

43



003 169 152

На правах рукописи

Никишин Алексей Васильевич

**ОПИСАНИЕ ТЕКСТУРЫ И РАСЧЕТА УПРУГИХ СВОЙСТВ
ПОЛИКРИСТАЛЛОВ НА ОСНОВЕ НОРМАЛЬНЫХ
РАСПРЕДЕЛЕНИЙ НА ГРУППЕ $SO(3)$ И ИХ ПРОЕКЦИЙ НА СФЕРУ**

05 13 18 – математическое моделирование, численные методы
и комплексы программ

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва
2008

1 5 МАЙ 2008

Работа выполнена в Московском инженерно-физическом институте
(государственном университете)

Научный руководитель. кандидат физико-математических наук,
старший научный сотрудник
Николаев Дмитрий Игоревич

Официальные оппоненты доктор физико-математических наук,
ведущий научный сотрудник
Злоказов Виктор Борисович

кандидат физико-математических наук,
доцент
Иванова Татьяна Михайловна

Ведущая организация Институт Металлургии и Материаловедения РАН
им А А Байкова

Защита диссертации состоится «5» июня 2008 г в 15 часов 00 мин на
заседании диссертационного совета Д212 130 09 в Московском инженерно-
физическом институте по адресу 115409, г Москва, Каширское шоссе, д 31

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Московского инженерно-
физического института

Автореферат разослан 30 апреля 2008 г

Ученый секретарь диссертационного совета
доктор физико-математических наук, профессор

Леонов А С

Общая характеристика работы

Диссертация посвящена математическому моделированию и численным исследованиям нормальных распределений (НР) канонического вида, описывающих некруговое рассеяние с различными параметрами для решения задачи расчета средних упругих свойств поликристаллических материалов с гексагональной симметрией

Актуальность темы

Текстурный анализ является одной из областей кристаллофизики В данной работе рассматриваются вопросы, связанные с основной задачей Количественного Текстурного Анализа (КТА) – восстановления функции распределения зерен по ориентациям (ФРО) по экспериментальным полюсным фигурам (ПФ) Работа включает в себя исследование нормальных распределений канонического вида, разработку комплекса программ для расчета данного распределения, моделирование полюсных фигур и изучение усредненных упругих свойств поликристаллических магния и титана

Актуальность работ в данной области обусловлена тем, что при создании и изучении новых материалов многие из технологических операций приводят к возникновению кристаллографической текстуры в материалах Наиболее полно текстура описывается функцией распределения зерен по ориентациям В качестве аппроксимации ФРО применяются нормальные распределения на группе вращений трехмерного Евклидова пространства $SO(3)$, в частности круговое нормальное распределение [1] Для описания текстур, имеющих некруговой характер, приходится использовать сумму таких распределений с разными центрами и весами Поэтому работа посвящена дальнейшему исследованию нормальных распределений канонического вида с различными параметрами

Количественные данные о кристаллографической текстуре материалов получают из дифракционного эксперимента При непосредственном прямом

измерении функции распределения ориентаций образец подвергается разрушению Поэтому развиваются косвенные методы измерений, в результате которых получают полюсные фигуры (ПФ), являющиеся проекциями ФРО на сферу S^2 Методы, основанные на брэгговской дифракции излучения различного типа на кристаллической решетке исследуемого вещества для определения ПФ, являются наиболее часто используемыми. Они основаны на применении дифракции рентгеновского излучения и нейтронов. Целью измерений с помощью этих методов является получение экспериментальных полюсных фигур, которые извлекаются из дифракционных спектров С помощью экспериментально измеренных ПФ в дальнейшем восстанавливаются функции распределения ориентаций Поскольку большинство различных физических свойств зависит от направления в кристалле, при наличии преимущественной ориентировки появляется анизотропия свойств в поликристаллическом образце Восстановленная функция распределения ориентаций зерен поликристаллического образца дает возможность для исследования анизотропии усредненных упругих свойств материалов Следовательно, этот факт дает нам основание для глубокого изучения нормального распределения канонического вида, имея в виду его использование в текстурном анализе

Из всего вышесказанного следует актуальность работы, обусловленная фундаментальным интересом к использованию нормального распределения канонического вида, а также к методам аппроксимации ФРО этим распределением Изложенный материал представляет также достаточно полное описание метода и результатов численного расчета упругих усредненных свойств поликристаллов магния (+4 5%Al +1%Zn) и титана (экспериментально чистый образец) Расчетные данные сравниваются с экспериментальными и дают хорошее приближение

Цель работы

Основная цель работы - разработка численного алгоритма расчета нормальных распределений канонического вида на группе $SO(3)$, комплекса программ и применение данных распределений для построения аппроксимации ФРО поликристаллических материалов магния (+4 5%Al +1%Zn) и титана (экспериментально чистый образец) и расчета усредненных упругих свойств данных материалов

Автор выносит на защиту

- 1 Реализацию метода вычисления нормальных распределений канонического вида на $SO(3)$
- 2 Расчет модельных полюсных фигур от распределений канонического вида на сфере S^2
- 3 Аппроксимация функции распределения ориентации зерен для поликристаллов гексагональной симметрии нормальными распределениями канонического вида
- 4 Метод численного усреднения упругих модулей для поликристаллов гексагональной симметрии

Достоверность результатов

Достоверность численных результатов подтверждается сходимостью данного распределения к круговому нормальному распределению. Модель проверена на примере изучения текстуры и расчета усредненных упругих свойств экспериментально измеренных поликристаллических образцов магния и титана

Научная новизна

Впервые численно реализованы устойчивые методы расчета нормальных распределений канонического вида, создан комплекс программ. Проведено сравнение данных распределений с круговыми нормальными распределениями для тестирования. Проанализированы спектры

собственных значений матриц коэффициентов нормальных распределений при различных параметрах Исследовано поведение ПФ при изменении параметров ФРО в виде канонического нормального распределения Впервые исследованы упругие усредненные свойства поликристаллов магния и титана с учетом текстуры, аппроксимированной с помощью нормального распределения канонического вида Изучено поведение коэффициентов анизотропии этих материалов при изменении параметров ФРО, аппроксимированной с помощью данных распределений

Апробация и публикации

Основные результаты исследований докладывались на конференциях VIII открытой конференции молодых ученых и специалистов (ОИЯИ, Дубна, 2004), на научных конференциях “Научная сессия МИФИ-2005” (Москва, 2005), “Научная сессия МИФИ-2006” (Москва, 2006), на рабочем совещании по исследованиям на реакторе IBR-2 (ОИЯИ, Дубна, 2006), ICOTOM-14 (Leuven, Belgium, July 11-15, 2005), ITAP-2 (Metz, France, July 7-9, 2004)

Всего по теме диссертации опубликовано 8 печатных работ, две из них в реферируемых Российских журналах - “Заводская лаборатория”, “Кристаллография”, две в иностранных журналах – “Materials Science Forum”, “Solid State Phenomena”, остальные - в сборниках трудов научных конференций

Структура и объем работы

Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав и заключения В главах выделены разделы. Основные результаты и выводы работы представлены в заключении Материал диссертации изложен на 105 страницах, включает 27 рисунка, 15 таблиц и список литературы из 120 наименований

Краткое содержание работы

Во введении рассматриваются вопросы актуальности, определяются цели и методы работы. Кратко излагается содержание, представляются основные результаты диссертационной работы.

В первой главе формулируется основная проблема количественного текстурного анализа. Глава включает в себя описание понятий, таких как ФРО и ПФ. Рассмотрены некоторые аспекты физики нейтронного текстурного эксперимента. Представлена схема эксперимента, на котором проводились измерения для данной работы и метод обработки дифракционных спектров. Также описаны некоторые теоретические аспекты, необходимые для анализа упругих свойств поликристаллов.

В начале главы вводится понятие ориентации кристаллита, которое описывается вращением, где система координат образца K_A переходит в систему, совпадающую с системой координат кристаллита K_B . Каждый кристаллит, входящий в состав поликристалла, имеет собственную ориентацию. Возможны случаи, когда ориентации кристаллитов распределены равномерно, однако, на практике чаще наблюдаются “выделенные” направления, то есть большая часть кристаллитов имеет похожие ориентации. В этом случае говорят, что материал имеет текстуру. То есть текстурой называют закономерное распределение ориентаций отдельных кристаллитов, из которых состоит материал.

Полную количественную характеристику текстуры дает ФРО.

Пусть суммарный объем всех кристаллитов в образце равен V , а объем кристаллитов с ориентацией в малом интервале, есть dV . Тогда существует функция $f(g)$ такая, что для любой ориентации g выполняется выражение

$$\frac{dV}{V} = f(g)dg \quad (1)$$

Полюсной фигурой называется стереографическая проекция функции распределения нормалей (полюсов) к одной определенной

кристаллографической плоскости $[hkl]$ [2] Если u - единичный вектор, описывающий некоторое направление в системе координат образца, а \bar{h}_i - единичный вектор, описывающий некоторое направление в системе координат кристаллита, $dV(\bar{h}_i \parallel \bar{y})$ - объем зерен, у которых кристаллографическое направление \bar{h}_i параллельно направлению u образца в пределах области $[\bar{y}, \bar{y} + d\bar{y}]$ Тогда полюсная фигура $P_h(\bar{y})$, заданная на единичной сфере ($\bar{y} \in S^2$) будет удовлетворять условию

$$\frac{1}{4\pi} P_h(\bar{y}) = \frac{dV(\bar{h}_i \parallel \bar{y})}{V} \quad (2)$$

Ориентация g кристаллита, у которого кристаллографическое направление \bar{h}_i , $\bar{h}_i = (\vartheta, \psi)$, $0 \leq \varphi < 2\pi$, параллельно направлению u в образце, может быть представлено в виде $g(\varphi) = \{\bar{h}_i, \varphi\}^{-1} \{\bar{y}, 0\}$ Т.е, измеряется интегральная по отношению к ФРО величина, которая пропорциональна суммарному объему (интеграл по ФРО) всех тех кристаллитов, чьи ориентации g отвечают условию $(\bar{h}_i \parallel \bar{y})$ Если для фиксированного \bar{h}_i исследуется зависимость по \bar{y} на сфере направлений S^2 , вышеуказанный интеграл записывается как

$$P_h(\bar{y}) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(\{\bar{h}_i, \varphi\}^{-1} \{\bar{y}, 0\}) d\varphi \quad (3)$$

Уравнение (3) представляет собой математическую формулировку основной задачи количественного текстурного анализа, которая заключается в восстановлении ФРО $f(g)$ по измеренным в эксперименте полюсным фигурам $P_h(\bar{y})$

В работе [3] Матхизом показано, что эта задача является некорректно поставленной, поскольку не имеет единственного решения Неединственность решения возникает вследствие центросимметричности ПФ, которые измеряются в дифракционном эксперименте

$$\tilde{P}_h(\bar{y}) = \frac{1}{2} [P_h(\bar{y}) + P_{-h}(\bar{y})]$$

Экспериментальная установка СКАТ (Спектрометр Количественного Анализа Текстуры), на которой проводились измерения, располагается на пучке 7А реактора ИБР-2 (г. Дубна, Объединенный институт ядерных исследований, Лаборатория Нейтронной Физики имени И.М. Франка [4]). На рис. 1 показана геометрическая схема для спектрометра СКАТ.

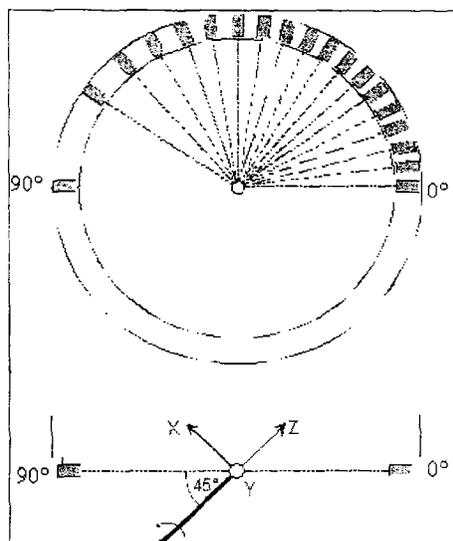


Рис 1. Геометрическая схема СКАТ

Метод получения полюсных фигур основывается на измерении интенсивности дифракционных пиков $\{hkl\}_i \sim \bar{h}_i$. То есть в реальном эксперименте измеряемой величиной является интенсивность I рассеянных на образце объема V нейтронов.

Далее вводятся понятия тензора 4 ранга и его применение для расчета упругих свойств материалов гексагональной симметрии.

Во **второй** главе описывается возможность решения некорректно поставленной задачи текстурного анализа с использованием дополнительной информации относительно самого решения. В качестве возможных решений используется класс функций, являющихся нормальными распределениями на

группе $SO(3)$ [5] В работе исследуются нормальные распределения канонического вида [6]

Распределение вероятностей μ на $SO(3)$ называется - нормальным (Гауссовским), если μ безгранично делимо, не является идемпотентной мерой и может быть представлено в виде

$$\int_{SO(3)} T_g d\mu(g) = \exp\left\{\sum_{i,j=1}^3 \alpha_{ij} A_i A_j + \sum_{i=1}^3 \alpha_i A_i\right\}, \quad (4)$$

где T_g - представление группы, $A_i (i=1,2,3)$ инфинитезимальные операторы, $\alpha_{ij}, (i,j = 1,2,3)$ - неотрицательно определенная симметричная матрица, $\alpha_i (i=1,2,3)$ - действительные числа [7]

Для нахождения нормального распределения $d\mu$ используется обращение преобразования Фурье на группе для случая, когда вероятностная мера является абсолютно непрерывной с плотностью $f(g) d\mu(g) = f(g)dg$, dg -инвариантная мера на $SO(3)$ В этом случае плотность $f(g)$ допускает разложение в ряд

$$f(g) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l C_{mn}^l T_{mn}^l(g) \quad (5)$$

по базису $T_{mn}^l(g)$, отвечающему унитарному представлению T_g группы $SO(3)$, сходящийся равномерно к неотрицательной функции $f(g)$ Матрица, соответствующая при неприводимом представлении веса l произвольному вращению $(g = \{\alpha, \beta, \gamma\}$, где (α, β, γ) - углы Эйлера вращения), имеет в каноническом базисе вид $T_g^l = (T_{mn}^l(\alpha, \beta, \gamma))$, $l=0, 1, \dots, m, n, =-l, -l+1, \dots, l$, здесь $T_{mn}^l(\alpha, \beta, \gamma)$ - обобщенные сферические функции l -го порядка

$$T_{mn}^l(\alpha, \beta, \gamma) = \exp\{i(m\alpha + n\gamma)\} P_{mn}^l(z), \quad (6)$$

где $z = \cos \beta$, $P_{mn}^l(z)$ - функции, связанные с полиномами Якоби [8]

В частных случаях при $\nu^2 = \sigma^2 = \varepsilon^2$ получается круговое нормальное распределение на $SO(3)$

$$f(t) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \exp\{-l(l+1)\varepsilon^2\} \frac{\sin((l+1/2)t)}{\sin(t/2)}, \quad (7)$$

где $\cos(t/2) = \cos(\beta/2) \cos[(\alpha + \gamma)/2] = \frac{1}{2}(Tr(g) - 1)$, $t \in [-\pi, \pi]$

Далее в работе приводится алгоритм реализации расчета нормального распределения канонического вида, который представляет собой две подзадачи: задача расчета коэффициентов разложения C_{mn}^l в виде массива порядка $(2l+1) \times (2l+1)$ для каждого l и задача суммирования ряда (5) с помощью устойчивой схемы Кленшоу [9]. Такая схема позволяет уменьшить численные затраты при вычислении суммы с большим количеством членов в ряде.

Теорема Нормальное распределение на $SO(3)$ определяется в виде ряда (5), при этом коэффициенты разложения C_{mn}^l находятся из соотношения

$$C_{mn}^l = (2l+1)\beta_{mn}^l, \exp\{B^l\} = (\beta_{mn}^l), \quad (8)$$

$$B^l = \sum_{j=1}^3 \alpha_j A_j + \sum_{i=1}^3 \alpha_i A_i = (b_{mn}^l), \quad (9)$$

где матрица $B^l = \sum_{n=1}^3 \alpha_n (A_n)^2$ является пятидиагональной и состоит из элементов

$$b_{l-m}^{(1)} = -\frac{1}{2}[(2m+1)l - m^2](a_{11} + a_{22}) - (l-m)^2 a_{33}, \quad m=0,1, \dots, l,$$

$$b_{l-m}^{(2)} = -\frac{1}{4}\sqrt{(m+1)(m+2)(2l-m)(2l-m-1)} |a_{11} - a_{22}|, \quad m=0,1, \dots, l,$$

$b_{l-m}^{(1)}$ - главная диагональ, $b_{l-m}^{(2)}$ - не главная диагональ. Все остальные элементы равны нулю. Матрица B^l разбита на матрицы R^l и S^l так, что у матрицы R^l отличны от нуля лишь элементы r_{mn}^l с четными m и n , а у матрицы S^l могут быть отличны от нуля лишь элементы s_{mn}^l с нечетными m и n ($m, n = -l, -l+1, 0, 1, \dots, l$). Из такого строения матриц следует, что $S^l R^l = R^l S^l$

Разложение матрицы B^l на сумму двух, которые приводятся к якобиевому виду [10], позволит не только уменьшить количество вычислений, но и повысить точность, так как для таких матриц разработаны специальные алгоритмы вычисления собственных значений и собственных векторов

Следовательно, матрица коэффициентов канонических распределений равна

$$C^l = (2l+1) \exp B^l = (2l+1) \exp R^l \exp S^l = (2l+1) \exp S^l \exp R^l$$

Матрицы R^l и S^l весьма разреженные. С помощью перестановок строк и столбцов их можно привести к более удобному для вычислений виду. Матрицы Q_{mn}^l таких преобразований устроены следующим образом: $Q_{mn}^l = E^l - E_{nm}^l - E_{nn}^l + E_{mn}^l + E_{mm}^l$, где E^l - единичная матрица порядка $(2l+1)$, E_{mn}^l - квадратная матрица порядка $(2l+1)$, у которой на пересечении m -й строки и n -го столбца, стоит единица, а все остальные элементы нулевые, $\det Q_{mn}^l = -1$. В силу ортогональности матриц Q_{mn}^l можно написать

$$B^l = (U^l)^{-1} \exp(R^l) U^l (V^l)^{-1} \exp(S^l) V^l,$$

где матрицы U и V порядка $(2l+1)$ являются ортогональными.

Пусть u^l - ортогональная матрица порядка $(l+1)$, составляющая часть от матрицы U , такая, что $u^l r^l (u^l)^{-1} = \lambda^l$ - диагональная матрица порядка $(l+1)$, состоящая из собственных значений матрицы R^l .

$$R^l = \begin{pmatrix} (u^l)^{-1} & 0 \\ 0 & E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (\lambda^l)^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (u^l)^{-1} & 0 \\ 0 & E \end{pmatrix}$$

Таким образом, вычисление $\exp B^l$, где матрица B^l с элементами пятидиагональная порядка $(2l+1)$, сводится к вычислению $\exp r^l$ и $\exp s^l$, где матрицы r^l и s^l имеют порядки $(l+1)$ и l соответственно, и являются симметричными трехдиагональными матрицами.

Функции $P_{mn}^l(z)$ являются частным случаем многочленов Якоби [8] Но так как функции $P_{mn}^l(z)$ симметричны и симметричны коэффициенты C_{mn}^l ряда, то для численного суммирования рационально использовать $P_{mn}^l(z)$ в следующем виде

$$P_{ln}^l(z) = \frac{z^{l-n}}{2^l} \sqrt{\frac{(2l)!}{(l-n)!(l+n)!}} (1-z)^{(l-n)/2} (1+z)^{(l+n)/2}$$

В работе при расчете каждого элемента C_{mn}^l был разработан дополнительный метод индексации элементов матрицы коэффициентов C_{mn}^l , который выбирает из каждого массива $(2l+1) \times (2l+1)$ только нужные элементы, ввиду симметричности матрицы Тем самым, мы получаем одномерный массив порядка $(1+l_{\max}(11+l_{\max}(6+l_{\max}))/6)$, который и будем использовать в дальнейшем

Были получены оценки матричных элементов C_{mn}^l при $l \rightarrow l_{\max}$ (l индекс суммирования, l_{\max} максимальное число членов ряда функции (5)) Представлены значения l_{\max} , которые необходимо использовать при вычислении НР канонического вида с соответствующими параметрами распределения a_{11}, a_{22}, a_{33} .

Третья глава содержит обоснование и описание метода численного решения задачи восстановления ФРО в предположении, что функция распределения зерен по ориентациям представима в виде линейной комбинации нормальных распределений канонического вида (5) на группе вращений $SO(3)$

В этой главе описывается метод расчета модельной ПФ для нормального распределения канонического вида Полюсная фигура для такого распределения представляется в следующем виде

$$P_h(\vec{y}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l F_m^l(\vec{h}_l) Y_m^l(\vec{y}), \quad (10)$$

где $Y_l^m(\vec{y})$ - сферические функции следующего вида

$$Y_i^m(\vec{y}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\theta} P_m^l(\cos\theta),$$

(θ, ϕ) - сферические координаты вектора \vec{y} $F_m^l(\vec{h}_i)$ - коэффициенты разложения полусной фигуры по сферическим функциям Коэффициенты разложения полусной фигуры связаны с коэффициентами разложения ФРО следующим образом [11]

$$F_m^l(\vec{h}_i) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{n=1}^{N(l)} C_{mn}^l Y_n^l(\vec{h}_i), i=1,2, \dots, J_p \quad (11)$$

где J_p – число измеренных полусных фигур

Аксиальная компонента ПФ для канонического нормального распределения (2) выписывается следующим образом

$$P_{\vec{h}}^{A\ KHP}(\vec{y}, g_0, a_{11}, a_{22}, a_{33}, \vec{n}_T) = \sum_{l=0(2)}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \sum_{n=-l}^l C_{mn}^l Y_m^l((\vec{h}, g_0 \vec{n}_T)) Y_n^l((\vec{y}, \vec{n}_T)), \quad (12)$$

\vec{h}_T -единичный вектор, задающий положение оси текстуры

Таким образом, построение модельной ПФ (12) сводится к задаче вычисления коэффициентов C_{mn}^l (8) и симметризации сферических функций $Y_m^l(\vec{y})$ относительно суммирования ряда

Далее описан сам алгоритм восстановления ФРО, где в качестве модельных функций используется нормальное распределения канонического вида (5) Пусть ФРО многокомпонентной текстуры - $f(g)^M$ аппроксимируется суммой нормальных распределений канонического вида (5) и имеет вид

$$f(g)^M = \sum_{i=1}^N M_i f_i^{A\ KHP}(g, g_{0i}, a_{11i}, a_{22i}, a_{33i}), \quad (13)$$

где N – число компонент текстуры, M_i - вес i -той компоненты, g_{0i} - положение ее “центра”, $a_{11i}, a_{22i}, a_{33i}$ - параметры рассеяния i -той компоненты Будем полагать, что компоненты ФРО $f(g)$ в G –пространстве разделяются, то есть выполняются условия

- 1) Число максимумов $f(g)$ g_i также равно N ,
- 2) $\Delta t_i \ll a_{11i}, a_{22i}, a_{33i} \ll t_y$ для всех $j \neq i$,

Здесь Δ_i - угловое расстояние между g_i и g_0 , а t_i - угловое расстояние между g_0 и g_{0j} ,

ПФ от ФРО $f(g)$ вида (13) вычисляются по формулам

$$\tilde{P}_h^{TFOP}(\bar{y}) = \sum_{i=1}^N M_i \tilde{P}_h^{NMP}(\bar{y}, g_{0i}, a_{11i}, a_{22i}, a_{33i}) \quad (14)$$

В такой постановке задача получения ФРО сводится к определению числа компонент текстуры N , положению их "центров" g_{0i} и параметров рассеяния, $a_{11i}, a_{22i}, a_{33i}$, $i=1, 2, \dots, N$, весов M_i , $i=1, 2, \dots, N$ каждой текстурной компоненты f_i и фона M_0 . Предполагается, что текстурные компоненты f_i являются каноническими нормальными распределениями вида (5)

Они могут быть найдены путем минимизации функционала от квадрата разности между экспериментально измеренными полюсными фигурами $\tilde{P}_h^{\text{ЭКЛП}}(\bar{y})$, $\kappa=1, 2, \dots, I_p$ и ПФ вида (13)

$$\Phi \equiv \sum_{\kappa=1}^{I_p} \int_{\bar{y} \in S^2} (\tilde{P}_h^{\text{ЭКЛП}}(\bar{y}) - \tilde{P}_h^{\text{1ЛОП}}(\bar{y}))^2 d\bar{y} \rightarrow \min \quad (15)$$

Решение задачи (15) разбивается на два этапа. Первый заключается в определении числа компонент N и положений их "центров" g_{0i} , а второй в нахождении соответствующих им параметров M_i , $a_{11i}, a_{22i}, a_{33i}$, $i=1, 2, \dots, N$

Сравнивая полюсные фигуры от канонического нормального распределения $f(g)$ (5) с экспериментальными полюсными фигурами магния (0002) (рис 2а) и титана (рис 3а), найдены модельные ПФ вида (10) магния с параметрами ФРО $a_{11}=0,9$, $a_{22}=0,8$, $a_{33}=0,2$, и центром $g_0=(0,0,0)$ (рис 2б) и ПФ титана с параметрами ФРО $a_{11}=0,01$, $a_{22}=0,4$, $a_{33}=0,8$, и центром $g_0=(0,0,0)$ (рис.3б)

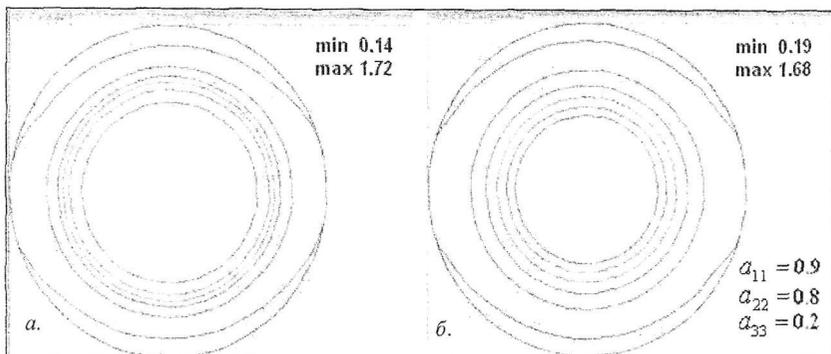


Рис. 2. Экспериментальная ПФ магния (+ 4.5%Al+1%Zn) (0002) (а), модельная ПФ магния (0002) с параметрами полуширины $a_{11} = 0.9$, $a_{22} = 0.8$, $a_{33} = 0.2$ (б).

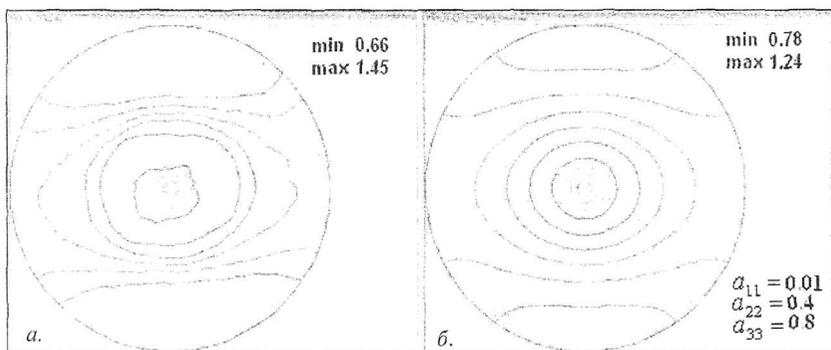


Рис. 3. Экспериментальная ПФ титана (10-10) (а), модельная ПФ титана (1,0,-1,0) с параметрами полуширины $a_{11} = 0.01$, $a_{22} = 0.4$, $a_{33} = 0.8$ (б).

При восстановлении ФРО нельзя не упомянуть о влиянии ошибок экспериментальных полюсных фигур [12]. Автор принимал участие (проведение и обработка результатов нейтронного эксперимента на установке SKAT (глава 1) в работе по изучению распределения ошибок при измерении полюсных фигур для образца из сплава МА2-1 (Mg+4.5%Al+1%Zn).

Качество ПФ зависит от ряда факторов, которые приводят к различного рода погрешностям на ПФ. Среди них ограниченная статистика нейтронов, которая является причиной статистических ошибок в оценке интегральных

интенсивностей дифракционных рефлексов, связанная, с конечным временем измерения образца Другим фактором статистического характера является ориентационная статистика, которая отражает статистические свойства изучаемого образца. А именно, конечное число кристаллитов в образце и их конкретное распределение по объему приводит к статистическим ошибкам значений ПФ в узлах сетки Еще одним фактором, влияющим на качество ПФ, являются геометрические особенности эксперимента используемая в эксперименте дискретная сетка измерения на сфере (ее тип и параметры) покрытие сферы областями вокруг точек сетки, в которых происходит детектирование интенсивностей полюсной плотности, и которая связана с детекторной системой и системой коллимации Этот тип погрешностей может быть назван как ошибки аппроксимации Другие факторы методического плана, такие как, точность определения поправок на эффективность детекторов, поправок на поглощение и т п, в данной работе не рассматриваются, поскольку зависят главным образом от искусства экспериментатора и других трудно формализуемых причин

В четвертой главе описывается возможность применения количественного текстурного анализа для вычисления усредненных физических свойств

Среднее значение \bar{E} свойства поликристалла полностью определяется свойствами составляющих его зерен, и ФРО Если рассматривать упругие свойства в тензорном виде и учитывать закон Гука [2], то арифметическое усреднение \bar{E} можно представить в виде суперпозиции свойств отдельных монокристаллов или в виде интегрирования произведения функции распределения и тензора четвертого ранга

$$(\bar{E}_{ijkl})_A = \frac{1}{8\pi^2} \int \int_{G(g)} (E_{ijkl}(g))_B f(g) dg \quad (16)$$

Под $(E_{\beta})_g = E_{ijkl}(g)$ подразумеваются компоненты тензора модуля упругости, преобразованные с помощью матрицы поворота по закону преобразования тензора четвертого ранга

То есть, если в качестве входных параметров используются модули жесткости или модули упругой податливости, то мы можем записать

$$E_{ijkl} \equiv C_{ijkl}, \quad E_{ijkl} \equiv S_{ijkl}$$

В работе усреднение производится с помощью интегрирования методом Гаусса. Формула для интегрирования трехмерного интеграла имеет следующий вид

$$\iiint_{0 \ 0 \ 0}^{2\pi \ \pi \ 2\pi} f(\alpha, \beta, \gamma) d\alpha d\beta d\gamma \sim \frac{\pi^3}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N f(\alpha_i, \beta_j, \gamma_k) w_i w_j w_k, \quad (17)$$

где $\alpha_i, \beta_j, \gamma_k$ - узлы подынтегральной функции, а w_i, w_j, w_k - весовые функции

С помощью тензорного представления упругих констант были рассчитаны полные модули упругой податливости с найденными параметрами модельной ПФ для материалов магниевого сплава (Mg+4 5%Al +1%Zn) и титана (экспериментально чистый образец)

В таблице 1 представлены значения коэффициентов жесткости для модельного магния, рассчитанные путем усреднения нормального распределения канонического вида с параметрами $a_{11} = 0,9$, $a_{22} = 0,8$, $a_{33} = 0,2$ и с центром распределения $\alpha_0, \beta_0, \gamma_0 = (0,0,0)$ и экспериментально измеренные в институте металлургии им А.А. Байкова (ИМЕТ) коэффициенты жесткости горячекатаного магния

Мод магний	Экс магний
$\bar{C}_{11} = 58,37$	$C_{11} = 59,87$
$\bar{C}_{12} = 23,80$	$C_{12} = 26,97$
$\bar{C}_{22} = 58,37$	$C_{22} = 59,97$
$\bar{C}_{66} = 17,29$	$C_{66} = 16,71$

Таблица 1 Значения коэффициентов жесткости для модельного и экспериментального образца магния (Mg + 4 5%Al +1%Zn)

Совпадение численных данных с экспериментальными показывает хорошее приближение данного метода расчета усредненных модулей жесткости

По рассчитанным модулям упругой податливости были вычислены модули Юнга для поликристаллов магния и титана. Выражение указательной поверхности через усредненные модули упругой податливости имеет следующий вид

$$E^{-1}(\vec{y}) = \bar{s}_{11}y_1^4 + \bar{s}_{22}y_2^4 + \bar{s}_{33}y_3^4 + (\bar{s}_{44} + 2\bar{s}_{23})y_2^2y_3^2 + (\bar{s}_{55} + 2\bar{s}_{13})y_1^2y_3^2 + (\bar{s}_{66} + 2\bar{s}_{12})y_1^2y_2^2, \quad (18)$$

Для магния и титана с выбранными параметрами полуширины нормального распределения канонического вида, на рисунке 4 представлены указательные поверхности модулей Юнга

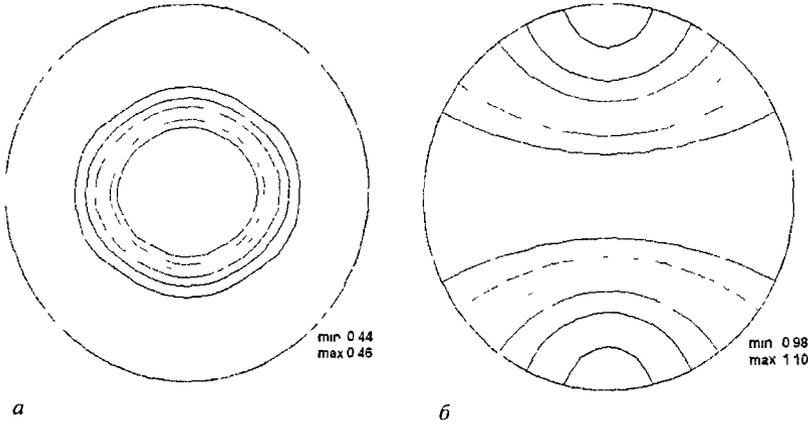


Рис 4 Указательные поверхности модуля Юнга для поликристаллов, магния (а) и титана (б) (ГПа⁻¹)

В данной главе реализован алгоритм расчета усредненных упругих свойств материалов гексагональной симметрии, где в качестве аппроксимации для функции распределения зерен выбрано нормальное распределение канонического вида (5)

Расчеты коэффициентов упругой податливости проведены для поликристаллических магния и титана

Для исследуемых материалов рассчитаны указательные поверхности модулей Юнга С помощью описанной методики были вычислены упругие модули с учетом кристаллографической текстуры, имеющей не круговой характер

В заключение диссертации представлены основные результаты и выводы работы

Заключение

Кратко результаты работы следующие

1 В работе разработан алгоритм и составлен комплекс программ для расчета нормальных распределений канонического вида

2 Исследована зависимость количества членов ряда от параметров канонического распределения

3 Для ФРО в классе данных распределений рассмотрена задача расчета полюсных фигур, описывающих текстуру гексагональных поликристаллов Для образцов магния (+4 5%Al +1%Zn) и титана получены ФРО в виде нормального распределения канонического вида

4 Вычислены модельные полюсные фигуры, которые сравниваются с экспериментальными ПФ исследуемых образцов

5 Рассмотрен и реализован на компьютере алгоритм расчета усредненных модулей упругости для поликристаллов магния и титана, где в качестве весовой функции используется НР канонического вида Для исследуемых материалов рассчитаны указательные поверхности модулей Юнга, полученные путем интегрирования ФРО, представленной в виде суммы НР канонического вида

Цитируемая в реферате литература

- 1 Савелова Т И Функции распределения зерен по ориентациям в поликристаллах и их Гауссовские приближения // М Зав лаб - 1984 Том 50 №5 С 48-52
- 2 Сиротин Ю И, Шаскольская М П Основы кристаллофизики - М Наука 1975 680с
- 3 Matthies S, Vinel G W, Helming K Standard Distributions in Texture Analysis // Akademie-Verlag Berlin - 1987 Vol 1-3 p 478
- 4 Brokmeier H G Texture Analysis by Neutron Diffraction // Proc of the ICOTOM-10, Clausthal, Ed H J Bunge, Materials Science Forum - 1994 Vol 157-162 pp 59-70
- 5 Боровков М В, Савелова Т И Нормальные распределения на $SO(3)$ - М МИФИ 2002 96с
- 6 Савелова Т И, Иванова Т М Моделирование функции распределения ориентаций с помощью канонических нормальных распределений на группе вращений трехмерного пространства // Тез Конф Обратные и некорректно поставленные задачи - М МГУ. 1998 С 86-89
- 7 Савелова Т И, Бухарова Т И Представление группы $SU(2)$ и их применения - М МИФИ 1996 114с
- 8 Виленкин Н Я Специальные функции и теория представлений групп - М Наука 1965 588с
- 9 Press W H, Teukolsky S A, Vetterling W T, Flannery B P Numerical Recipes in Fortran The Art of Scientific Computing - Cambridge University Press - 1975 p 2054
- 10 Nikolayev D I, Savyolova T I Normal distribution on the rotation group $SO(3)$ // Texture and Microstructures - 1997 Vol 29 pp 201-233
- 11 Nikolayev D I Numerical optimization of the series method // Materials Science Forum - 1994 Vols 157-162 pp 393-400

12 Nikolayev D I , Lychagina T A , Nikishin A V , Yudin V V. Study of error distribution in measured pole figures // Solid State Phenomena - 2005 Vol 105 pp 77-83

Основные публикации по теме диссертации

1 Nikolayev D I , Lychagina T A , Nikishin A V , Yudin V V Investigation of measured pole figures errors // Materials Science Forum - 2005 Vols 495-497 pp 307-312

2 Nikolayev D I , Lychagina T A , Nikishin A V , Yudin V.V Study of error distribution in measured pole figures // Solid State Phenomena - 2005. Vol 105 pp 77-83

3 Никишин А В , Николаев Д И Численный анализ канонических нормальных распределений на $SO(3)$ и применение его при изучении текстуры поликристаллов // М Зав лаб - 2007 Т 73 № 3 С.37-43

4 Никишин А В , Николаев Д И. Вычисление усредненных упругих свойств материалов, имеющих не круговой характер полюсных фигур // М · Кристаллография - 2008 Т 53 № 3 С 526-529

5 Никишин А В , Николаев Д И Моделирование влияния текстуры на вычисление средних упругих свойств поликристаллов // VIII научная конференции молодых ученых и специалистов, ОИЯИ, Дубна, Сб научных трудов 2004 Т 8 С 74-76

6. Никишин А В , Николаев Д И Вычисление канонических нормальных распределений на $SO(3)$ и полюсных фигур // Научная сессия МИФИ - 2005 Сб научных трудов 2005 Т 7 С 135-137

7 Никишин А В , Николаев Д И Анализ параметров канонического нормального распределения на группе $SO(3)$ // Научная сессия МИФИ - 2006 Сб научных трудов 2006 Т 7 С 140-142

8 Никишин А В , Николаев Д И Численный анализ вычисления усредненных свойств материалов // V рабочее совещание по исследованиям на реакторе ИБР-2, Дубна 2006 С.53

Подписано в печать 29 04 2008 г
Печать трафаретная

Заказ № 357
Тираж 100 экз

Типография «11-й ФОРМАТ»
ИНН 7726330900
115230, Москва, Варшавское ш , 36
(495) 975-78-56, (499) 788-78-56
www.autoreferat.ru