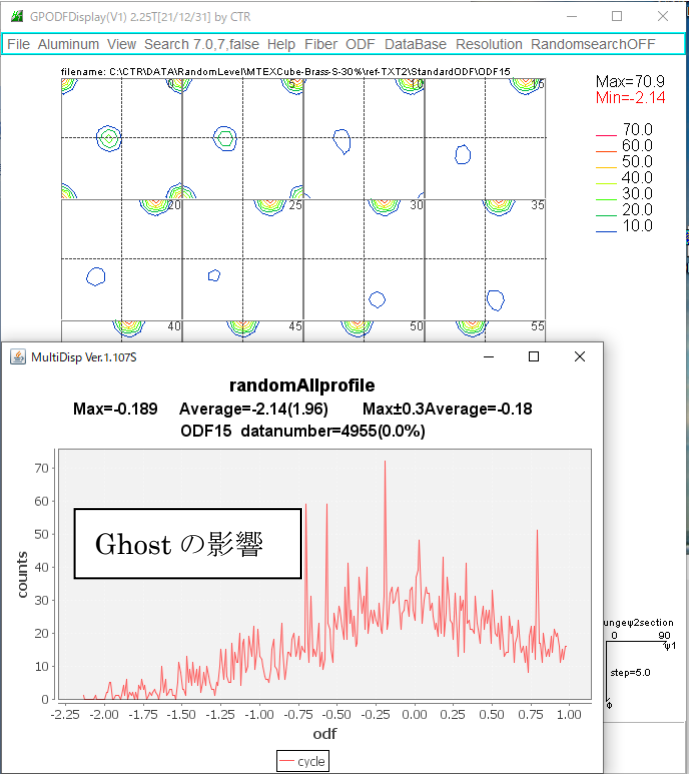


0->1.0 Step=0.05



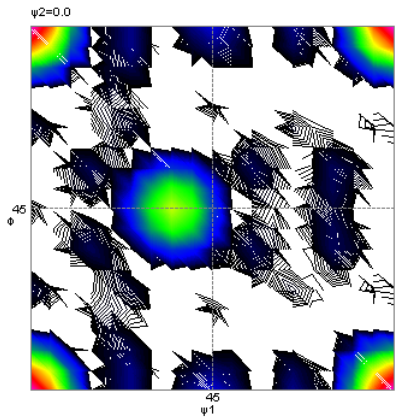


StandardODFでODF計算し、GPODFDisplayでrandom評価

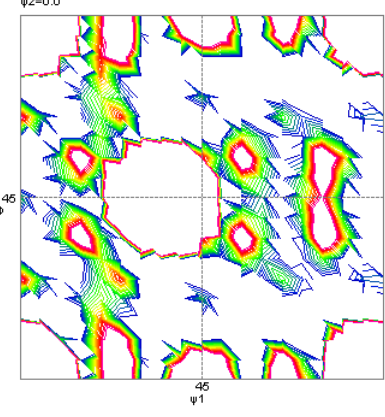


random検出出来ない。

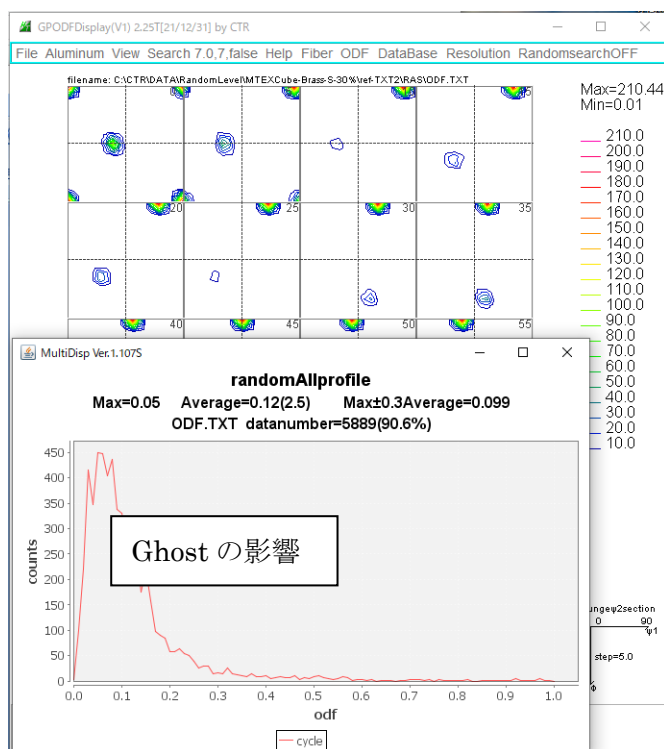
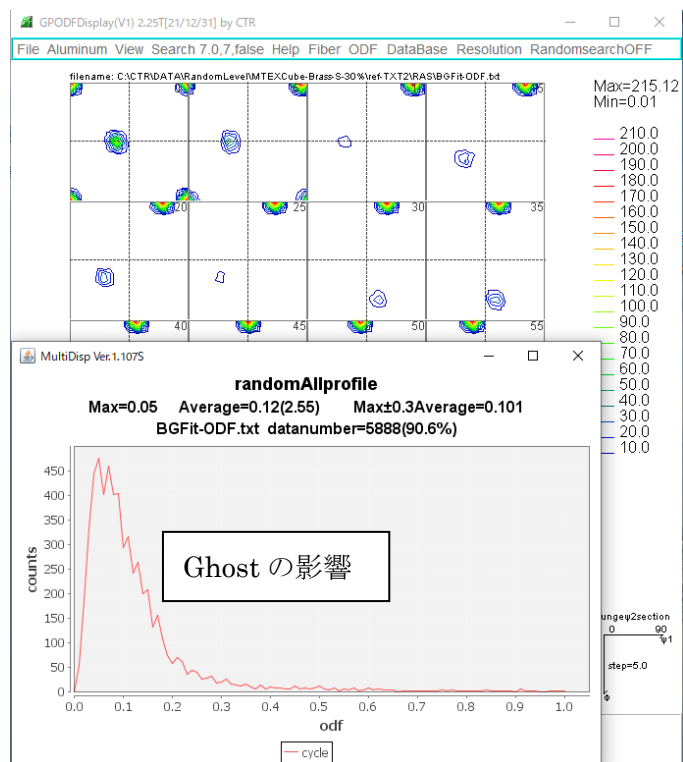
Step=0.05



0->1.0 Step=0.05

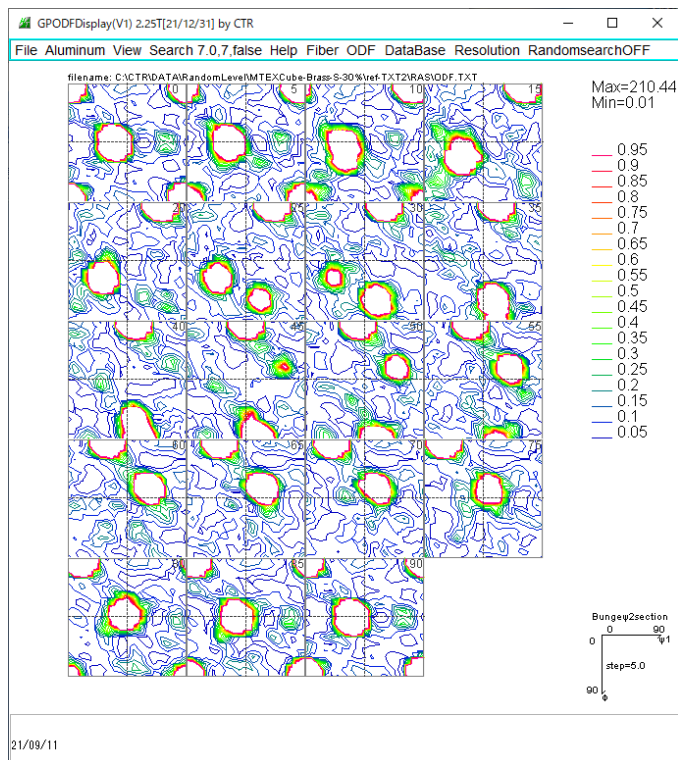
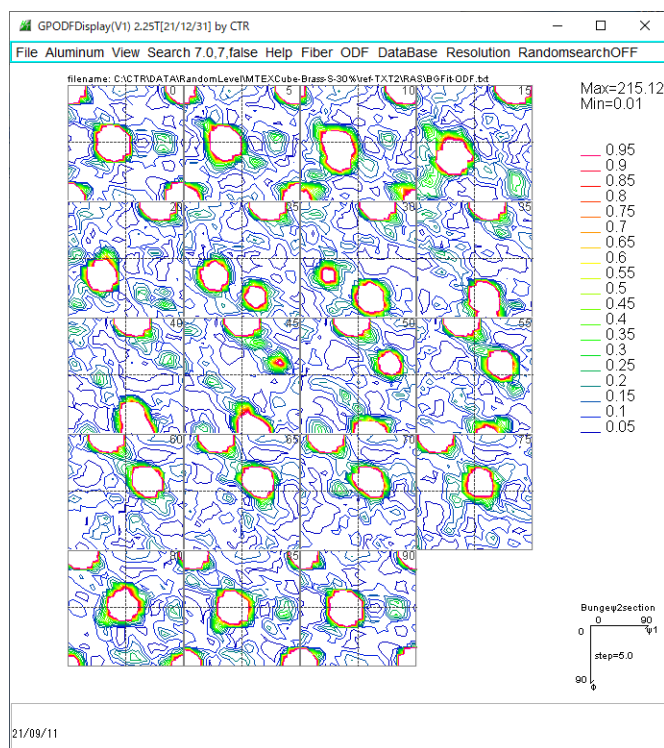


NewODF（暫定版）でODF計算し、GPODFDisplayでrandom評価  
WIMVモード（バックグランドフィット） WIMVモード（フィットなし）



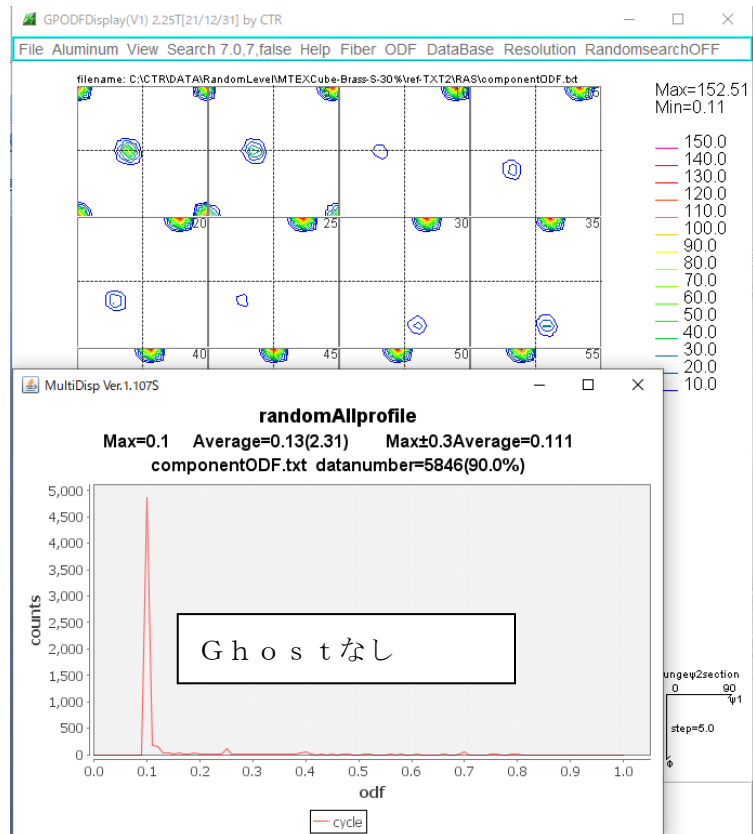
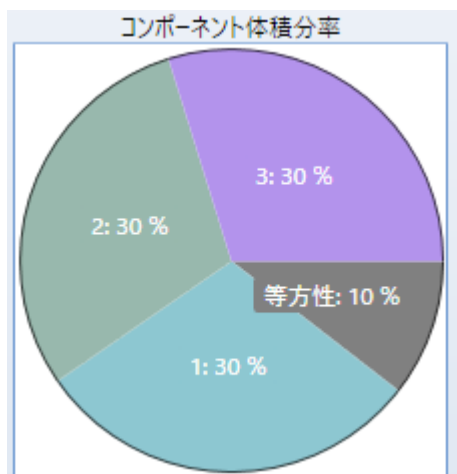
random=5% **Max=0.094** (BOX1000)  
0→1.0をstep=0.05

random=5% **Max=0.081** (BOX1000)



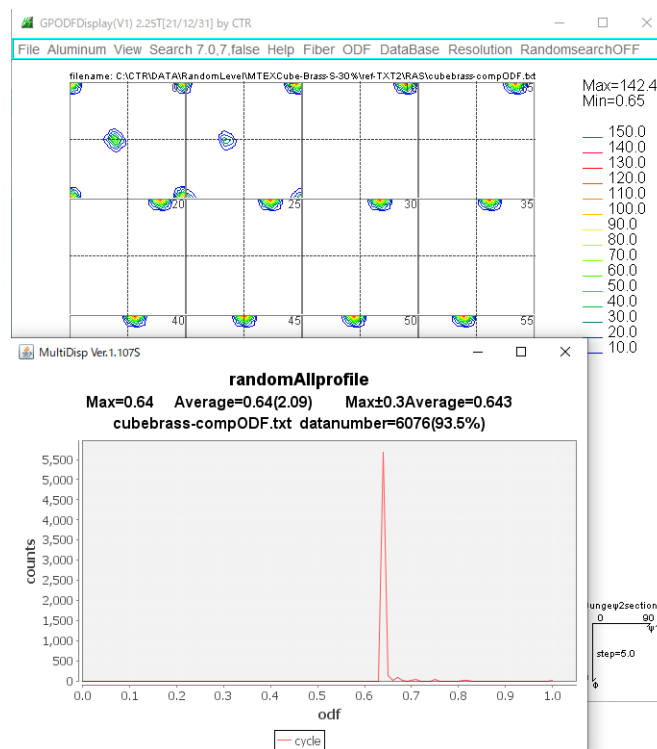
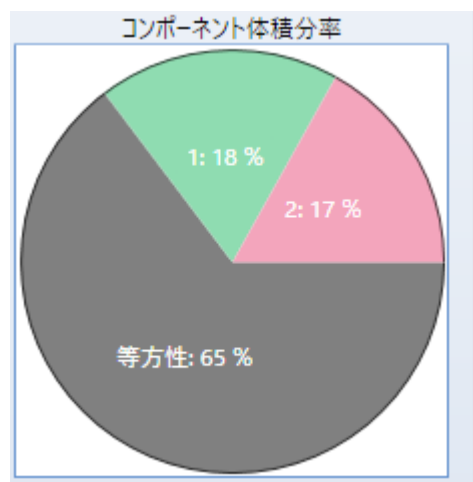


n e w ODFで全ての方位を指定できる場合  
コンポートモード



コンポーネントモデルで**全ての方位を指定できれば** r a n d o mを検出できる

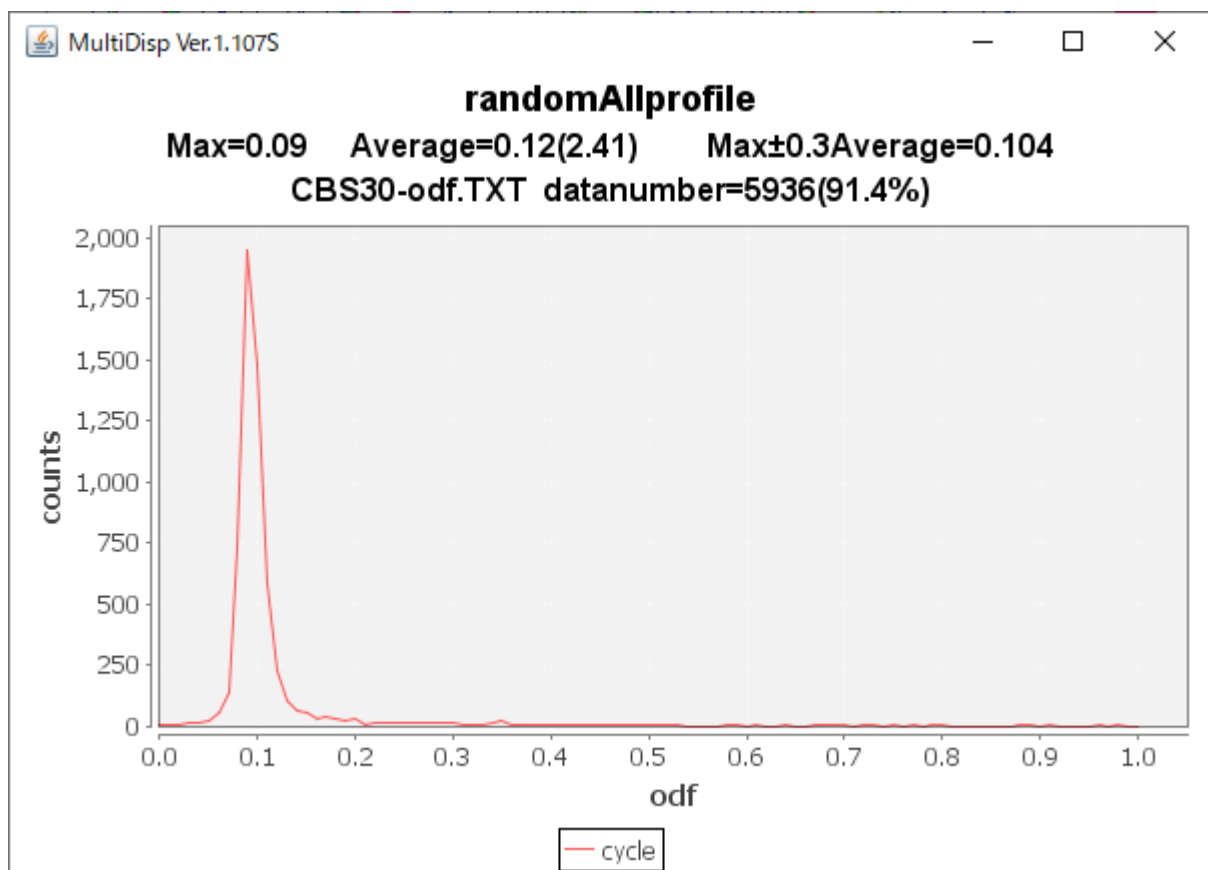
newODFでcube, brassを指定し、Sを指定しない場合  
(方位全てを指定できない場合)



モデル全て指定出来ないと、指定した方位計算が不安定になり（30%→17 or 18%）、  
(等方性+その他) が等方性になってしまう

## まとめ

配向材料に残留 random 成分の定量を行う場合、Ghost の影響が問題になります。  
今回の評価では、LaboTex、TexTools は Ghost が少なく、  
StandardODF, MTEX, newODF は Ghost が目立ちました。  
従来、間接法は Ghost が発生し、直接法は発生が少ないと考えていました。  
確かに Harmonic 法である StandardODF と MTEX は発生しているが  
直接法である WIMV で Ghost が目立ちます。(WINV は改良されている可能性あり)  
LaboTex は ADC で Ghost が少なく、random 評価の基準をしめています。  
VolumeFraction 解析を行った際の background の評価時  
background = random (等方性) + その他方位の判断として使えます。  
ODF 解析時の方位密度 1.0 以下を大切にしてください。



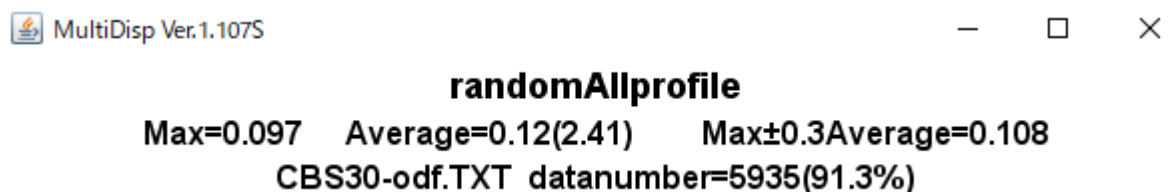
Max : random (等方性) 含有量 (Max \* 100%)

Average : 方位 1.0 以下の平均値 (全方位平均値)

Max±0.3Average : 最高位置±0.3の平均値 (Ghost の多い解析法の参考値)

datanumber : 1.0 以下のデータ数 (dnumber / (19 \* 19 \* 18))

Max を正確に求めるには Box 100 → Box 1000 で調べる



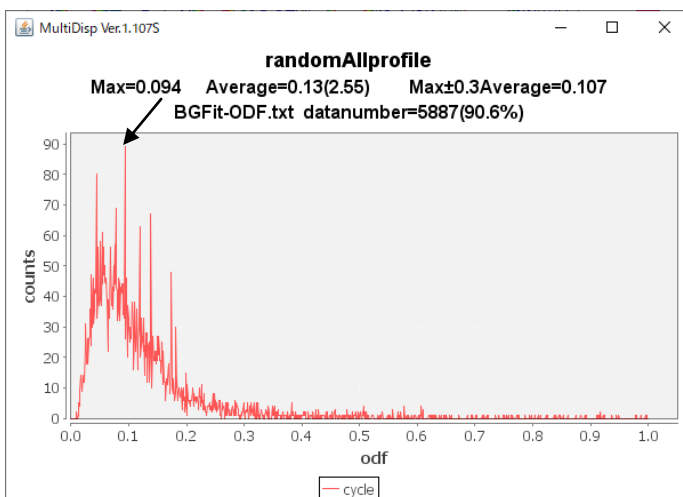
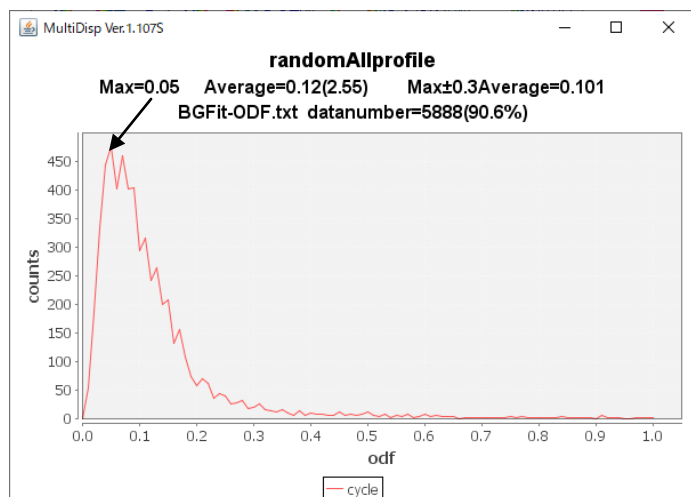
BOX は、1.0 以下の分解能を指定、逆数の分解能になります。

しかし、精度を上げると凸凹が多く見難くなります。

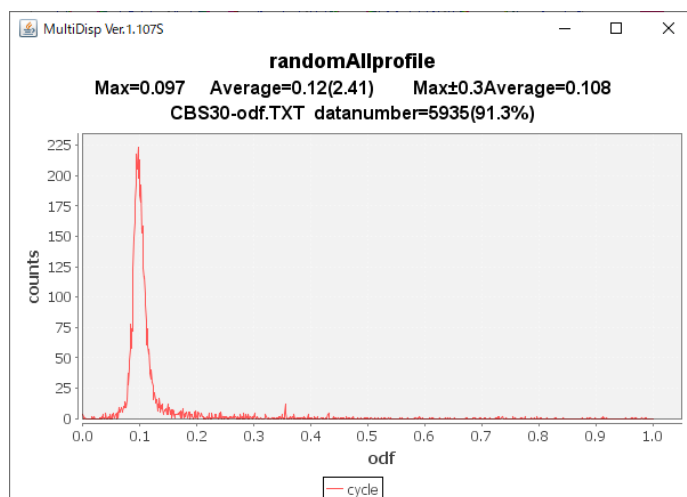
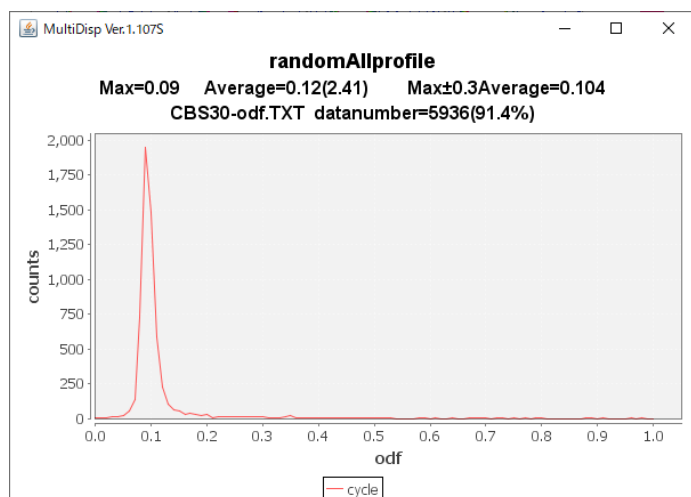
例えば、newODFで大きく変化したデータ

newODF BOX100

BOX1000



LaboTex



randomの判断基準は最大ピークに対し、左右が急激に落ち込むピークの検出です。

Ghostの多い解析法では、分解能を上げると判断できないのでBOX100で評価を行った。

Maxは四捨五入ではなく、切り捨てて表示を行っています。