

各種ODF解析の random レベル比較

ODFの最小値は、random レベルであるが、ODF図が急激に変化している場合オーバーシュートにより本来の値より低めに表示される。

この対策として、GPODFDisplayソフトウェアにrandom レベルを計算する機能を追加しました。

random レベルはrandom のVolume Fraction (%) を示します。

例えばMin=0.34であれば、random VF%=34%になります。

又、ODFがVolume Fraction 結果から計算された場合、

random VF%=Other VF% (random を含むOther) になります。

概要

ODF解析結果のMinレベルは、randomレベルを表すことが知られている。

前回Hexagonalで比較したがStandardODFも含めるためCubicで比較する。

LaboTex, MTEX, StandardODF、TexToolsで比較する

比較データ

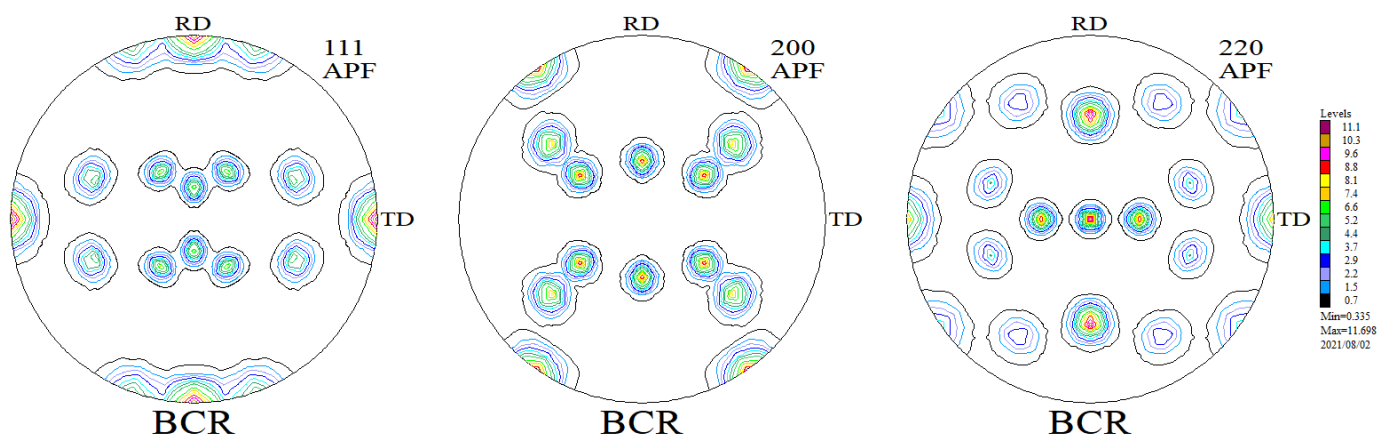
Brass、copper、randomとし、VolumeFractionをそれぞれ、33%、33%、34%とする。

randomレベル探索は、GPODFDisplay (Ver 2.21)で行う

入力データ

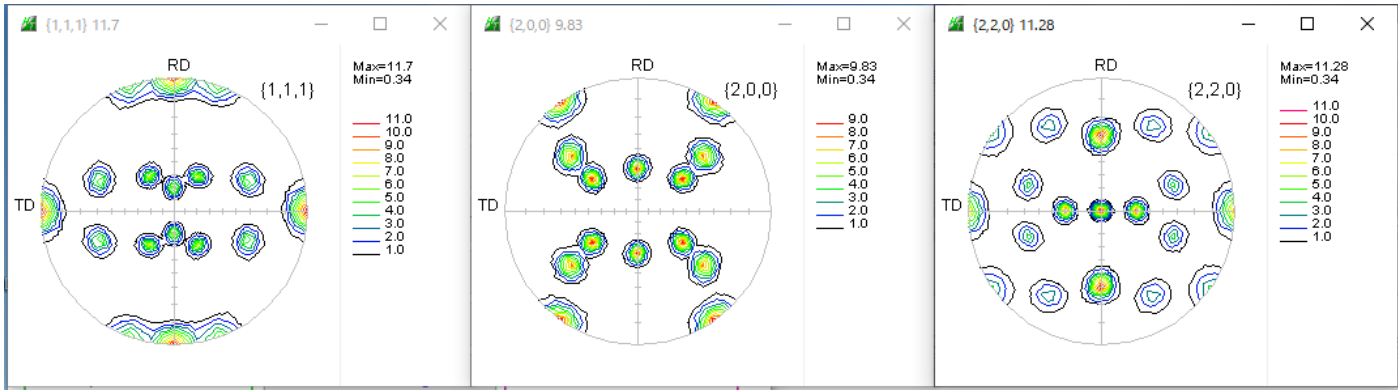
No	Texture Component	On	Distribution	FWHM ϕ_1	FWHM ϕ	FWHM ϕ_2	Volume Fraction
1	{ 1 1 0 } < 1 -1 2 > brass	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	33 %
2	{ 1 1 2 } < 1 -1 1 > copper	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	33 %
3	{ 2 3 1 } < 3 -4 6 > S-2	<input type="checkbox"/>	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	{ 1 1 2 } < 1 -1 1 > copper	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
6	{ 1 2 3 } < 4 -1 2 > R	<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	{ 1 1 0 } < 0 0 1 > goss	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
9	{ 1 0 1 } < 5 2 5 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
10	{ 0 1 3 } < 1 0 0 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %

再計算極点図



再計算極点図をExportし、各ODFで比較する。

Exportされた極点図



ODF入力データ作成

PFtoODF3 8.52T[21/12/31] by CTR

File Option Symmetric Software Data Help

Lattice constant

Material Aluminum.txt

Structure Code(Symmetries after Schoenflies) cif 7 - O (cubic)

a 1.0 <=b 1.0 <=c 1.0 alpha 90.0 beta 90.0 gamm 90.0

Initialize

Start

getHKL<-Filename

AllFileSelect

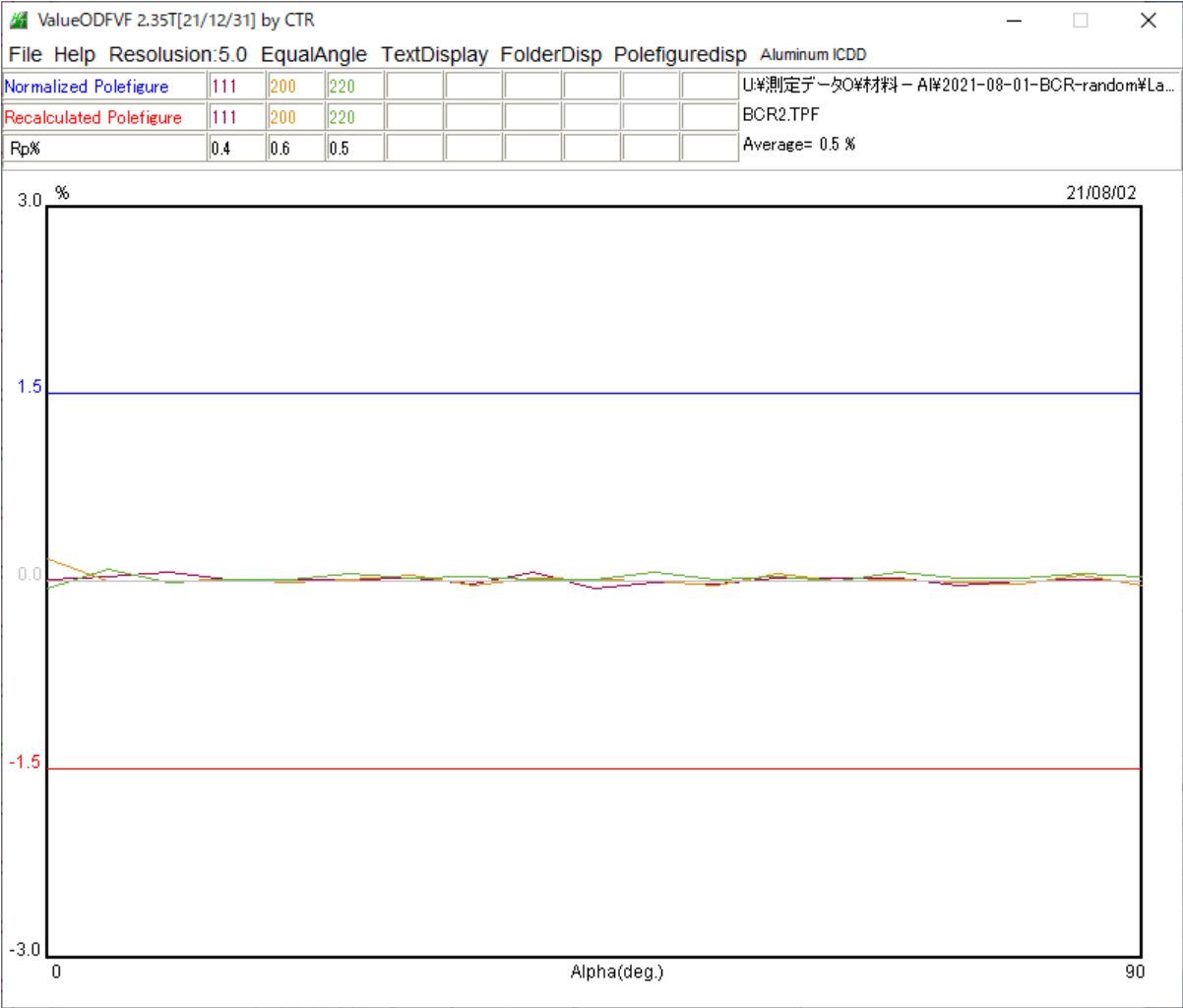
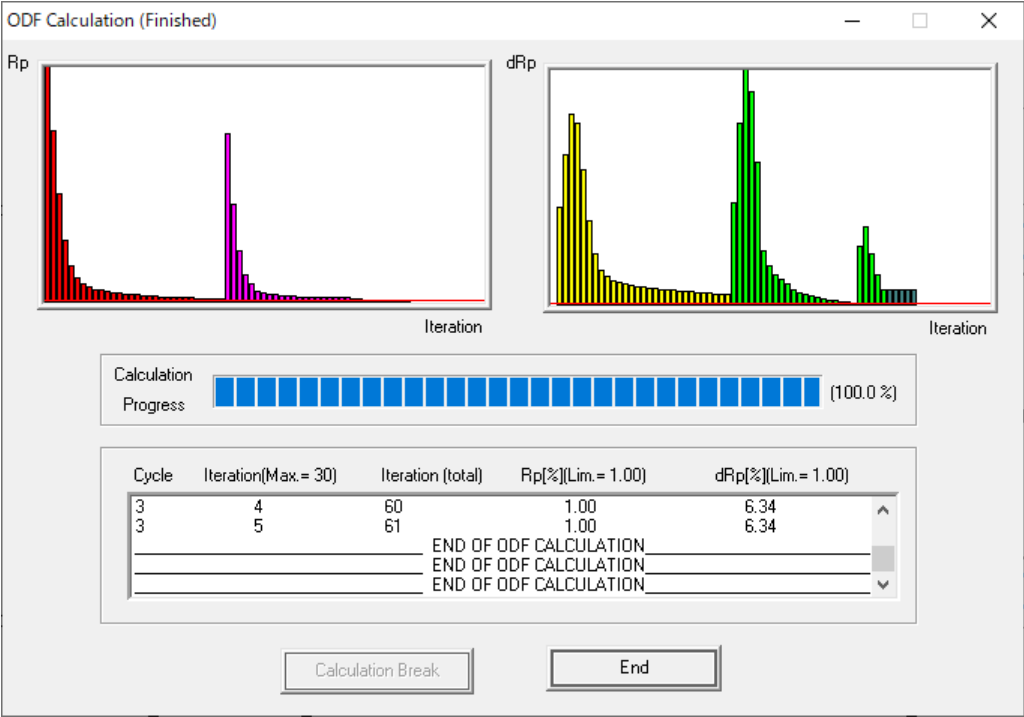
PF Holder

U#測定データO#材料 - Al#2021-08-01-BCR-random

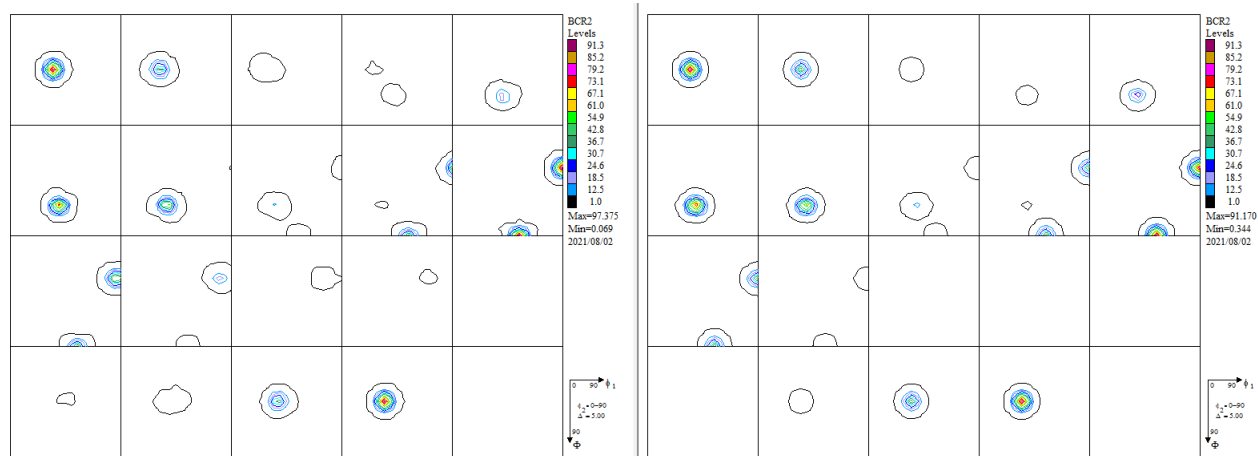
PF Data

SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens))	h,k,l	2Theta	Alpha scope	AlphaS	AlphaE	Select
111_labotexCCW-rp_2.TXT	1,1,1	0.0	0.0->90.0	0.0	90.0	<input checked="" type="checkbox"/>
200_labotexCCW-rp_2.TXT	2,0,0	0.0	0.0->90.0	0.0	90.0	<input checked="" type="checkbox"/>
220_labotexCCW-rp_2.TXT	2,2,0	0.0	0.0->90.0	0.0	90.0	<input checked="" type="checkbox"/>
	2,1,0	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>

LaboTeX解析結果



VF%の結果

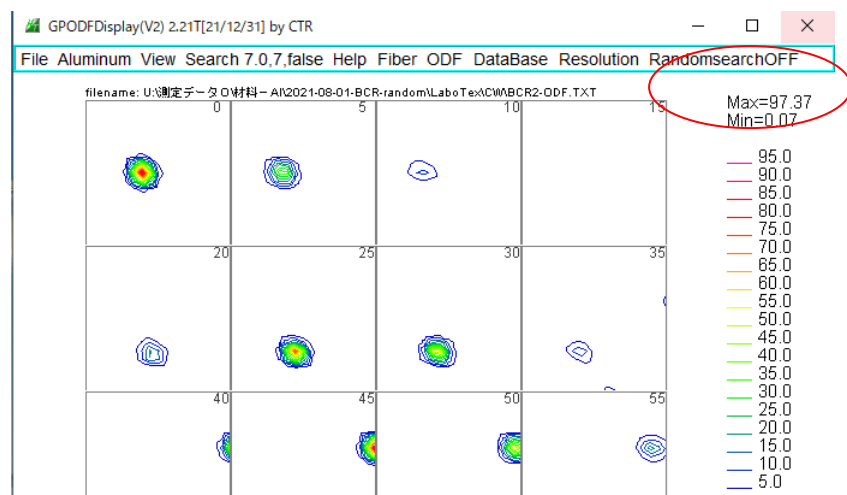


Max=97.375
Min=0.069
2021/08/02

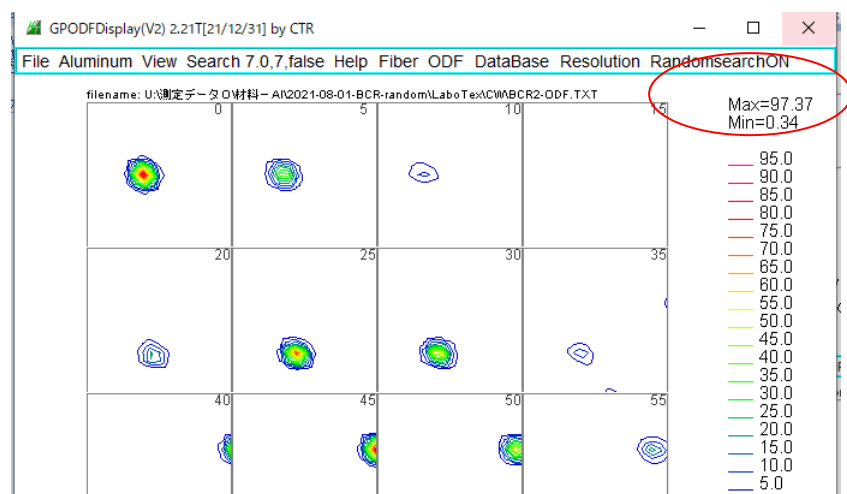
Max=91.170
Min=0.344
2021/08/02

極点図から計算したODF図では、random レベルより低い値になっています。

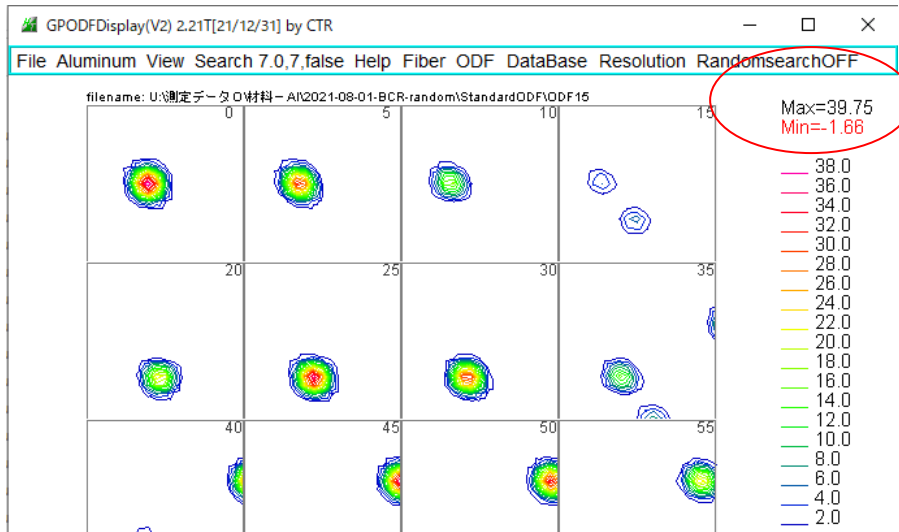
ODF 図の Export から GPODFDisplay で random レベルの探索を行う。



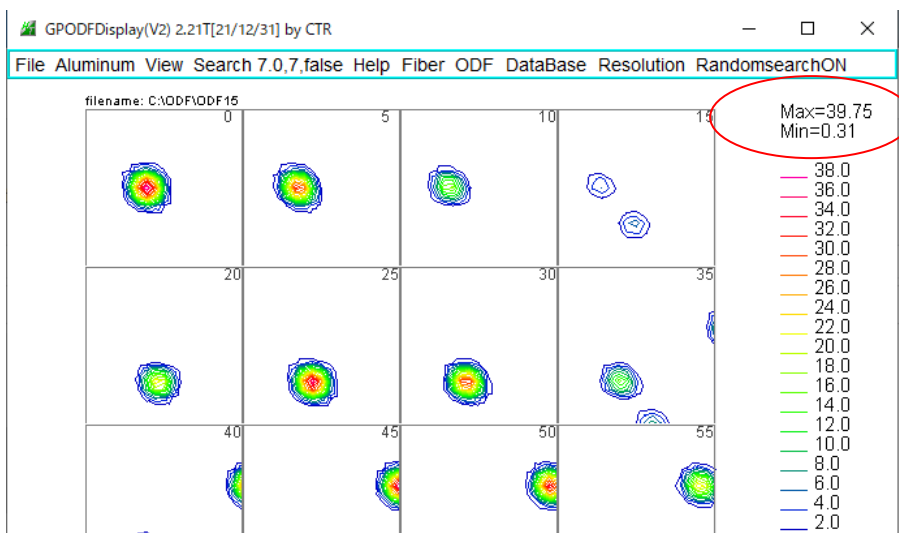
探索結果



Standard ODF



探查結果



search結果randomレベルが-1.66から0.31に改善されます。
正解は0.34であるが、妥当な値になります。

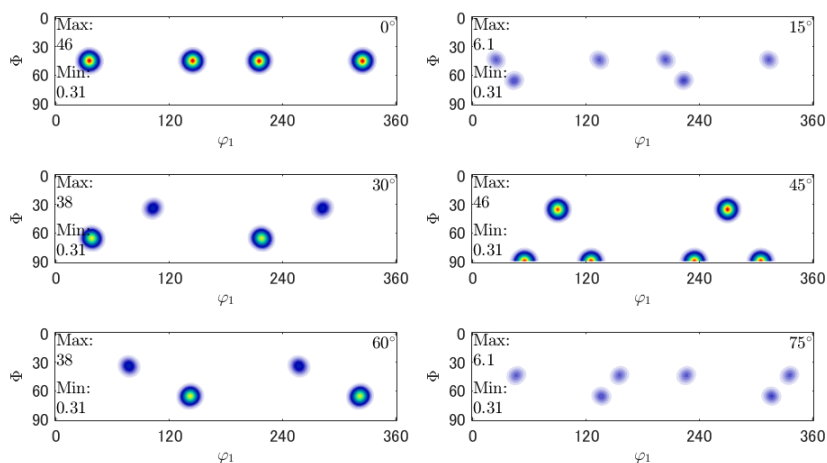
MTE X

Radially symmetric portion:

kernel: de la Vallee Poussin, halfwidth 5°

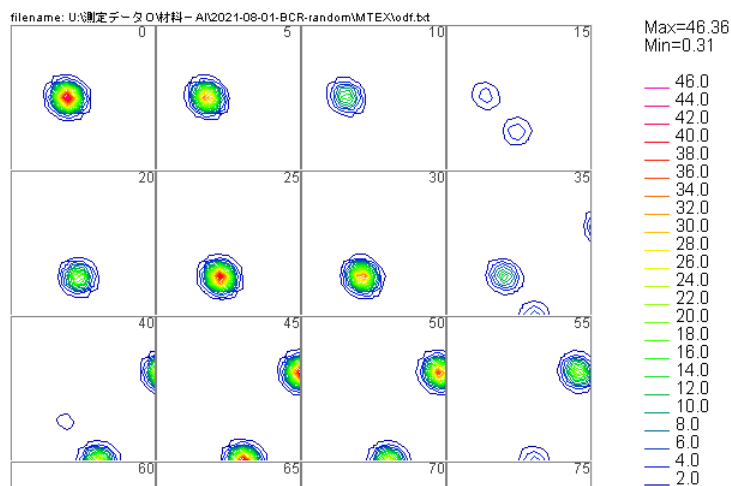
center: 4903 orientations, resolution: 5°

weight: 0.88542



GPODFDisplay(V2) 2.21T[21/12/31] by CTR

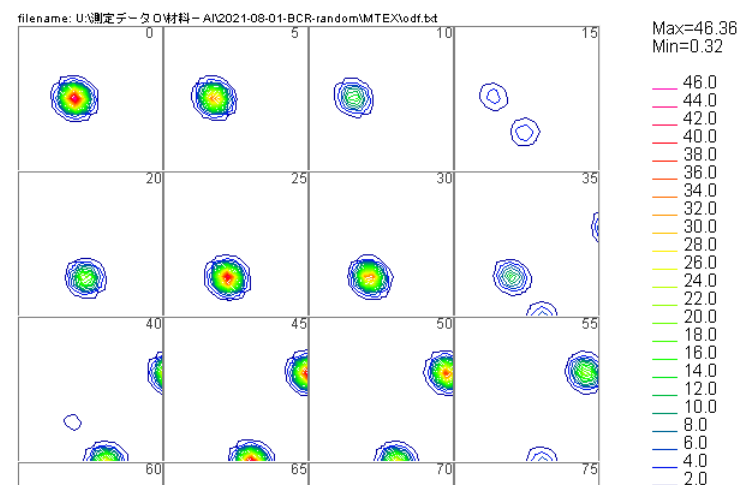
File Aluminum View Search 7.0,7,false Help Fiber ODF DataBase Resolution RandomsearchOFF



探查結果

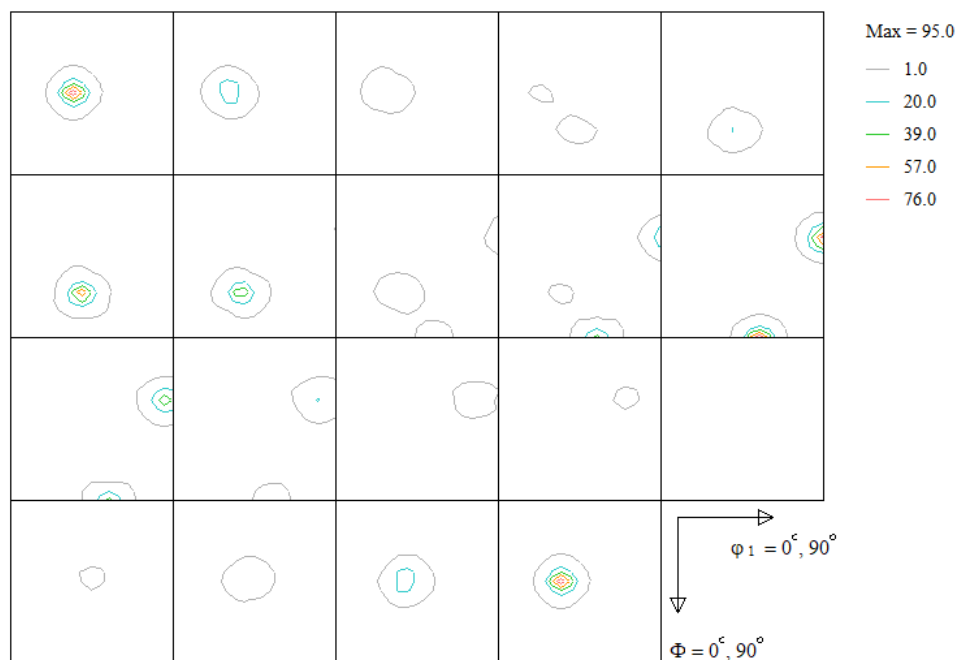
GPODFDisplay(V2) 2.21T[21/12/31] by CTR

File Aluminum View Search 7.0,7,false Help Fiber ODF DataBase Resolution RandomsearchON

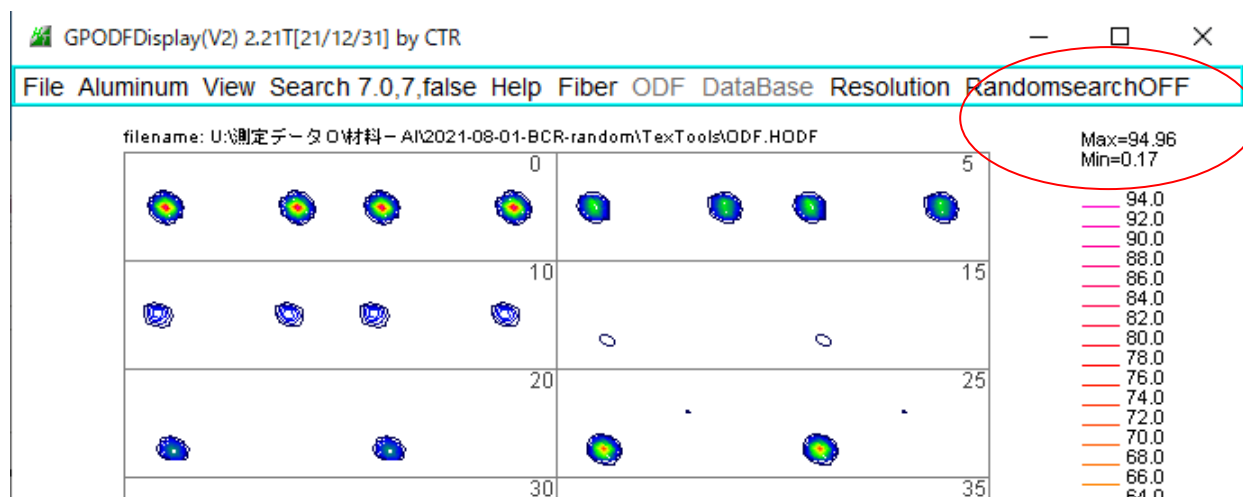


randomレベル0.31が探查によって、0.32、正解は0.34

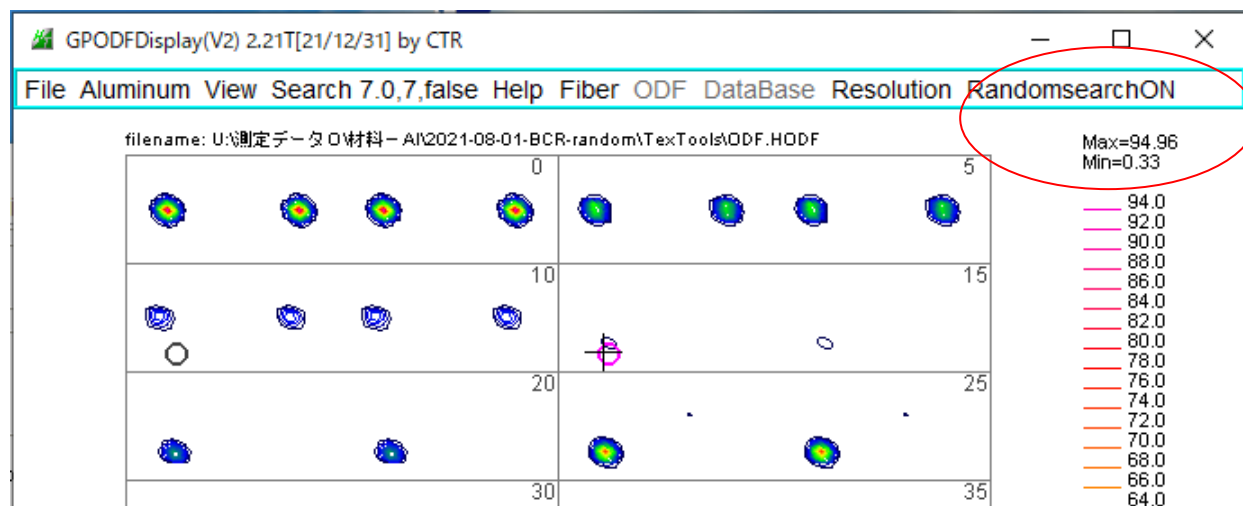
TexTools



CTRで表示

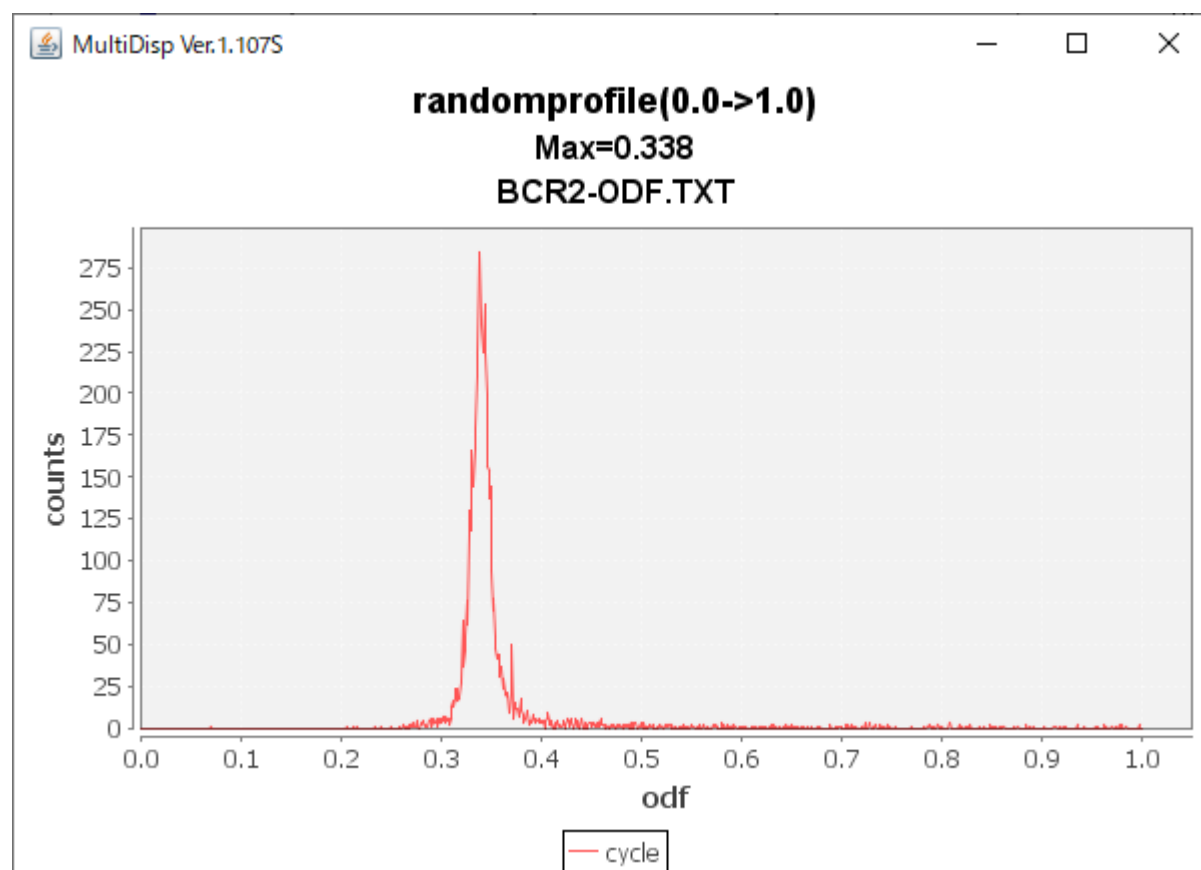


探索結果

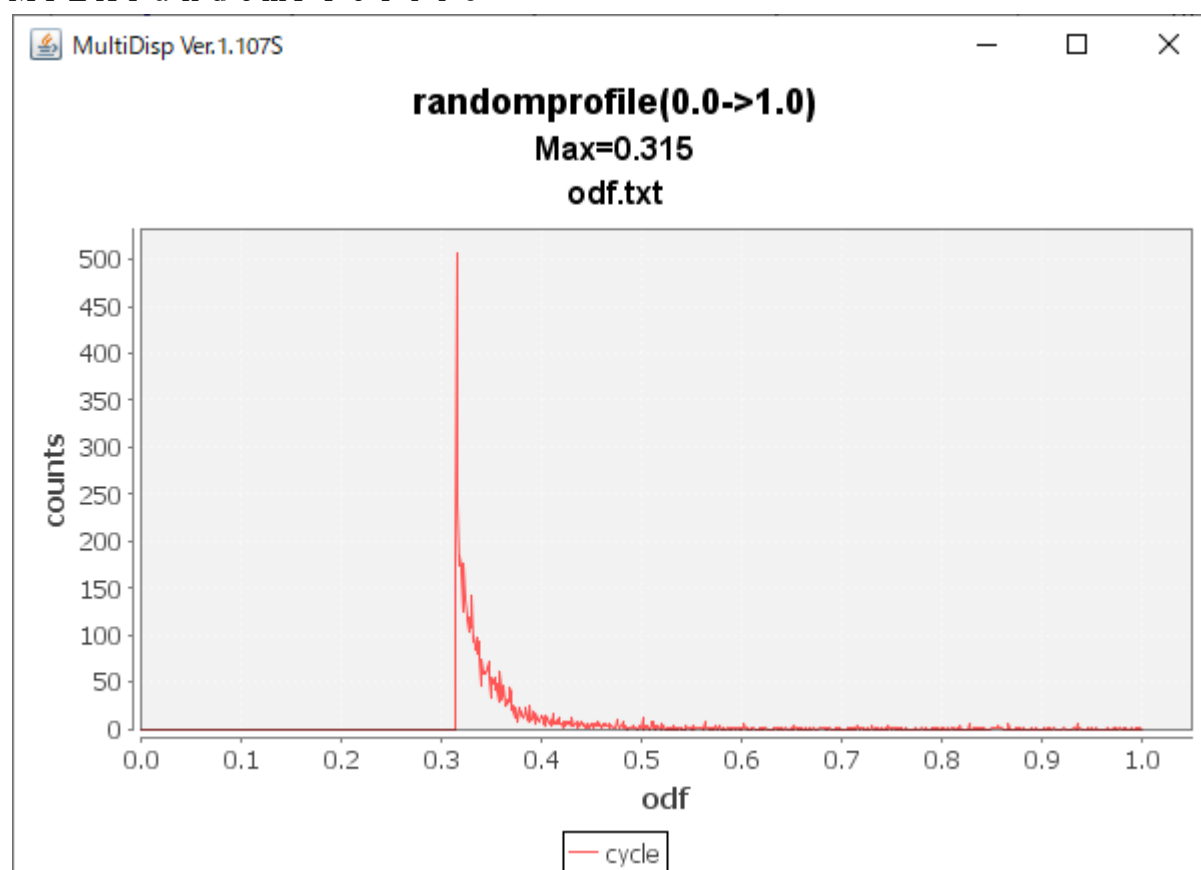


探索で random レベル 0.33 が表示されます。

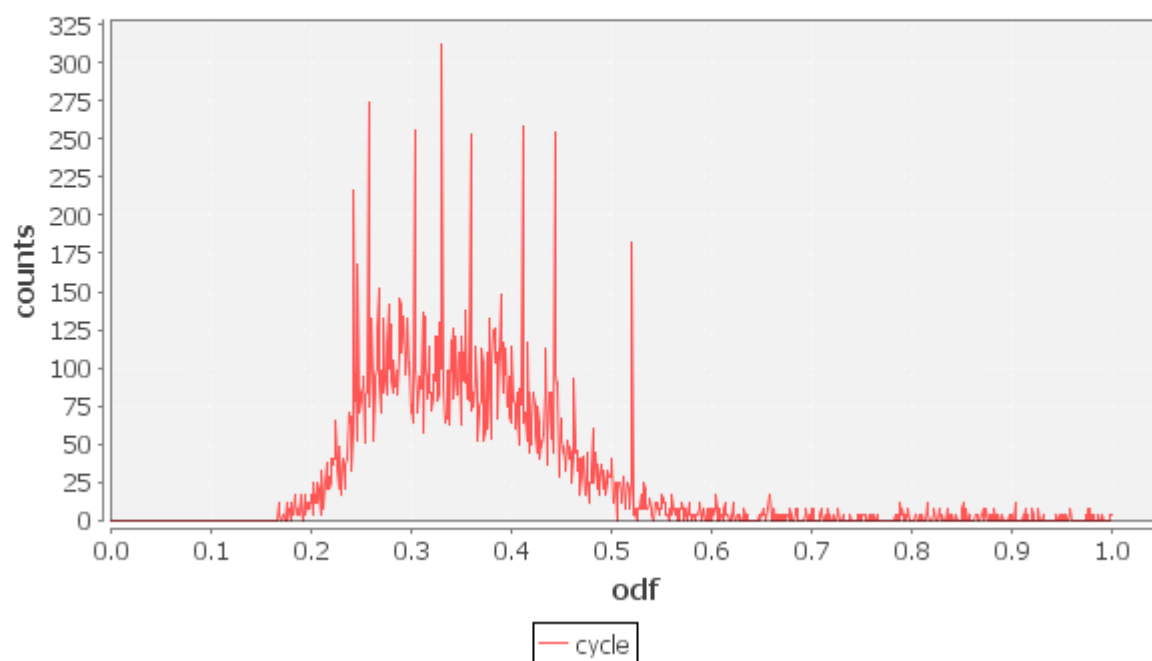
LaboTex randomProfile



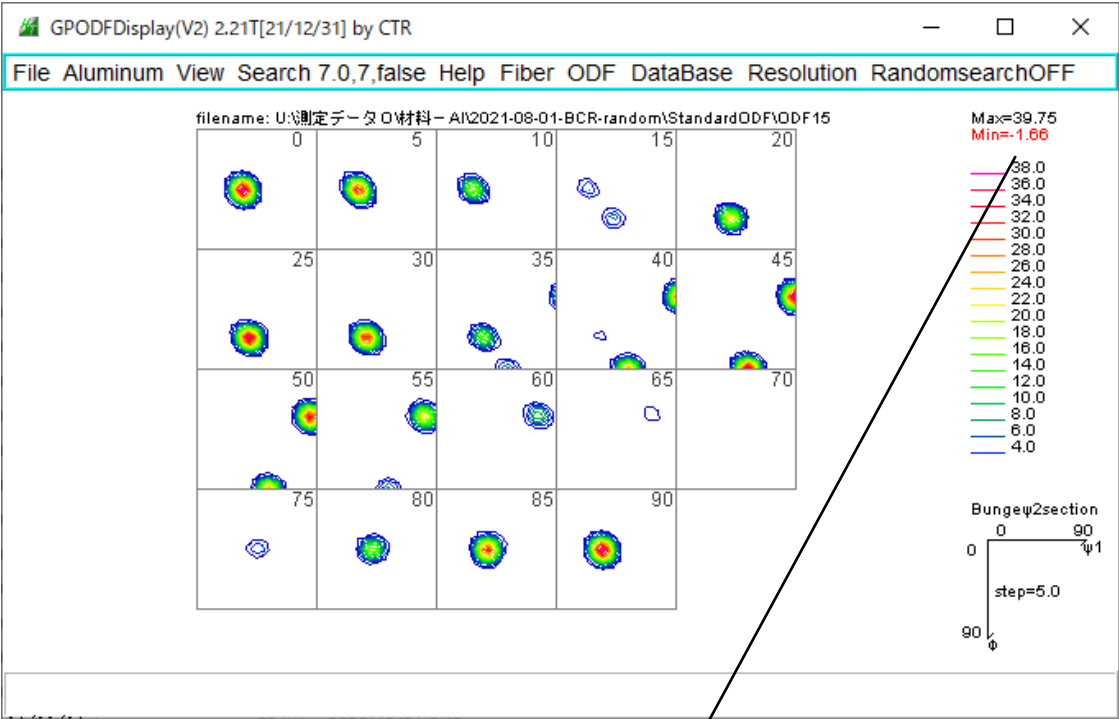
MTEx randomProfile



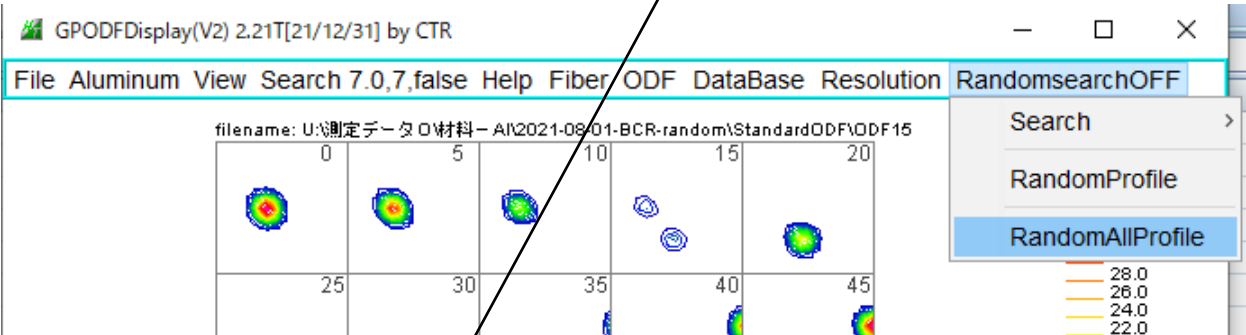
TexTools randomProfile

randomprofile(0.0->1.0)**Max=0.33****ODF.HODF**

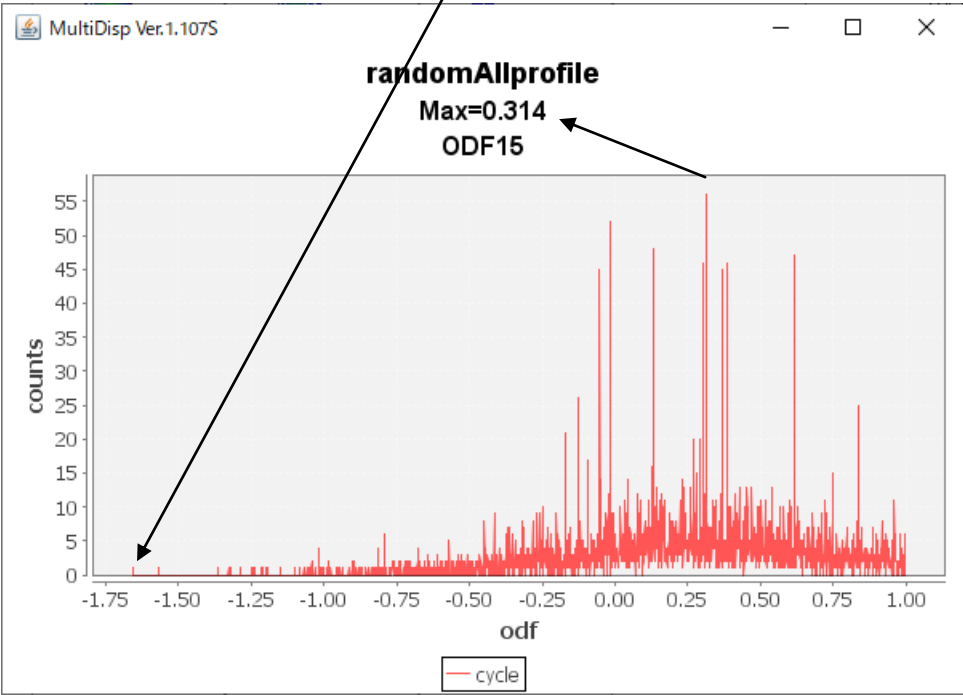
S t a n r a d O D F の r a n d o m P r o f i l e



本来 r a n d o m レベルは 1. 0 以下で 0 以上であるが、S t a n d a r d O D F の最小値は マイナスを示している。



方位密度 1. 0 以下を調べてみると



StandardODF のような H e r m o n i c 法では、アンダーシュートのマイナス方位が発生する。