

ODF図から r a n d o mの定量をシュミレーションと実データ解析









2021年08月11日

HelperTex Office

概要

ODFの方位として代表的な方位をL a b o T e xで作成しr a n d o mレベルのシュミレーションを行う。

データ

 brass-FW10-20%.TXT	2021/08/10 18:54	テキスト文書	275 KB
 brass-FW20-20%.TXT	2021/08/10 18:54	テキスト文書	275 KB
 copper-FW10-20%.TXT	2021/08/10 18:53	テキスト文書	275 KB
 copper-FW20-20%.TXT	2021/08/10 18:52	テキスト文書	275 KB
 goss-FW10-20%.TXT	2021/08/10 18:55	テキスト文書	275 KB
 goss-FW20-20%.TXT	2021/08/10 18:58	テキスト文書	275 KB
 s-FW10-20%.TXT	2021/08/10 18:53	テキスト文書	275 KB
 s-FW20-20%.TXT	2021/08/10 18:53	テキスト文書	275 KB

方位に対してFWHMとVolumeFractionを与える。

b r a s s - F W 1 0 - 2 0 % . t x t では

b r a s s 方位のFWHM=10deg、VF%=20%を表す。

残りがr a n d o mでVF%=80%である。

r a n d o mは、本来最小値であるが、オーバーシュートやばらつきが発生し、一致しないことがある。

5度ステップのODFでは18x19x19のデータ点に対しr a n d o m位置は

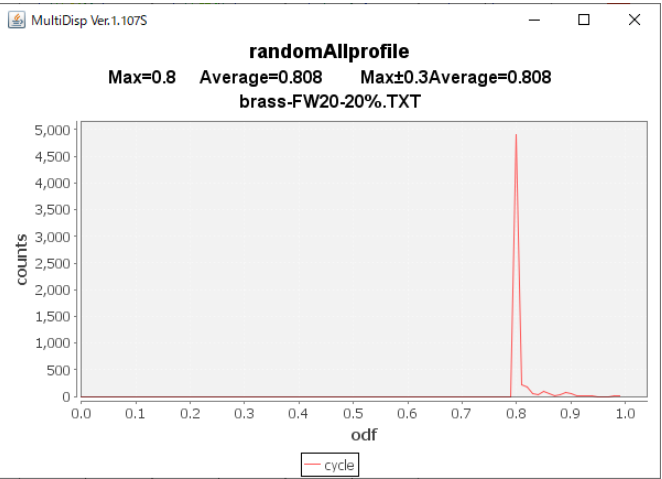
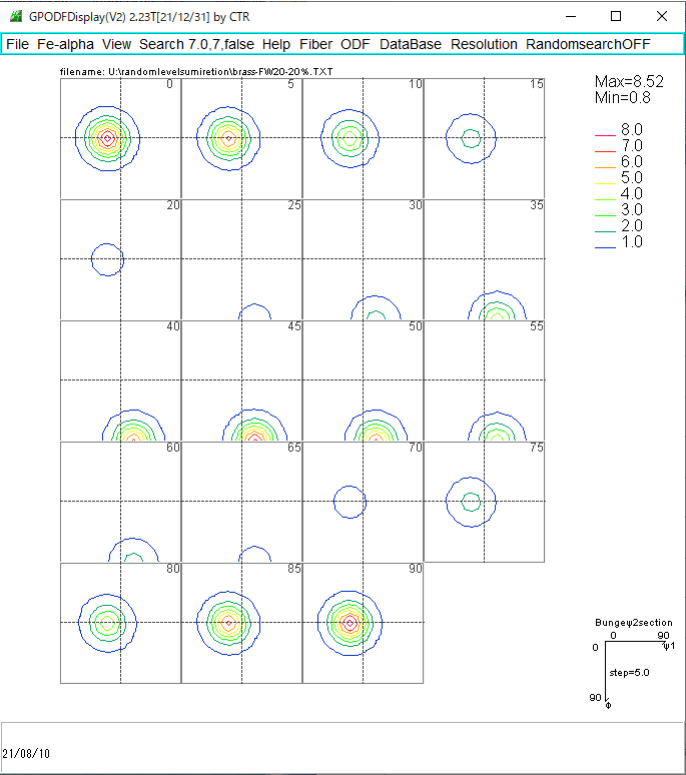
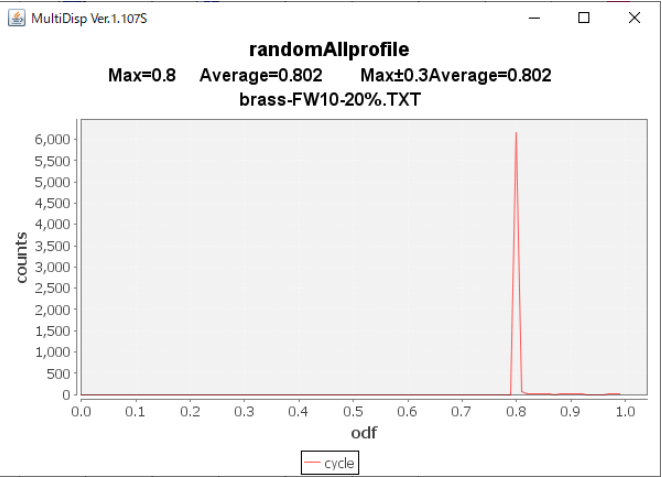
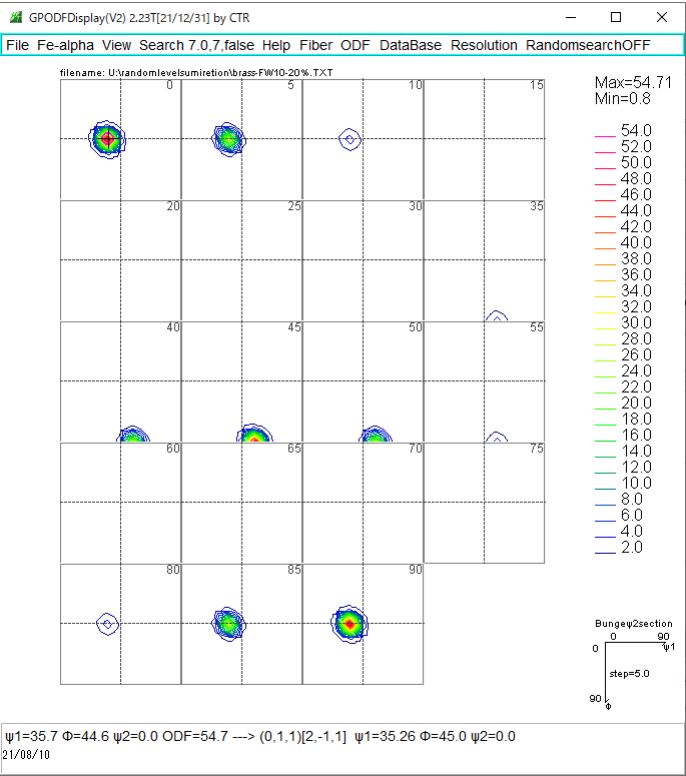
数多く存在する。よって、方位密度1.0以下にピーク状に現れると考えられる。

全てr a n d o mであれば、方位密度は1.0、20%が他の方位であればr a n d o m方位は0.8に下がり、その0.8が80%で計算される。

検証結果

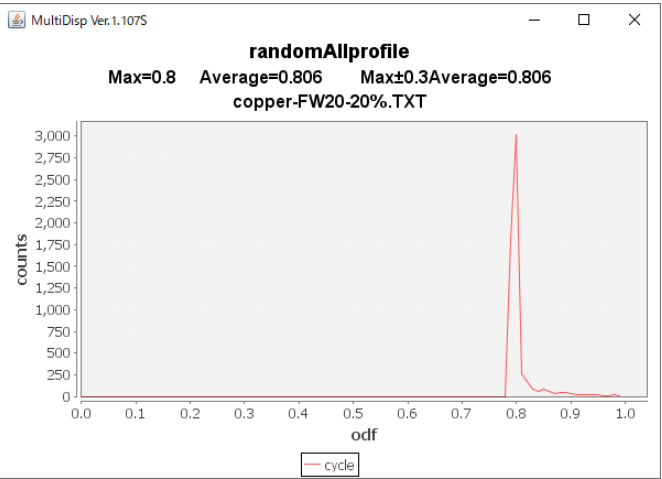
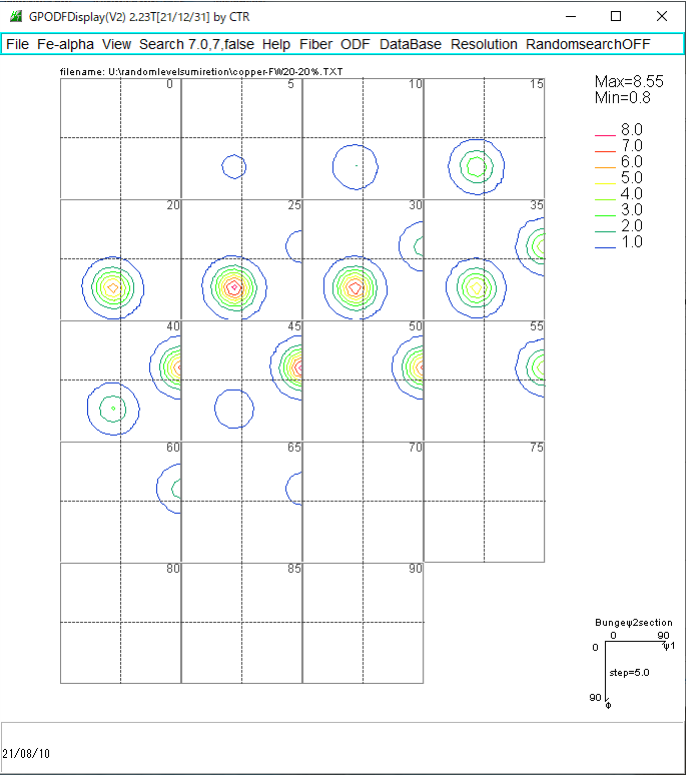
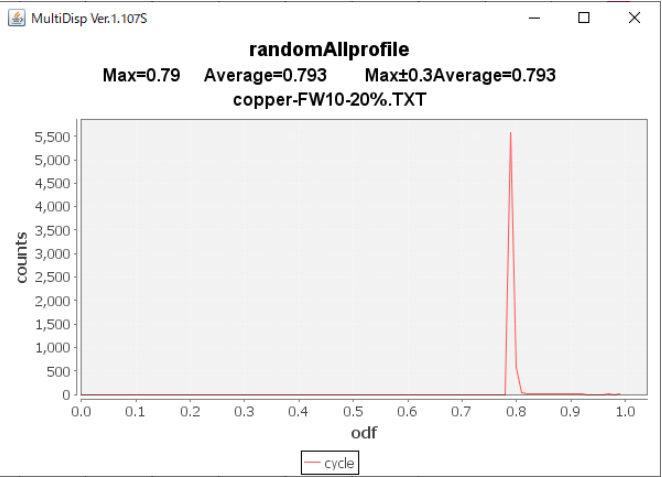
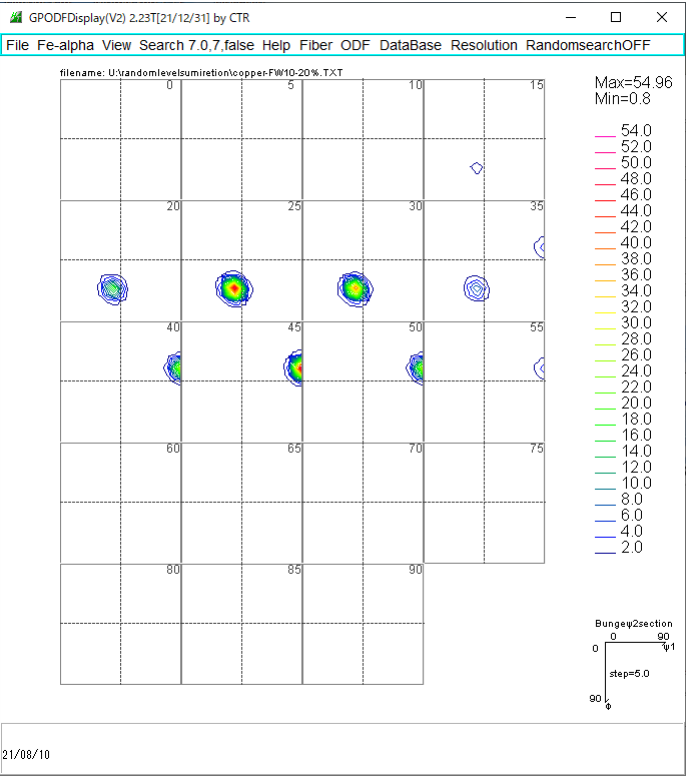
L a b o T e xでは他のODFに比べ、r a n d o mレベルがシャープに計算され正確なr a n d o m%が得られます。

brass 方位



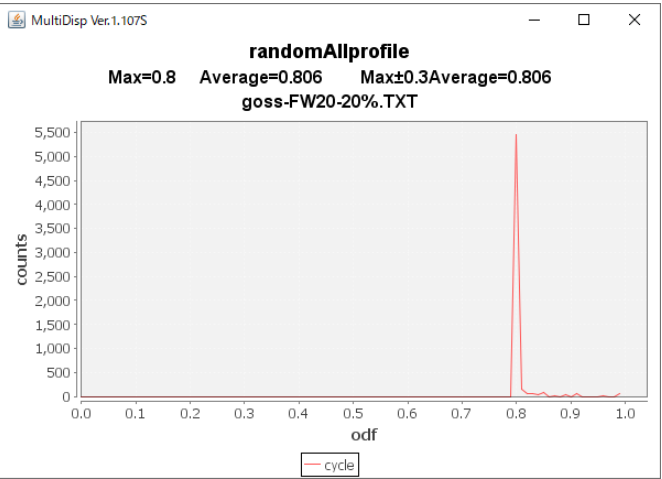
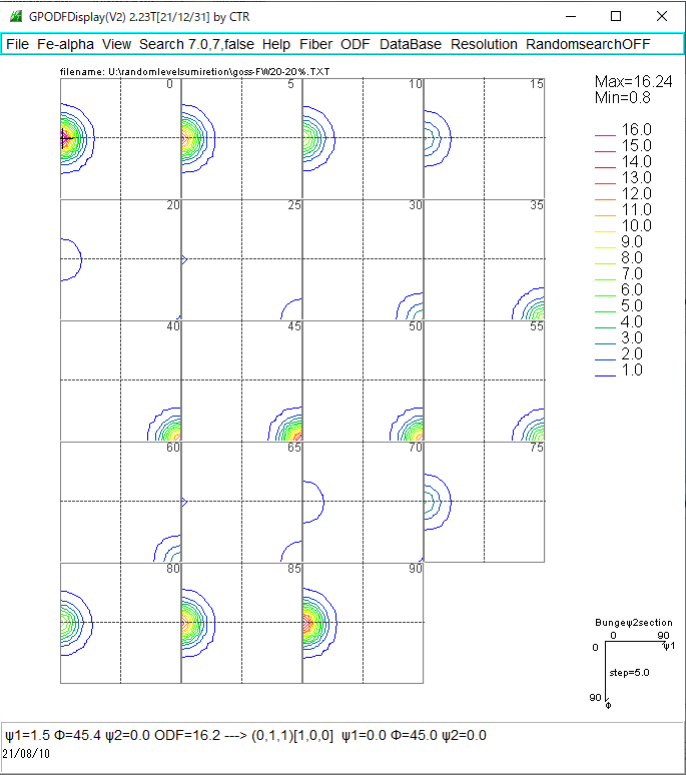
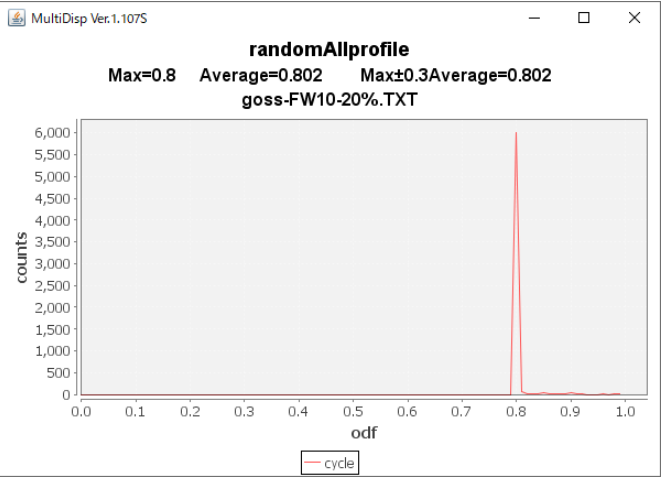
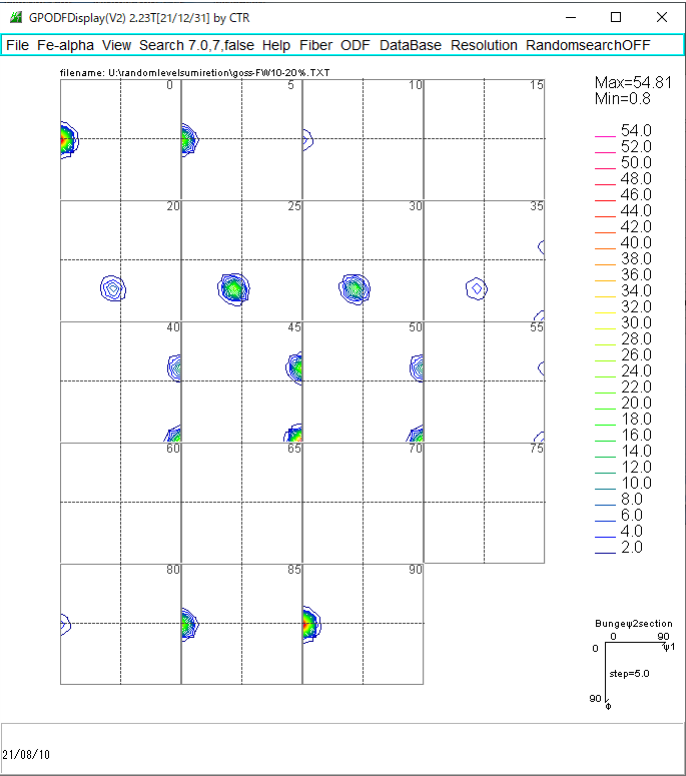
Brass 方位 VF % = 20 % では FWHM を変えると Max 方位密度は変わるが最小値は変わらず random level = 0.8 → random = 80 % と考えられます。

c o p p e r 方位



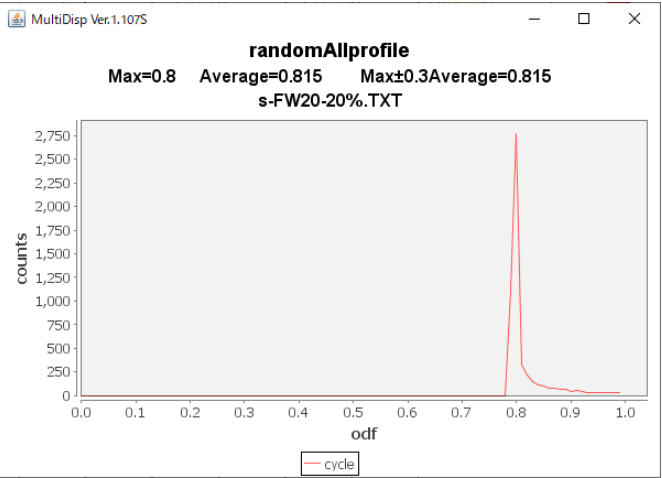
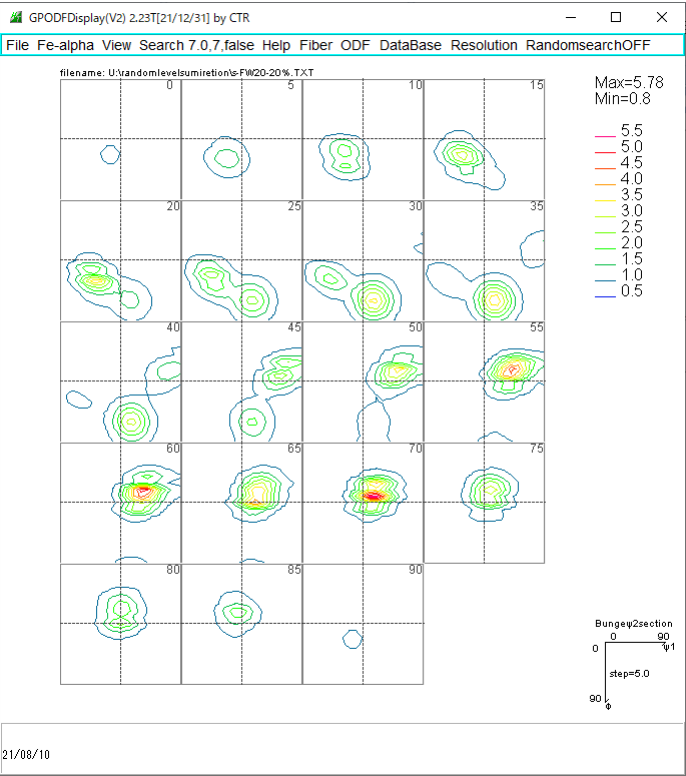
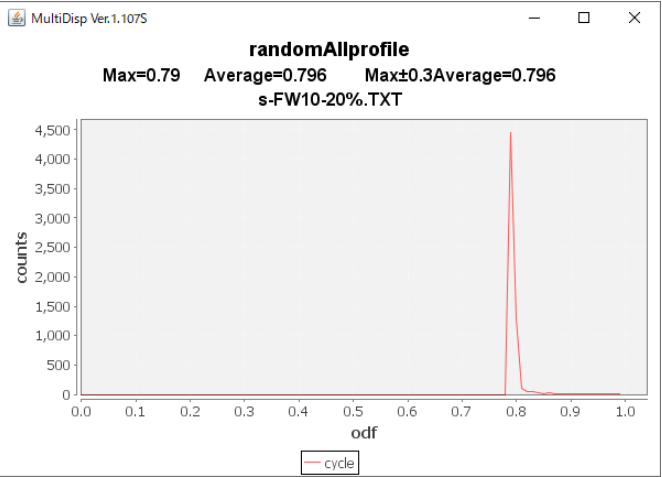
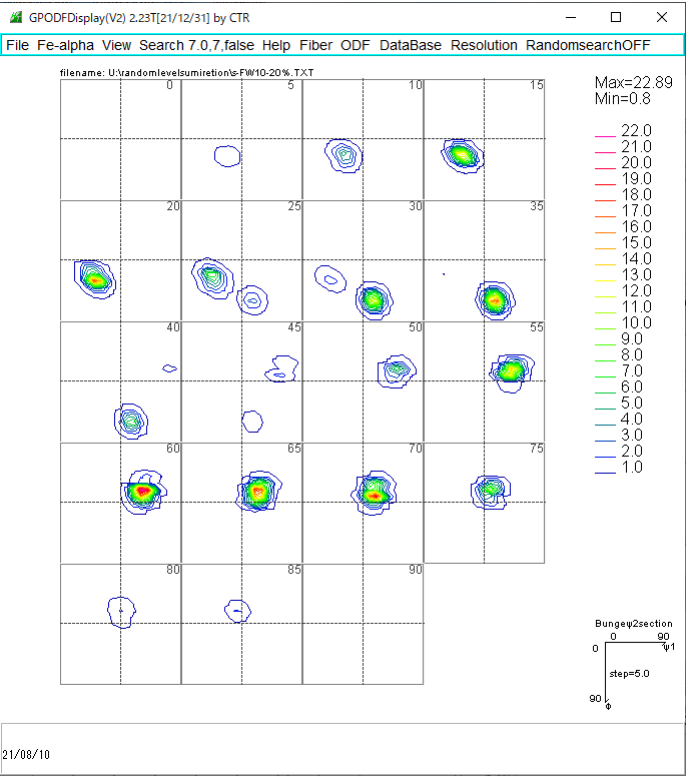
同じように r a n d o m = 8 0 % が得られます。

g o s s 方位



r a n d o m = 8 0 % が得られます。

S 方位



random=80%が得られます。

M T E Xでc o p p e r 2 0 %の極点図作成

```
cs = crystalSymmetry('cubic')
```

```
ss = specimenSymmetry('orthorhombic')
```

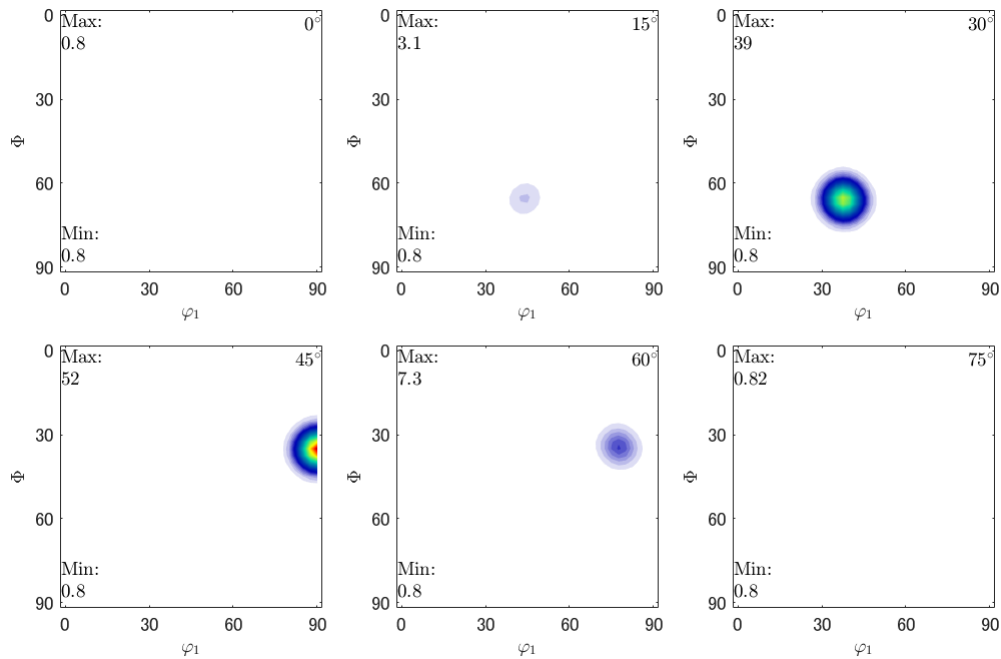
```
ori=orientation.byMiller([1,1,2],[-1,-1,1],cs,ss)
```

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

```
odfc=unimodelODF(cs,ori)
```

```
random=uniformODF(cs,ss)
```

```
odf=0.2*odfc+0.8*random
```

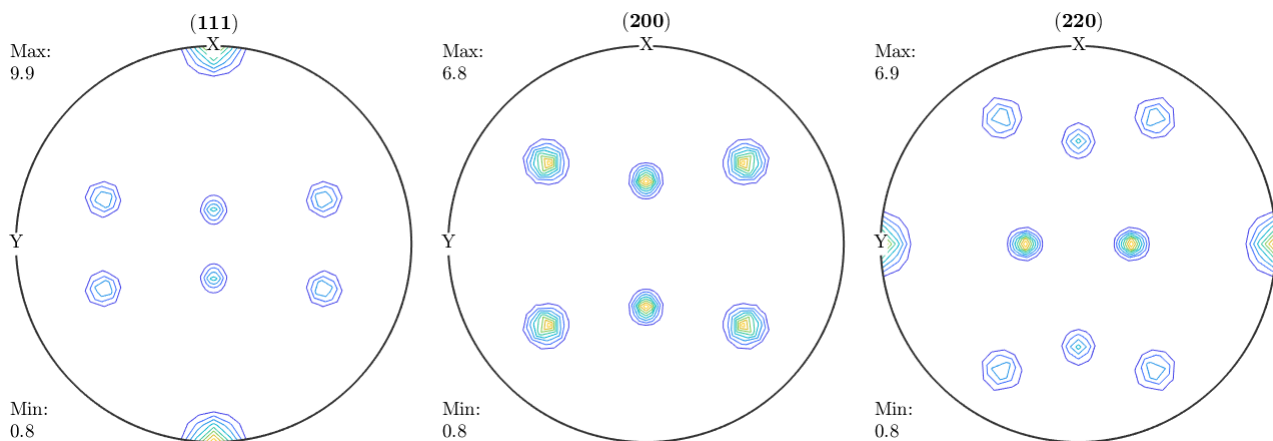


Min=0.8 random=80%が得られる。

```
h = { Miller(1,1,1,cs), Miller(2,0,0,cs), Miller(2,2,0,cs) }
```

```
rpf=calcPoleFigure(odf,h)
```

```
plot(rpf,'contour','projection','eangle')
```



この極点図をE x p o r t し、各種ODFで比較する。



PFtoODF3 8.53T[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:\randomlevelsumiretion\MTEX

PF Data

SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens))	h,k,l	2Theta	Alpha scope	AlphaS	AlphaE	Select
111_txt-rp_2.TXT	1,1,1	0.0	0.0->90.0	0.0	90.0	<input checked="" type="checkbox"/>
200_txt-rp_2.TXT	2,0,0	0.0	0.0->90.0	0.0	90.0	<input checked="" type="checkbox"/>
220_txt-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"/>
	2,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	3,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	4,0,0	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	3,3,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	4,2,2	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	5,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	5,2,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	5,3,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>

Comment 111_txt-rp_2.TXT 200_txt-rp_2.TXT 220_txt-rp_2.TXT

Symmetric type Full

CenterData

☒ Average

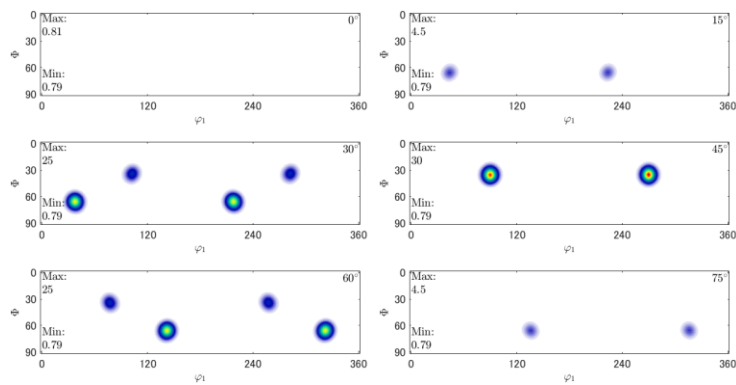
Epf file save

Labotex(EPF),popLA(RAW) filename

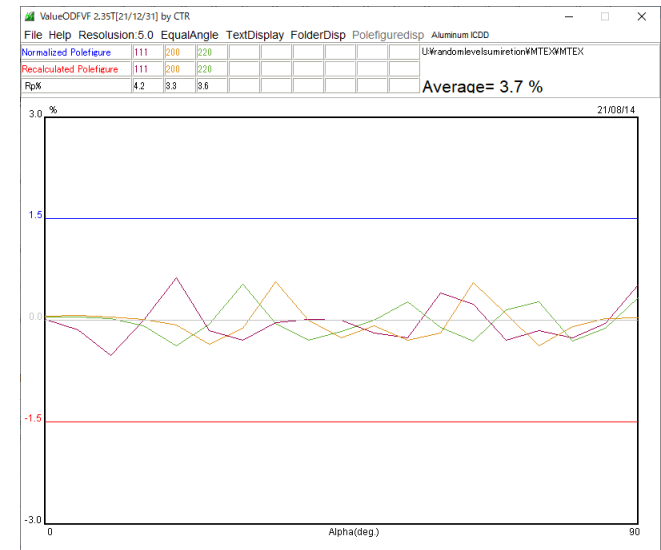
MTEX

MTE Xで解析

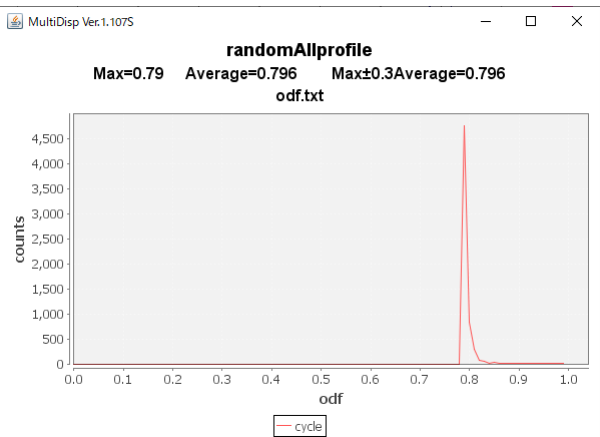
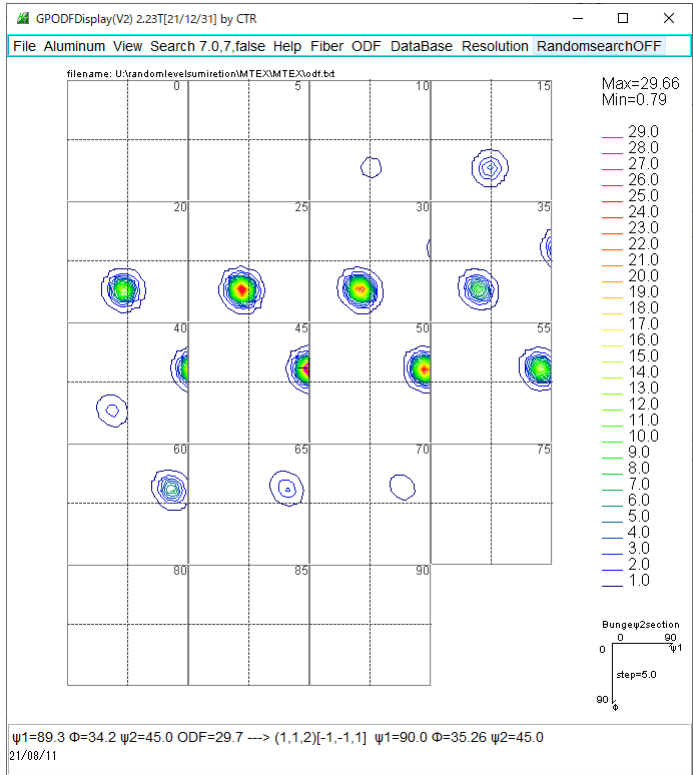
Radially symmetric portion:
kernel: de la Vallee Poussin, halfwidth 5° |
center: 4903 orientations, resolution: 5°
weight: 0.20855



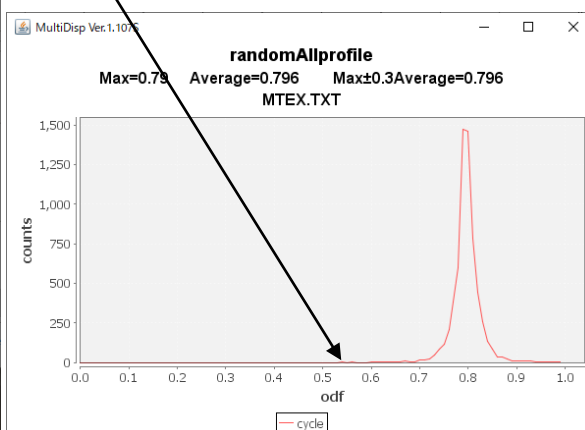
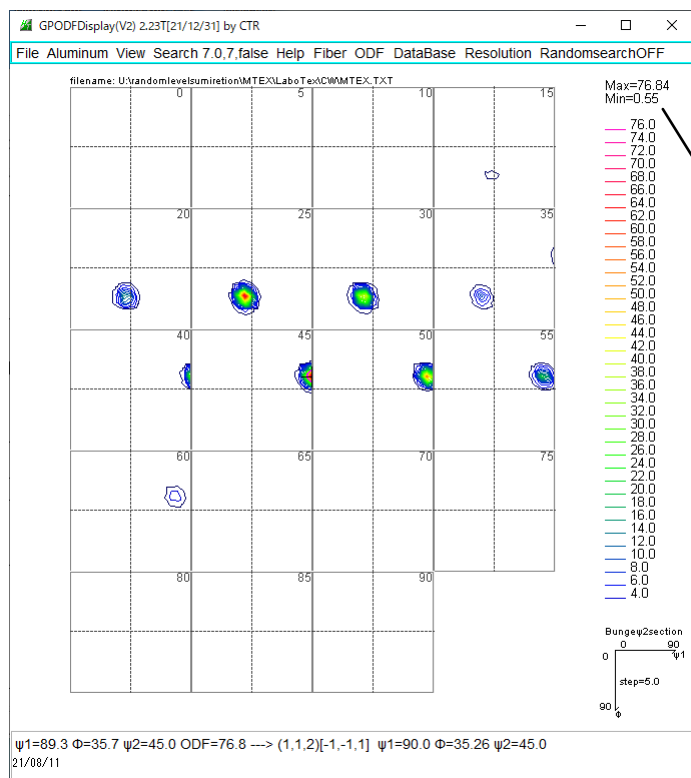
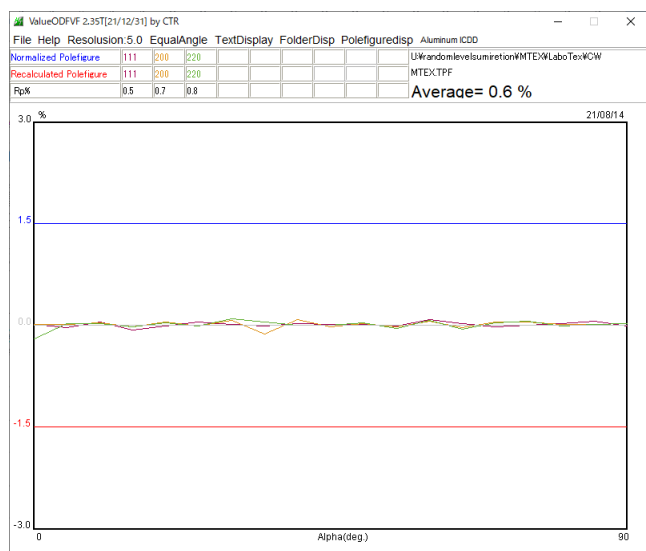
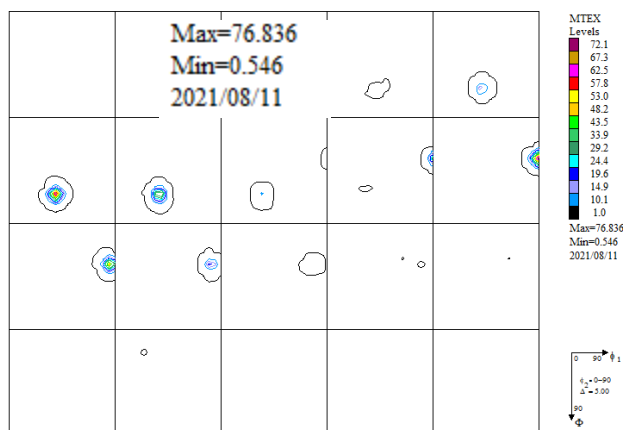
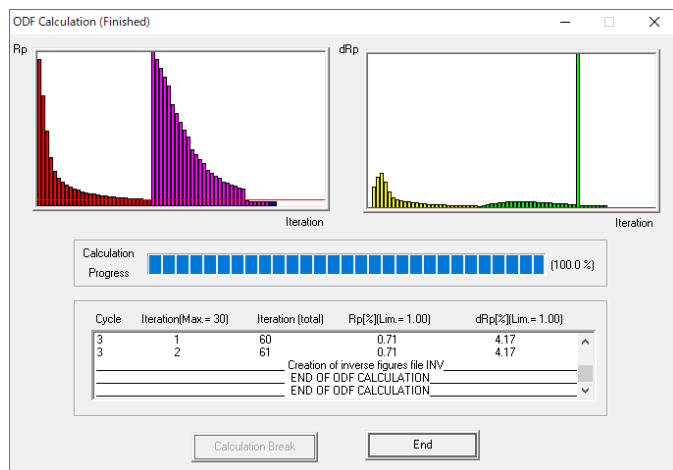
Min=0.79



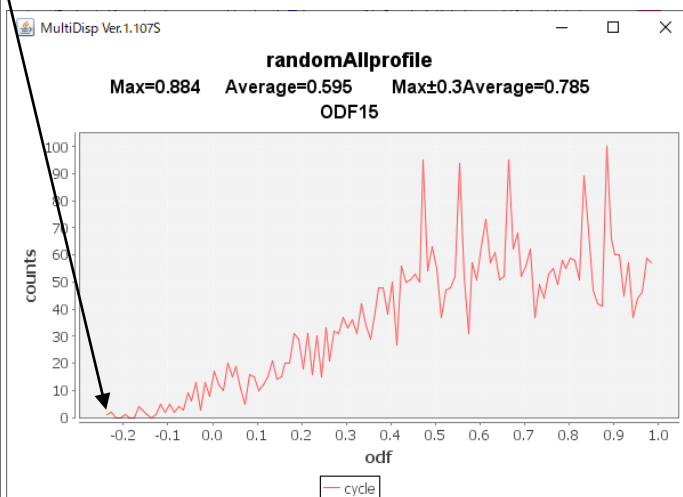
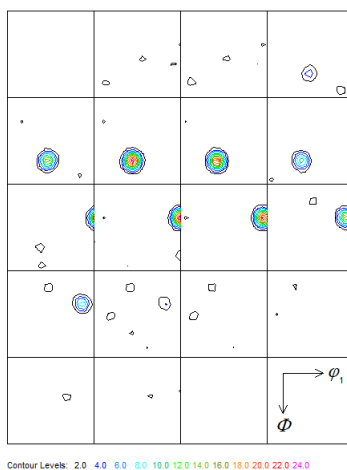
Triclinic->Orthorhombic



LaboTexで解析

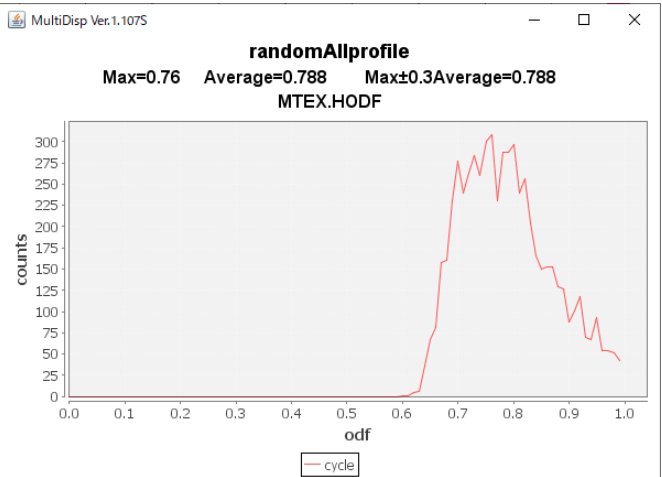
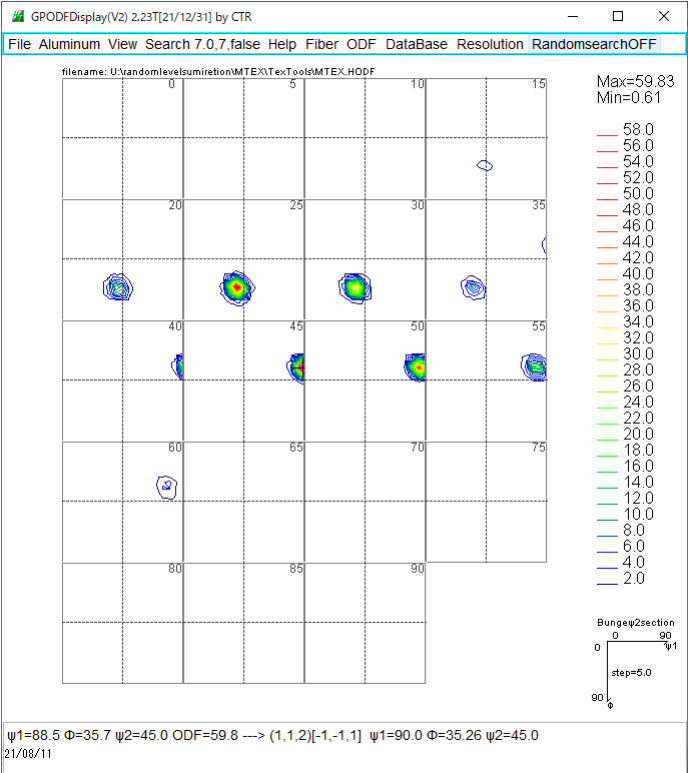
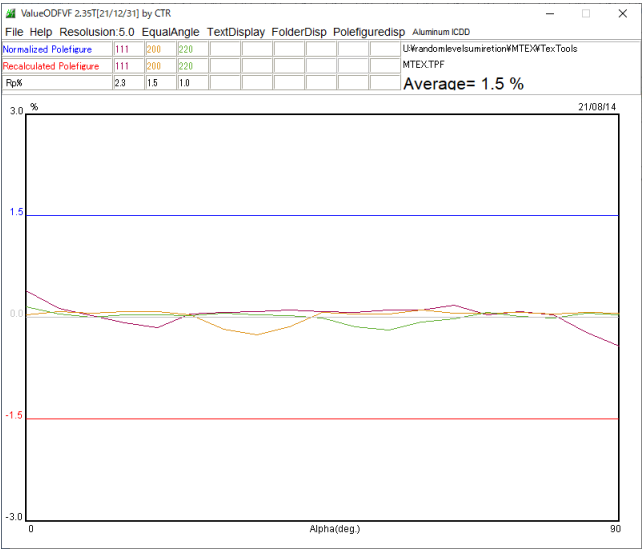
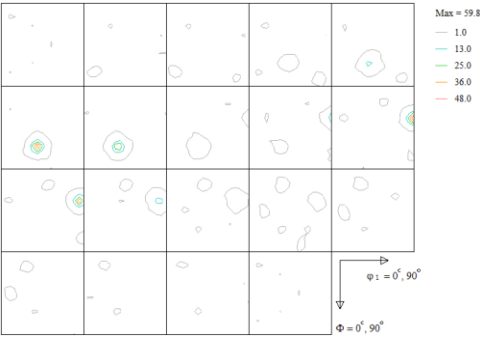
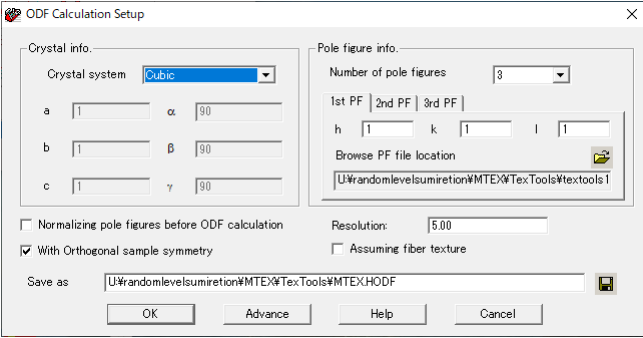


Standard ODFで解析



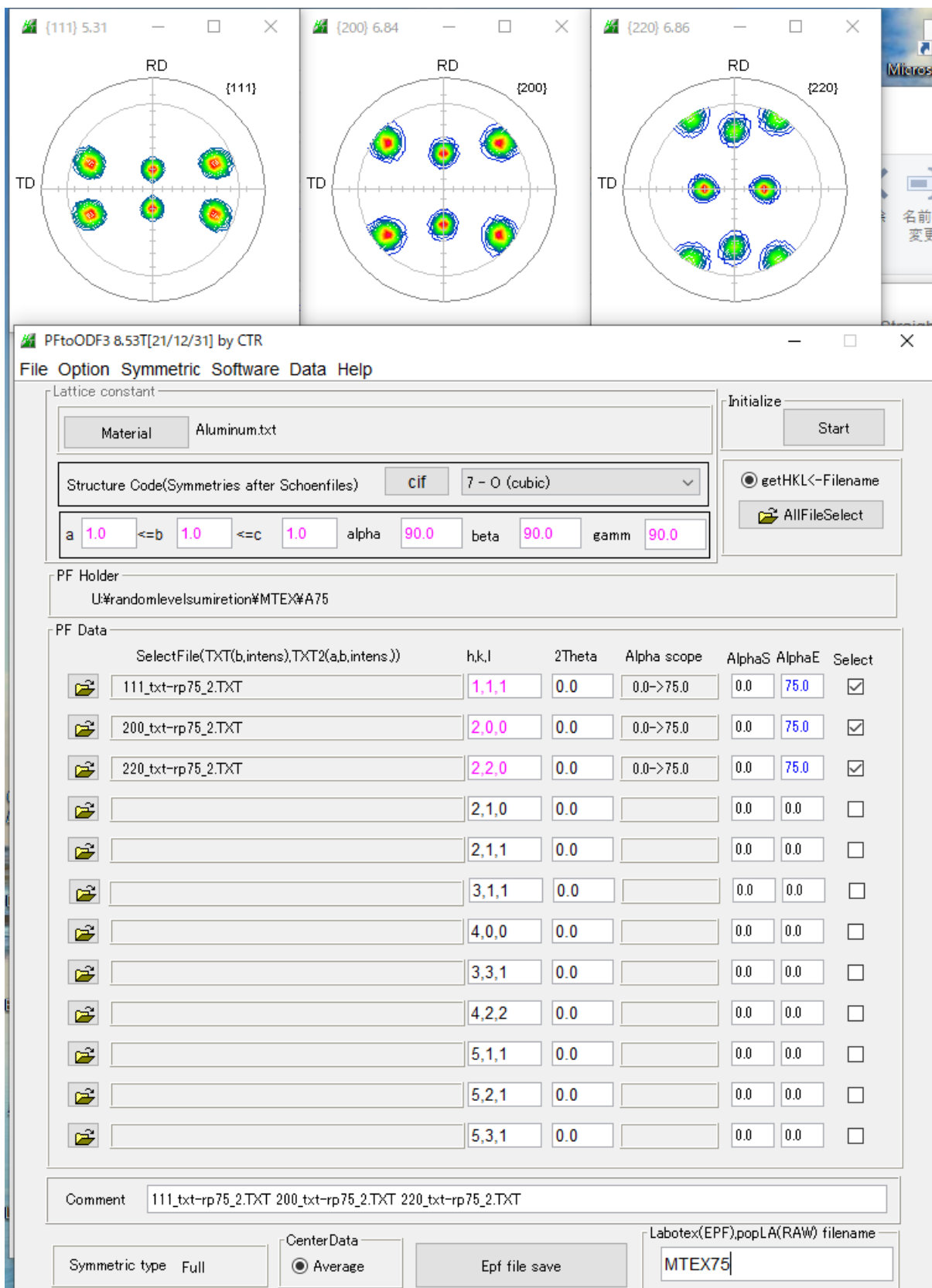
StandardODF ではオーバシュートが激しく、定量は難しい。

TexTools



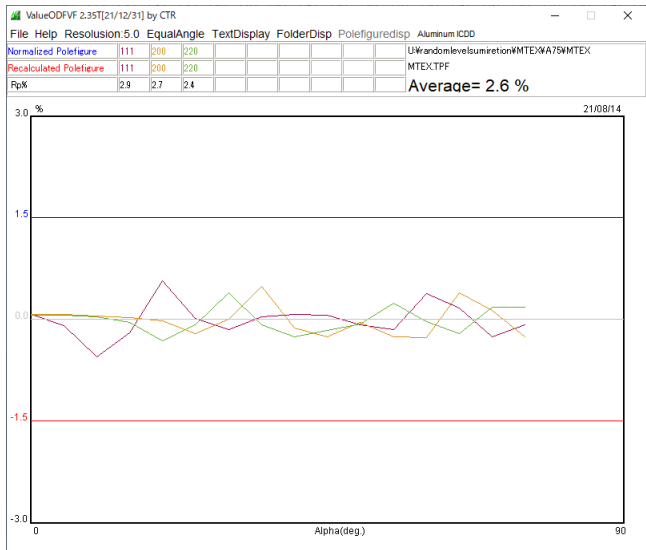
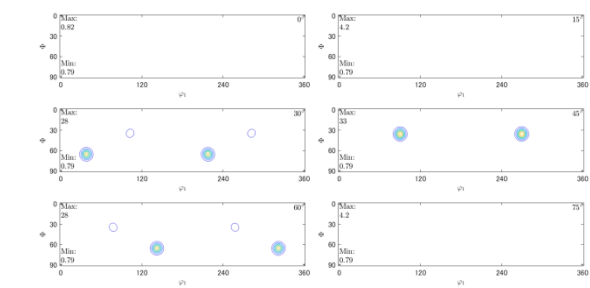
LaboTex, MTEXに比べると、randomが広がる

では、測定範囲を75度とした場合を調べる

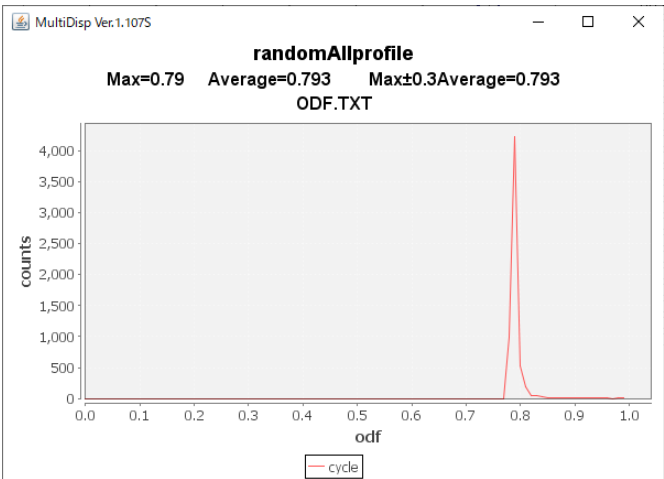
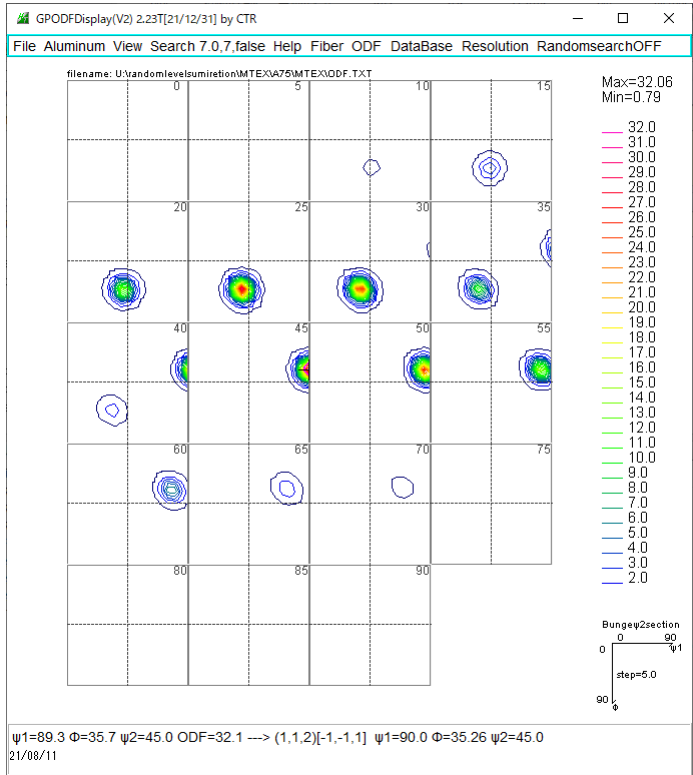


Uniform portion:
weight: 0.78888

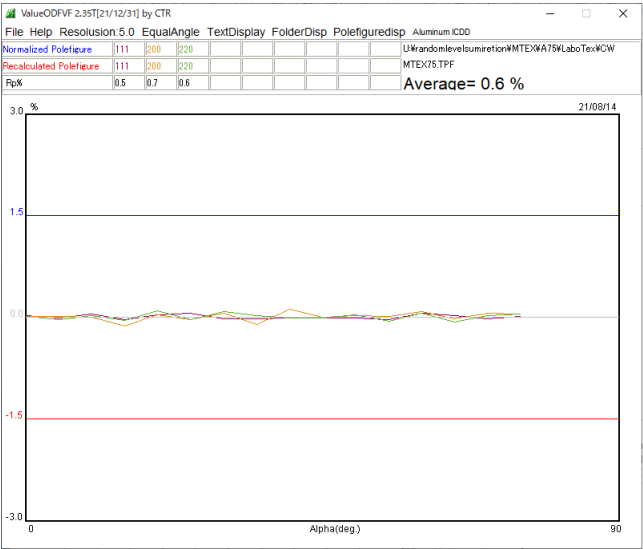
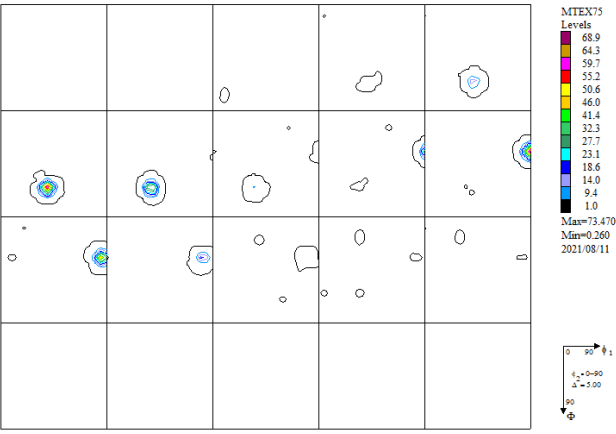
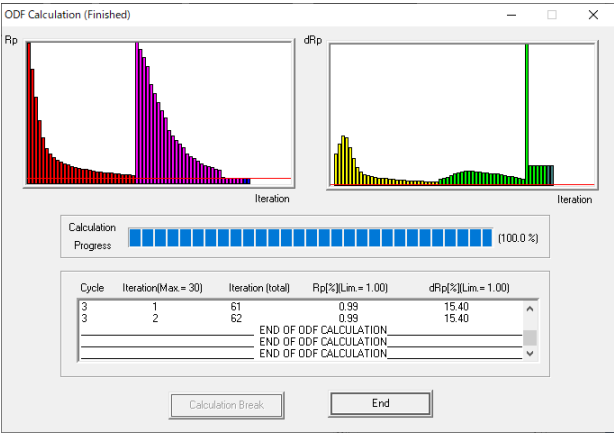
Radially symmetric portion:
kernel: de la Vallee Poussin, halfwidth 5°
center: 4903 orientations, resolution: 5°
weight: 0.21112



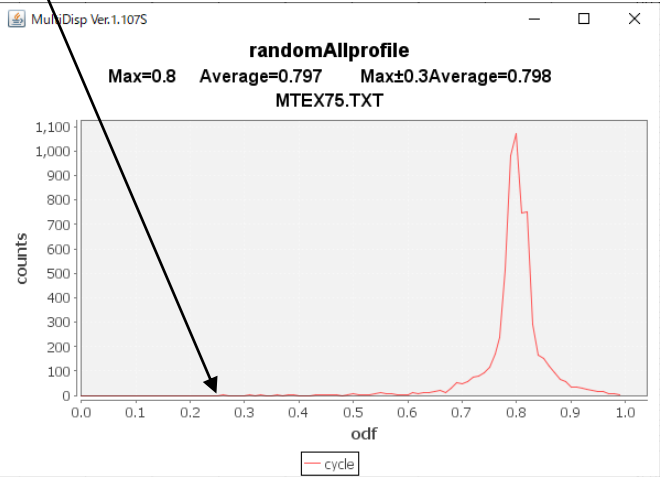
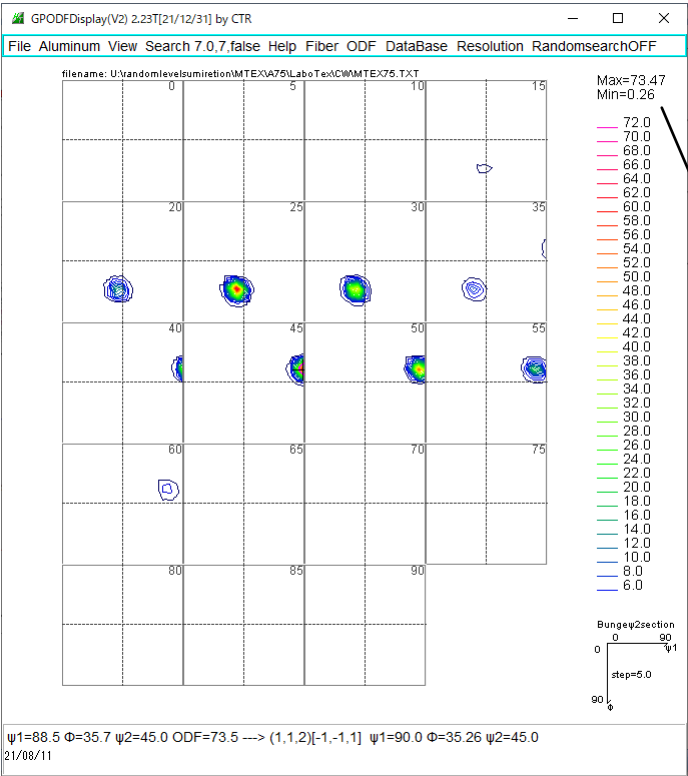
完全極点図3. 7→2. 6%（範囲が狭いため）



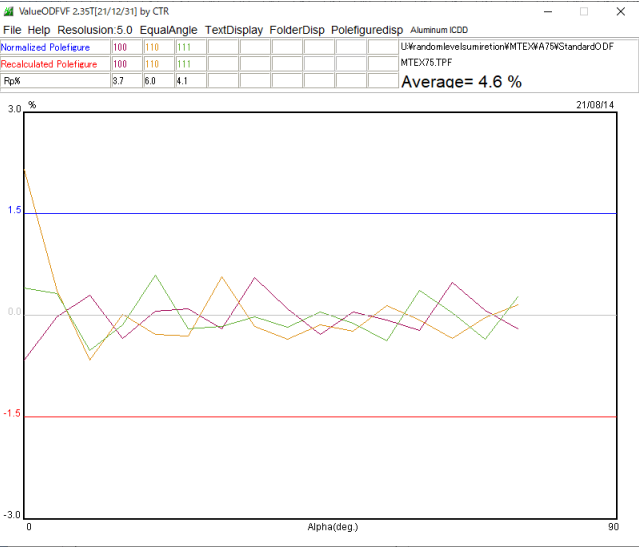
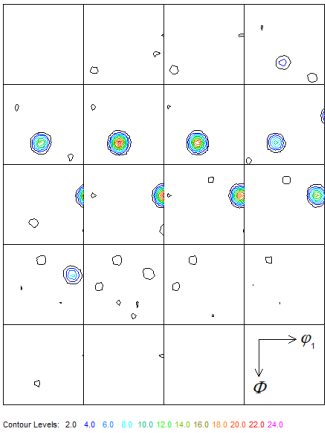
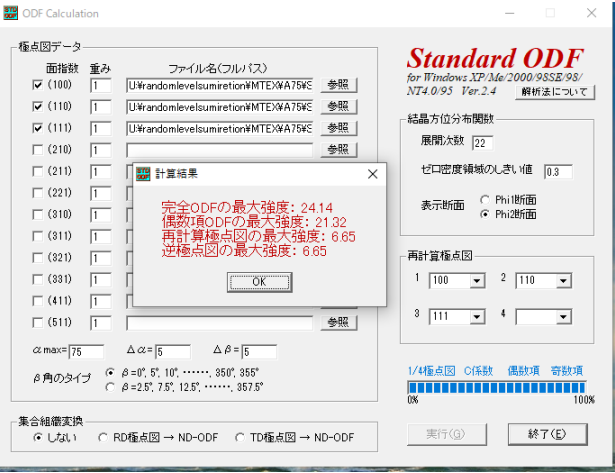
LaboTexで解析



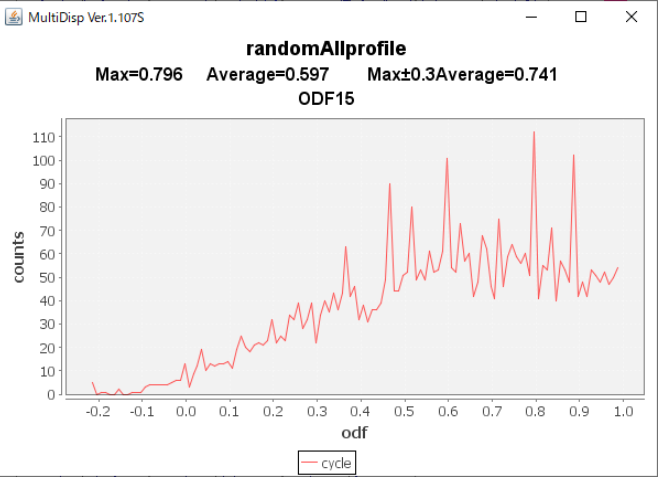
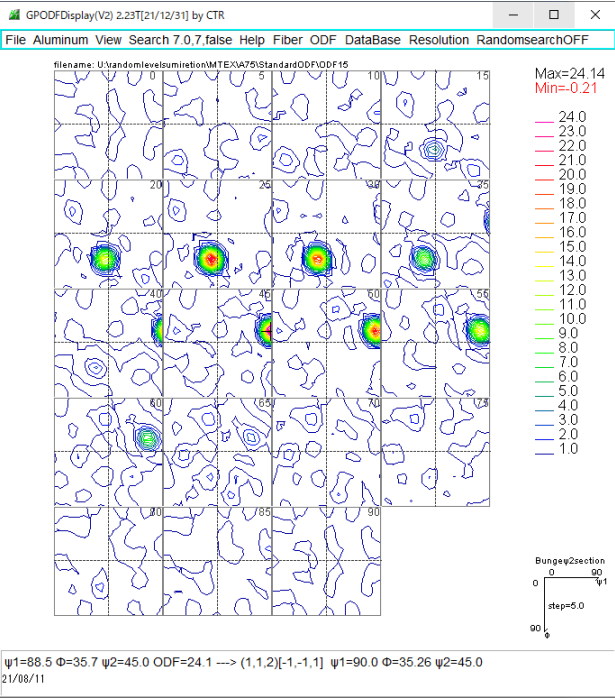
完全極点図0.6%と変わらず



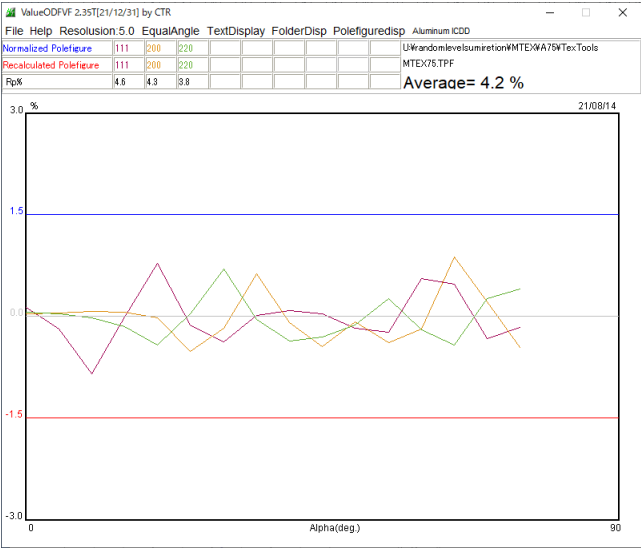
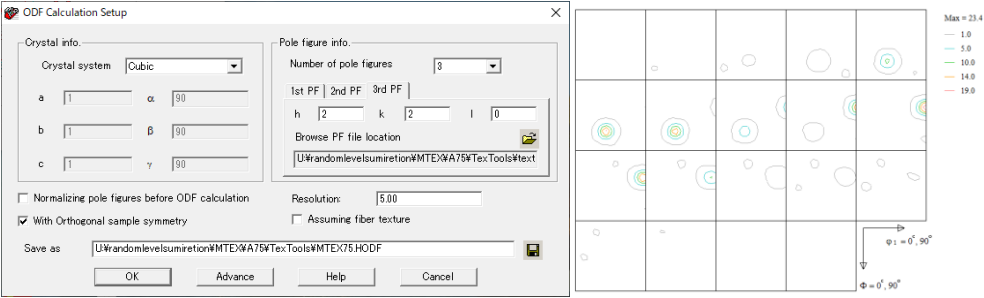
Standard ODFで解析



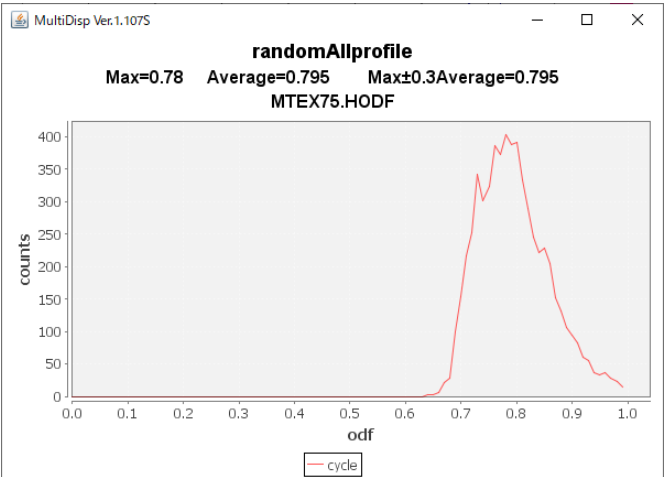
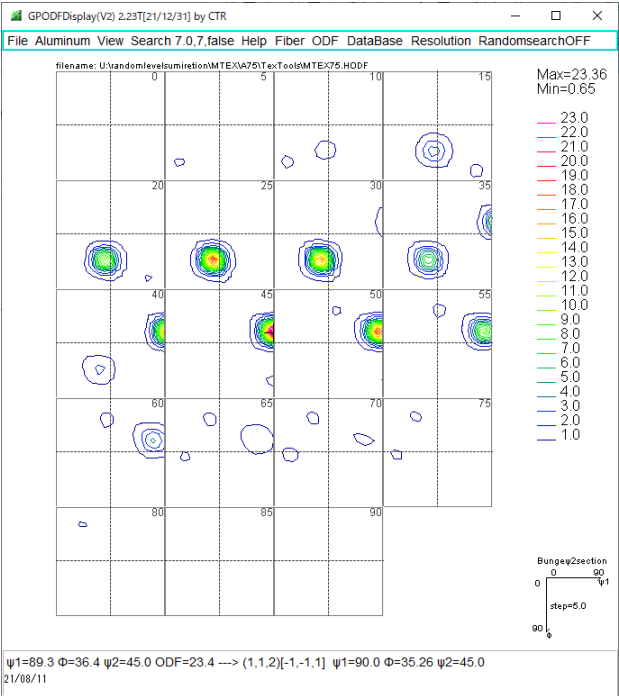
完全極点図と同一



TexToolsで解析



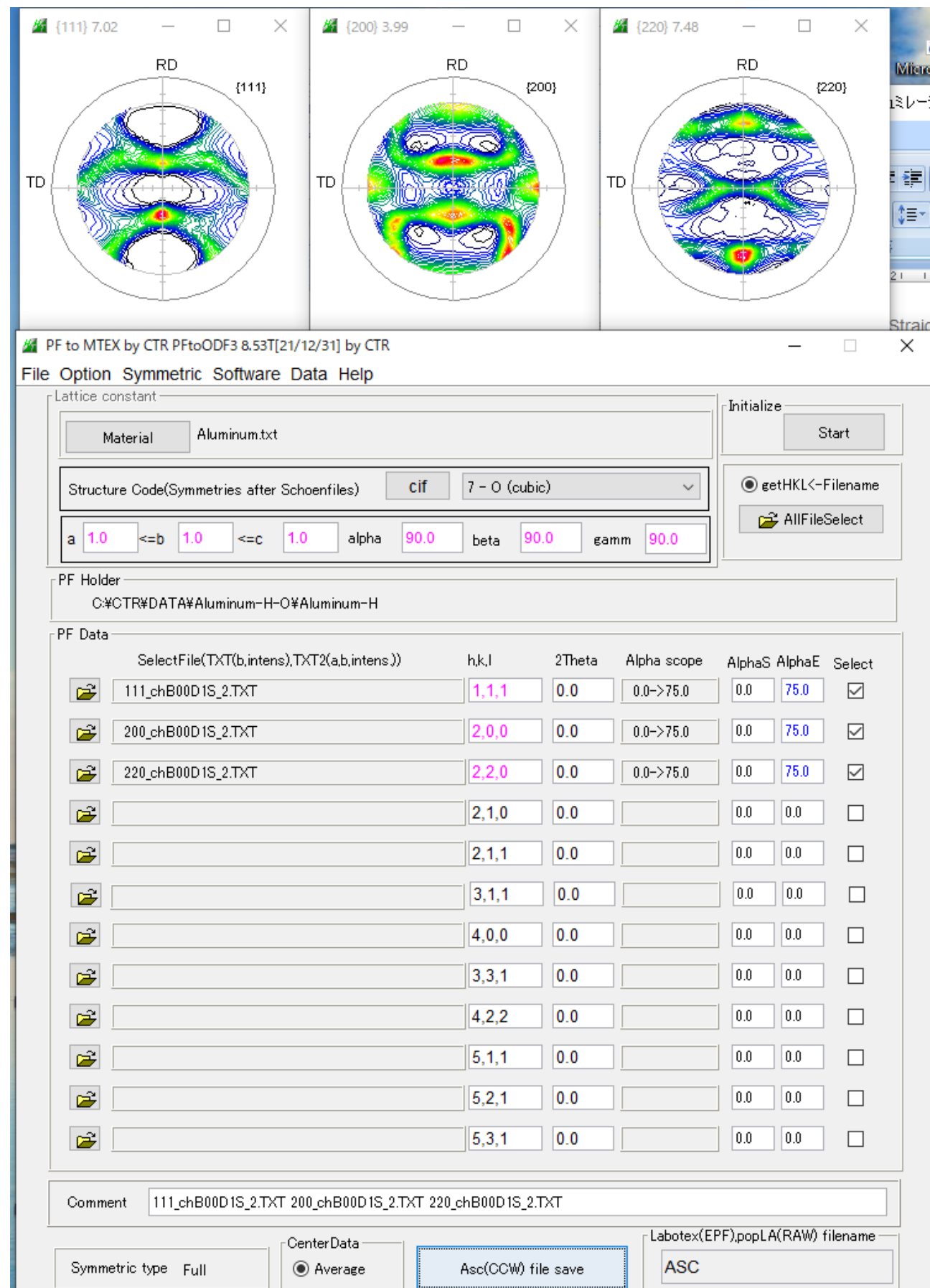
完全極点図1．5 %より一致度が悪化



random 80%が保たれてる

以下に実サンプルを比較

アルミニウム H 材



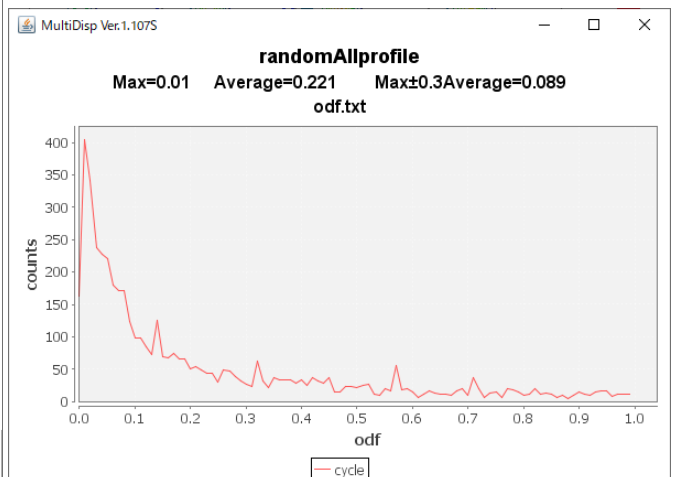
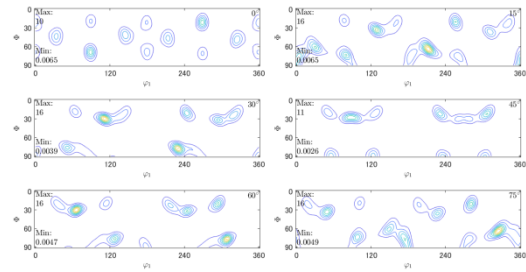
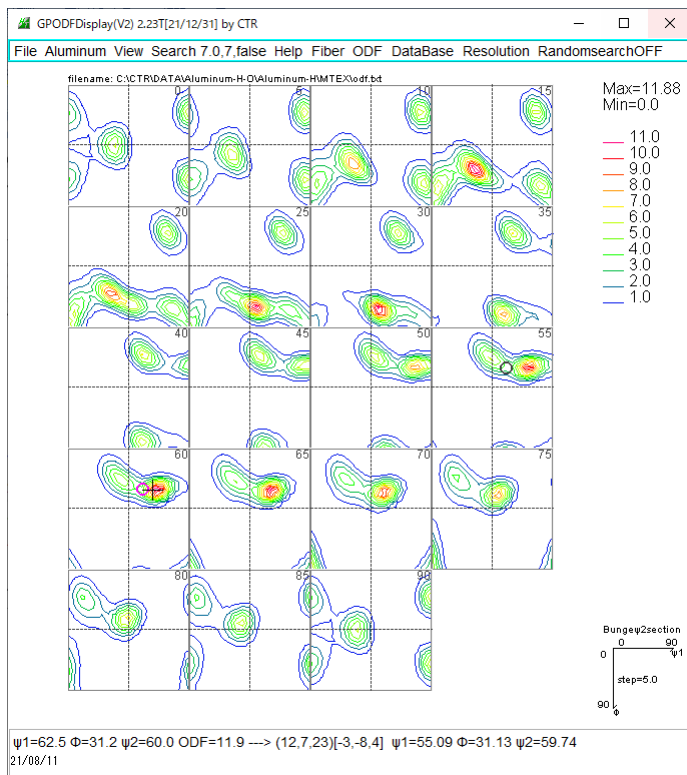
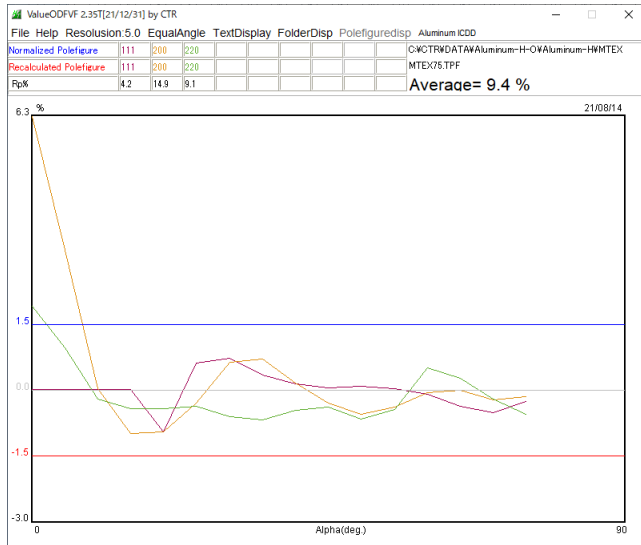
MT EXで解析

Radially symmetric portion:

kernel: de la Vallee Poussin, halfwidth 5°

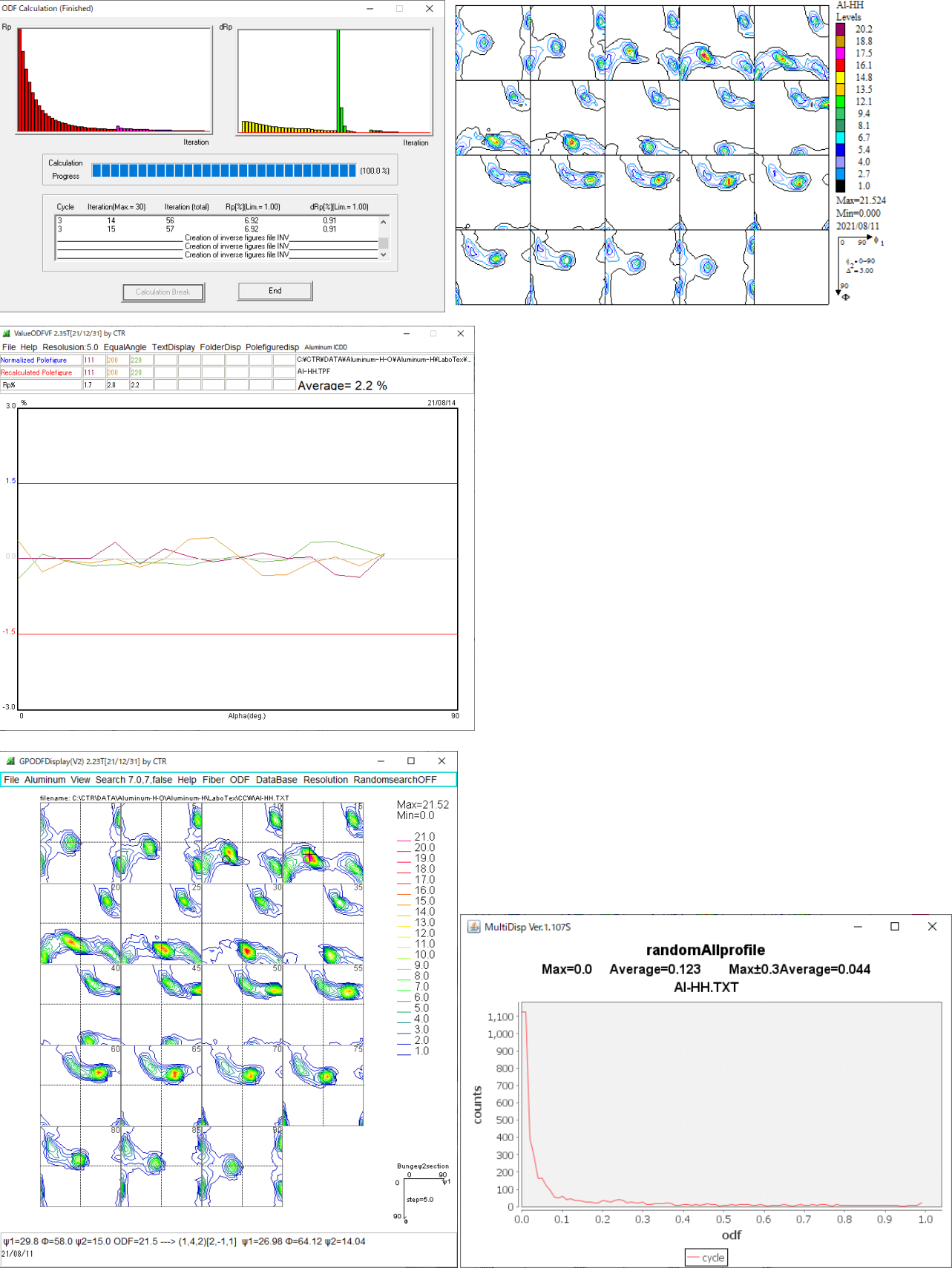
center: 4952 orientations, resolution: 5°

```
weight: 1
```



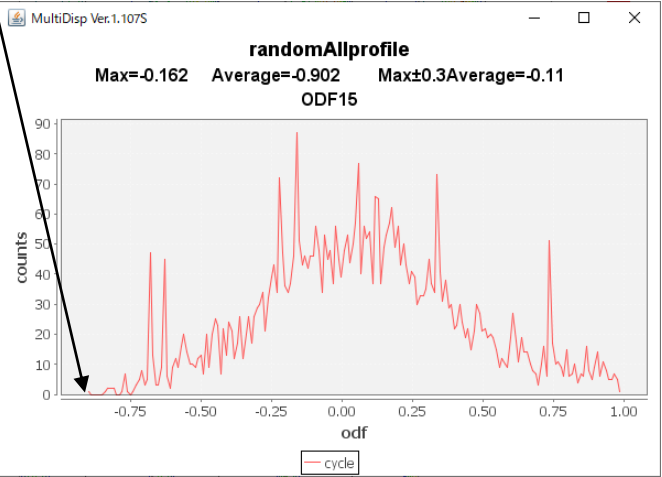
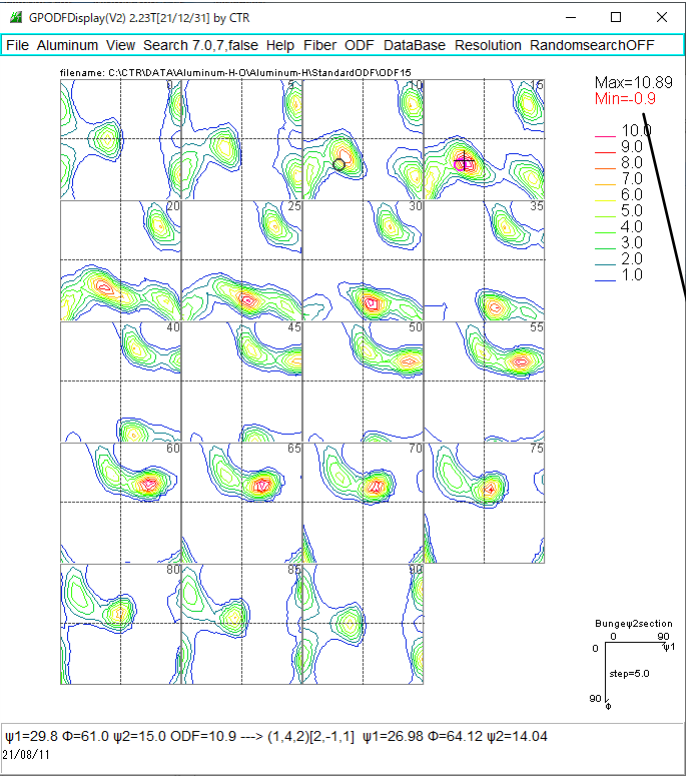
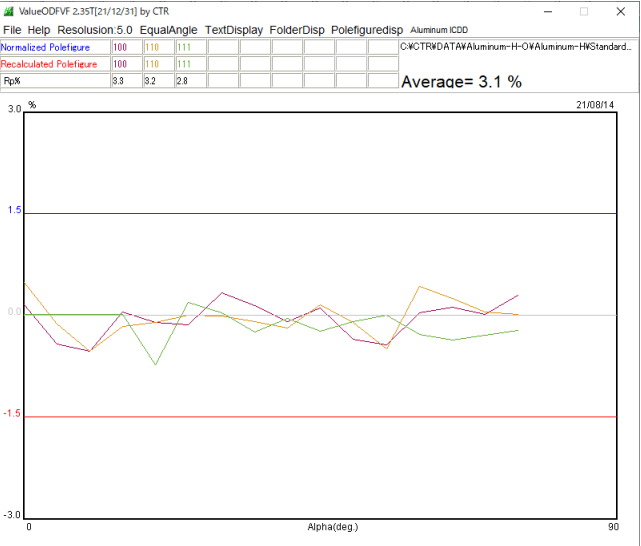
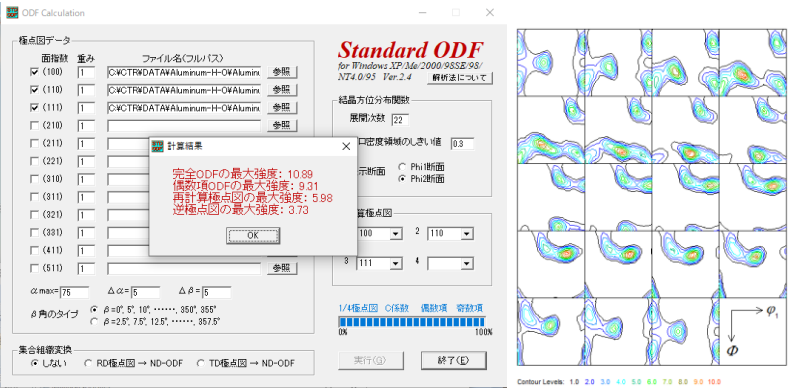
random成分は、1%程度

LaboTexで評価



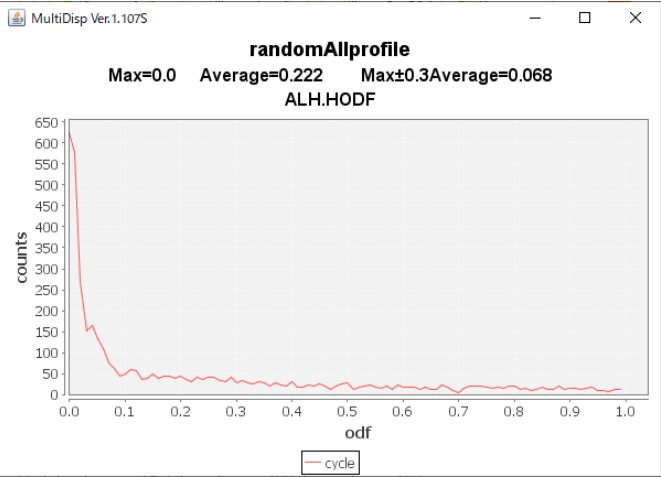
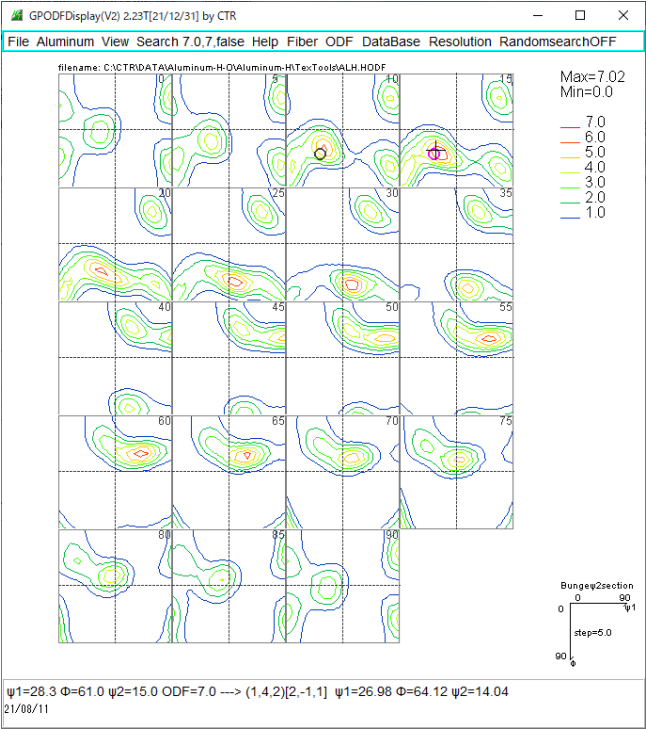
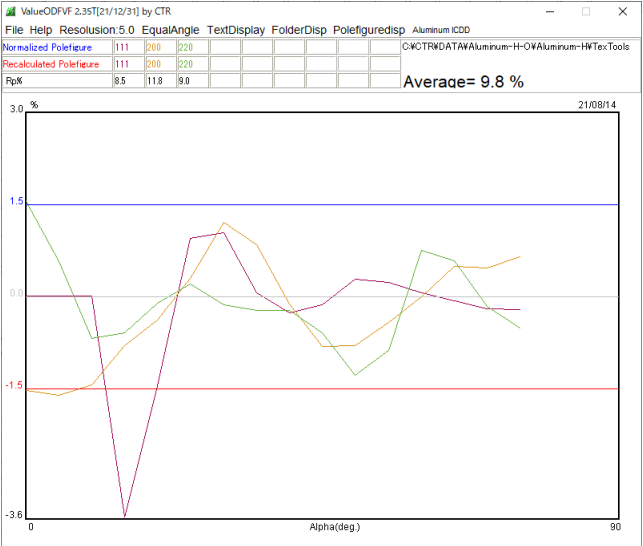
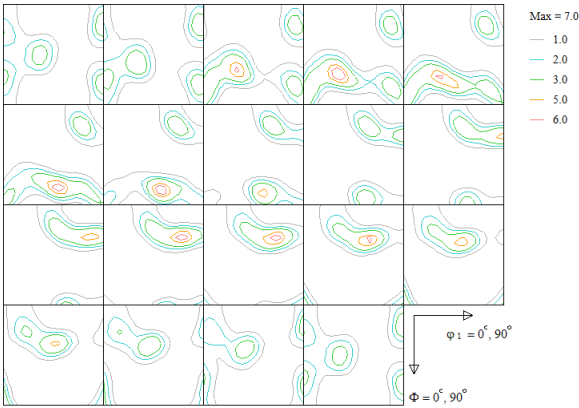
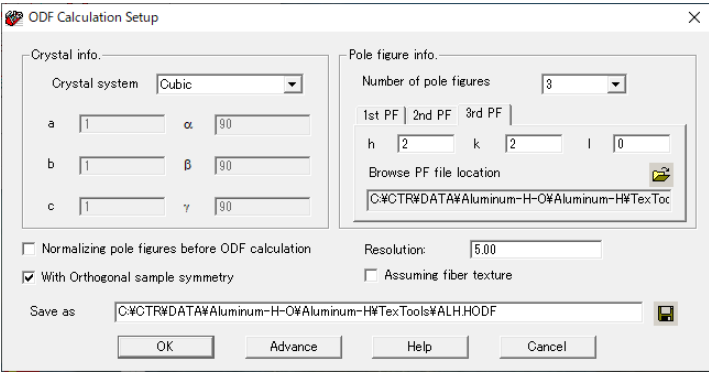
random=0%

Standard ODFで解析



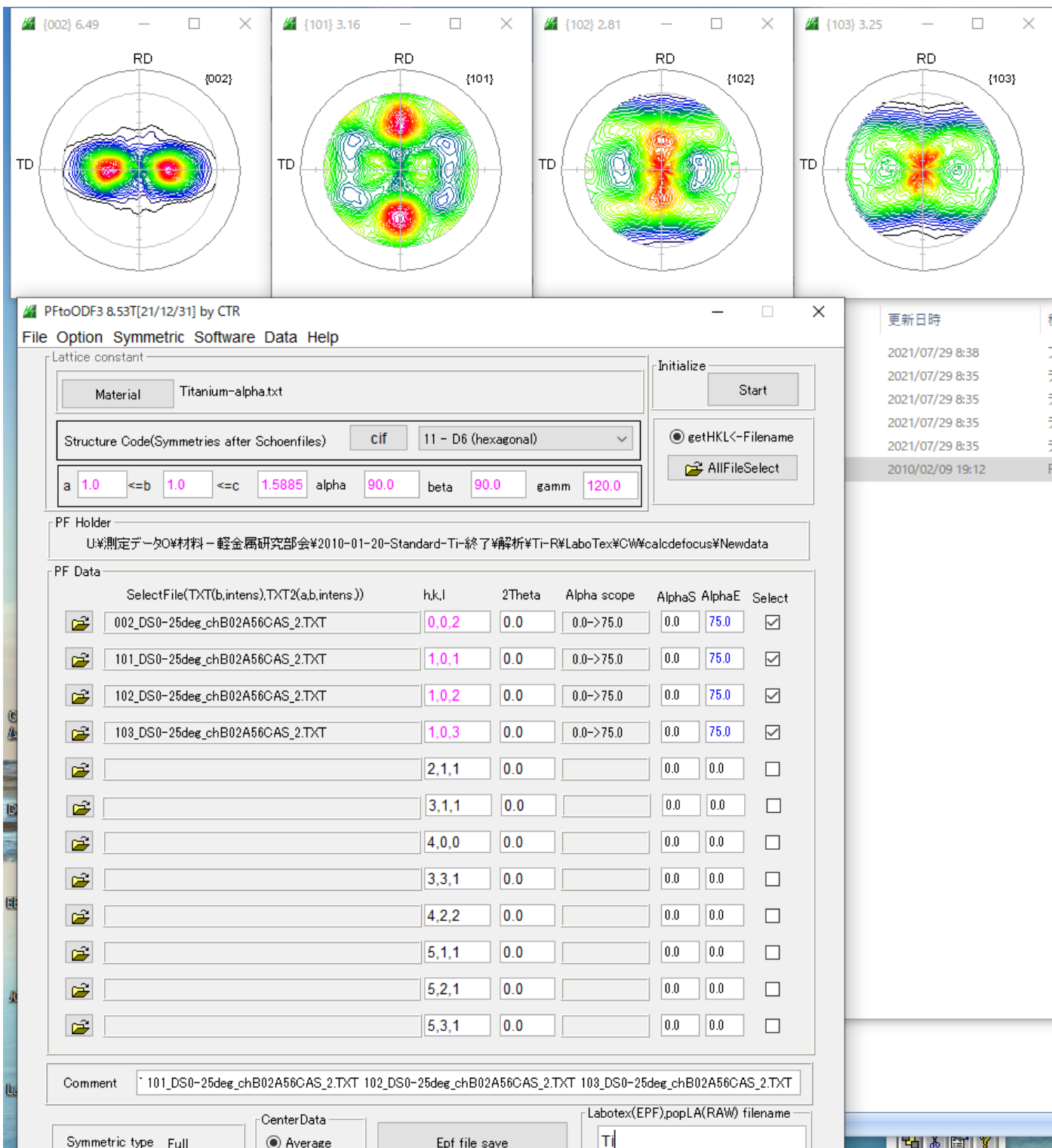
random level プロファイルの分散が大きすぎます。

TexToolsで解析

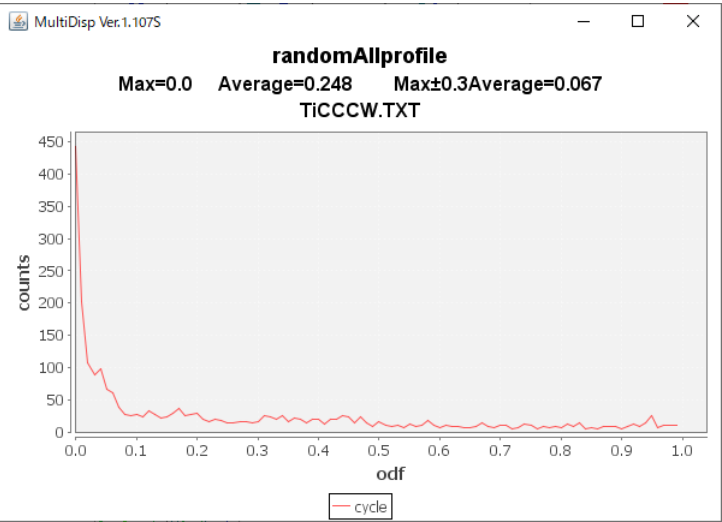
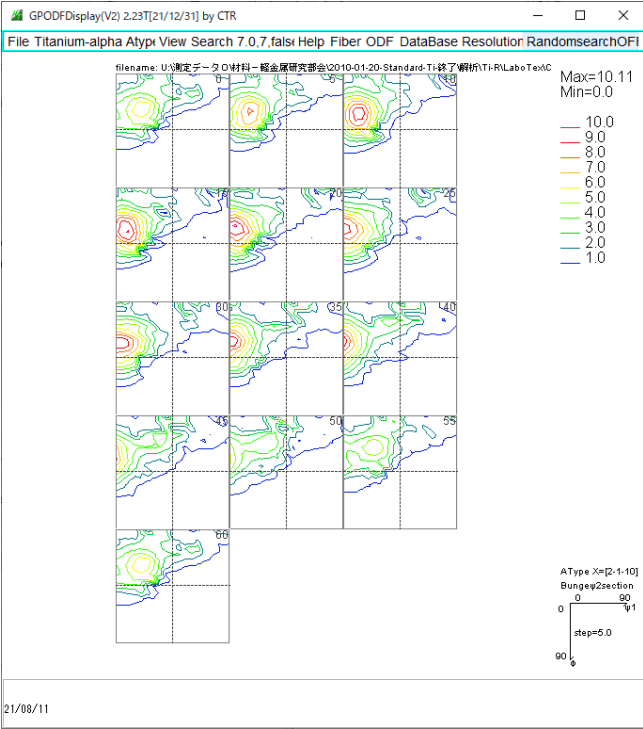
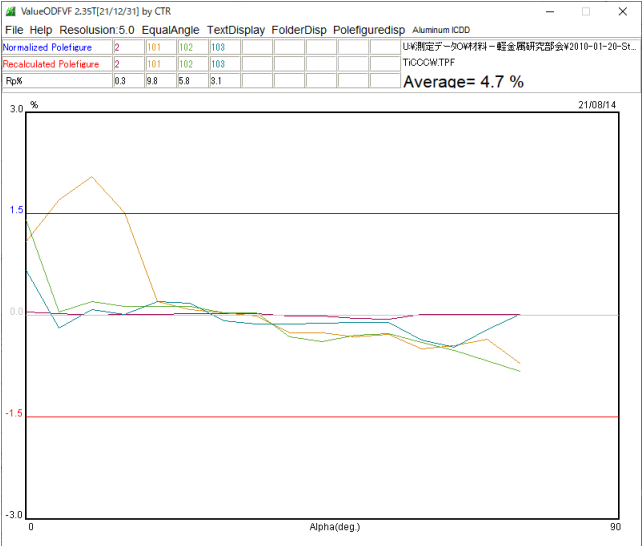
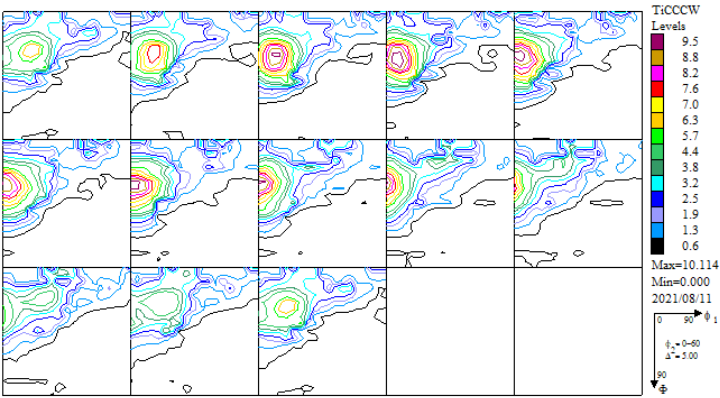
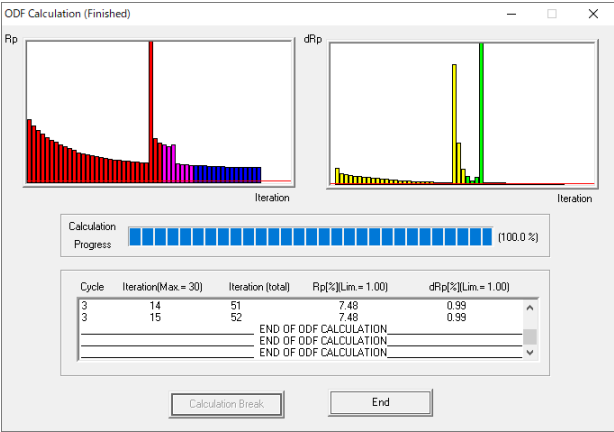


random = 0%が得られます。

Titaniumへの応用

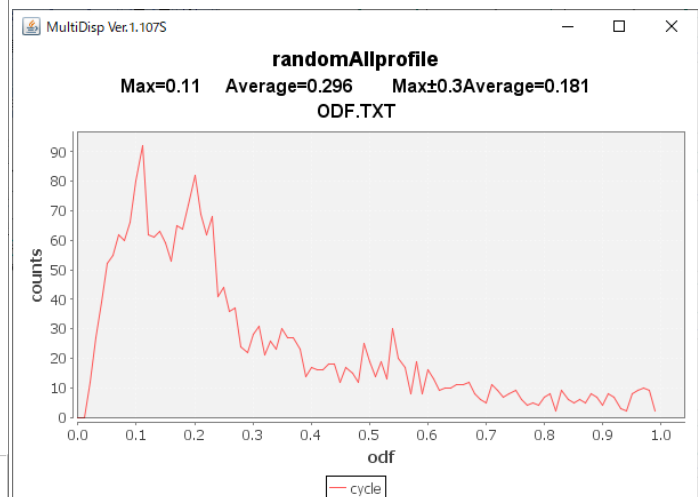
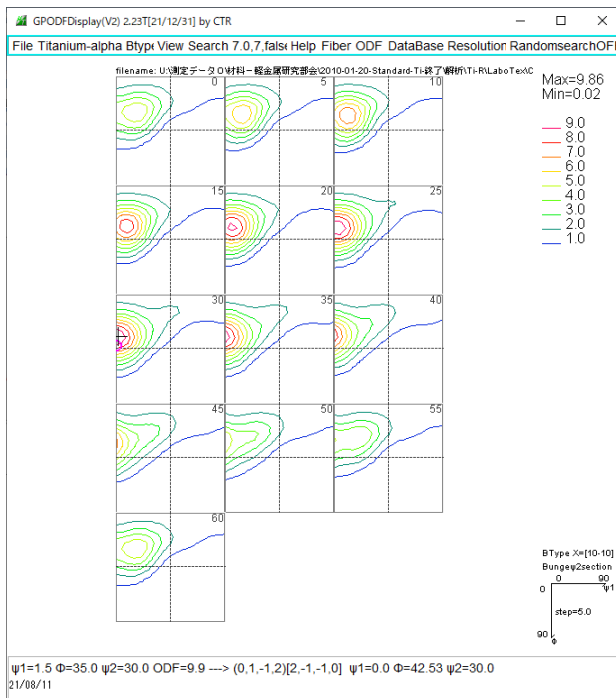
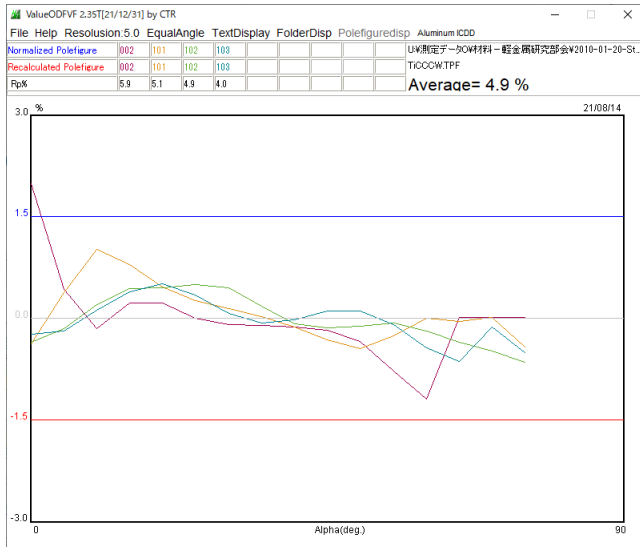
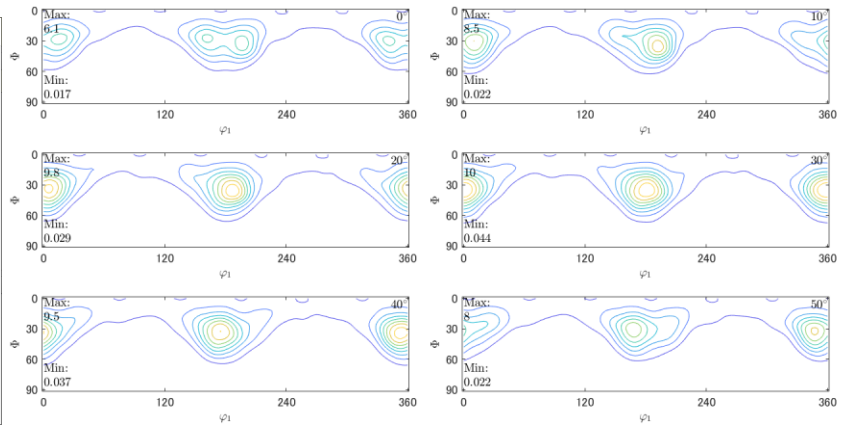
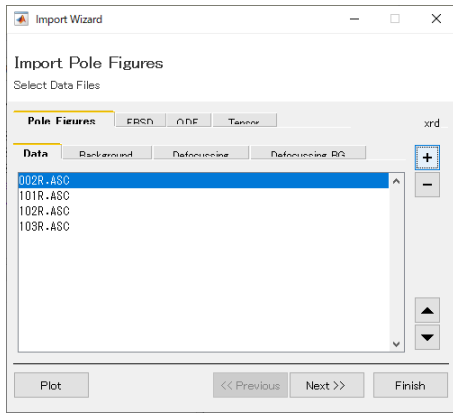


LaboTexで解析



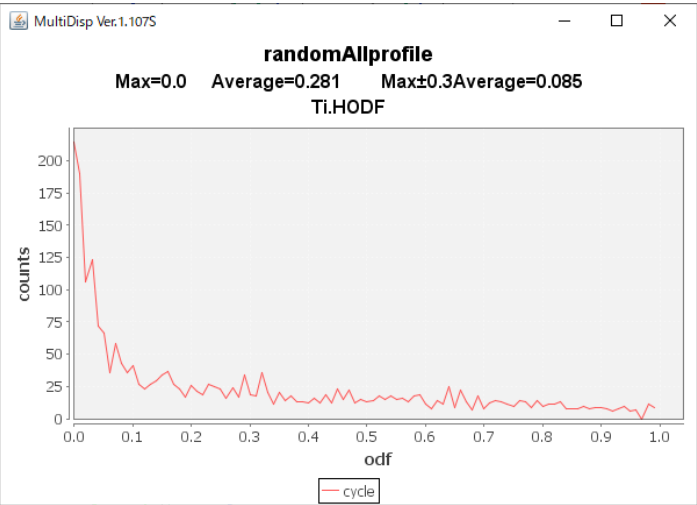
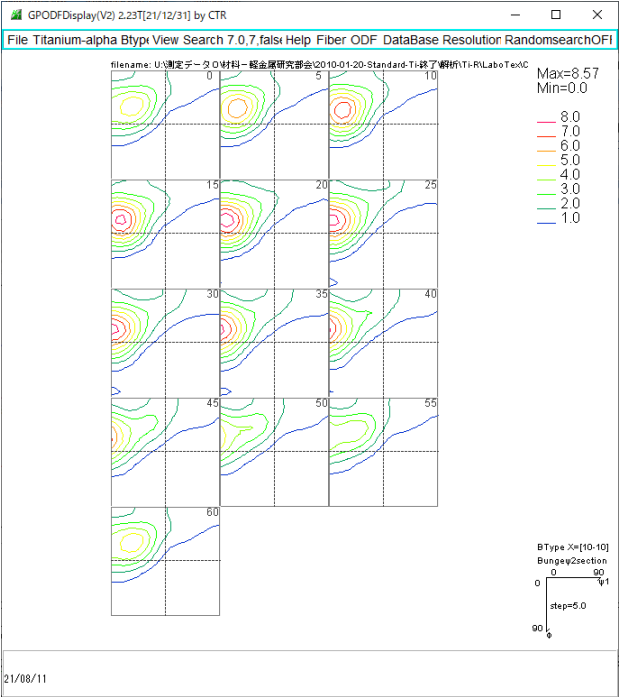
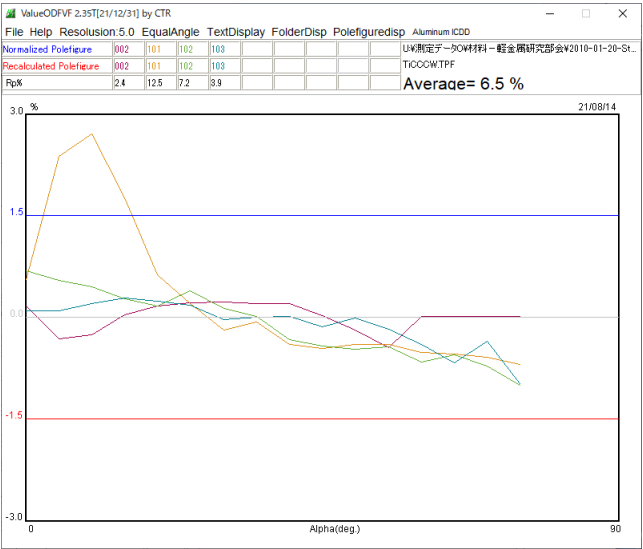
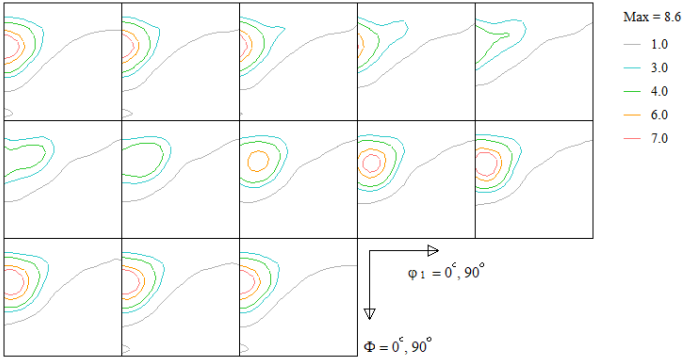
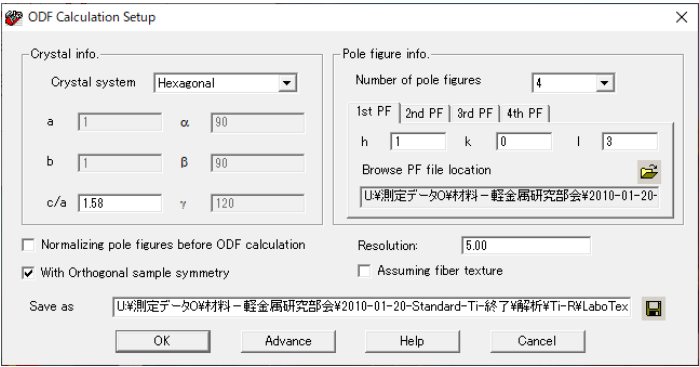
random=0%

MTEXで解析



randomの分散が大きくハッキリしない

TextToolsで解析



random = 0 %が得られる。

まとめ

`random` 100%の方位密度はすべて1.0であるが、他に方位が存在すると`random`方位は1.0以下になる。この1.0以下を調べることで`random`の定量が出来るとしてシミュレーションを行って見たが、`MTEX`, `LaboTex`, `TexTools`では良い結果が得られるが、`StandardODF`はオーバーシュートの影響で正確な定量値は得られない。

従来、ODF解析後の`random`の定量は行われていないが、`VolumeFraction`を計算する時、指定された方位以外は`background`として評価されている。

この`background`値も定量の収束判断としている。

$$\text{background} = \text{random定量値} + \text{指定以外の方位値}$$
と考えれば

`background`の収束値として考える事が出来ます。

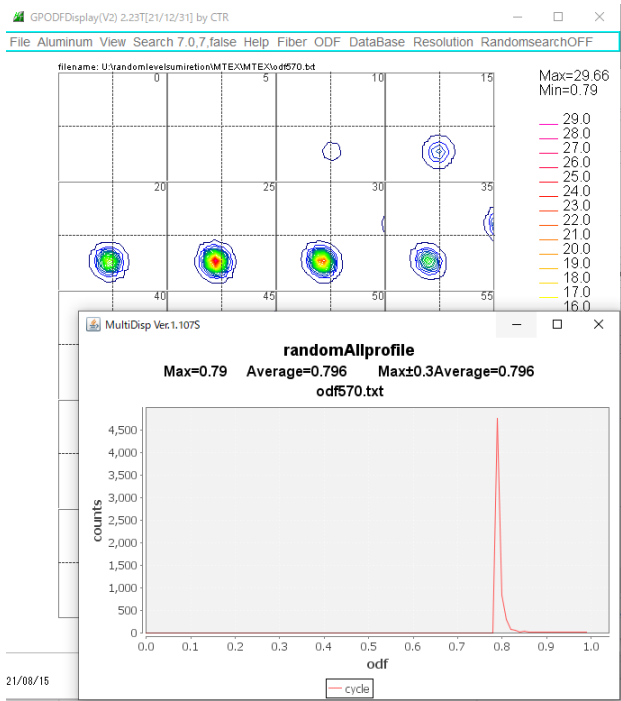
最後に`Titanium`の解析を行ったが`random`の分散から`LaboTex`, `TexTools`の結果が正しいと考えられます。

今後の`random`定量値の応用に期待します。

本資料はMTEX 5. 7. 0を使用
odfはcalcODF0で計算

Uniform portion:
weight: 0.79145

Radially symmetric portion:
kernel: de la Vallee Poussin, halfwidth 5°
center: 4903 orientations, resolution: 5°
weight: 0.20855



MTEX 5. 1. 1では

Uniform portion:
weight: 0.78816

Radially symmetric portion:
kernel: de la Vallee Poussin, halfwidth 5°
center: 4882 orientations, resolution: 5°
weight: 0.21184

