

На правах рукописи



СЫПЧЕНКО МАРИЯ ВЛАДИМИРОВНА

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ОРИЕНТАЦИЙ ПО
КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИМ ОРИЕНТИРОВКАМ НА
ГРУППЕ $SO(3)$**

Специальность 05.13.18 – математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

Автореферат на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва – 2010

Работа выполнена в Национальном исследовательском ядерном университете «МИФИ».

Научный руководитель:

доктор физико-математических наук,
профессор, Савелова Татьяна Ивановна

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук, профессор,
Яковлев Виктор Борисович,
Национальный исследовательский университет
Московский государственный институт
электронной техники

доктор физико-математических наук,
ведущий научный сотрудник,
Амочкина Татьяна Владимировна,
Научно-исследовательский вычислительный центр
МГУ им. Ломоносова

Ведущая организация:

Институт металлургии и
материаловедения им. А.А. Байкова РАН

Защита состоится « __ » октября 2010 г. в 15 часов 00 минут на заседании диссертационного совета Д212.130.09 в Национальном исследовательском ядерном университете «МИФИ» по адресу: 115409, г. Москва, Каширское шоссе, д. 31, тел. 324-84-98, 323-92-56.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке НИЯУ МИФИ.

Просим принять участие в работе совета или прислать отзыв в одном экземпляре, заверенном печатью организации.

Автореферат разослан « __ » сентября 2010 г.

Ученый секретарь диссертационного совета
доктор физико-математических наук, профессор



Леонов А.С.

Общая характеристика работы

Объектом исследования диссертационной работы является количественная характеристика текстуры материала – функция распределения ориентировок поликристалла, получаемая на основе измерений отдельных кристаллографических ориентаций зерен.

Актуальность работы. Большинство конструкционных материалов являются поликристаллами, и их свойства (физические, электрические, химические, оптические) зависят от текстуры, т.е. от преимущественной ориентировки зерен, образующих материал. Наиболее полно текстуру описывает функция распределения зерен по ориентациям (**ФРО**), которая представляет собой вероятность обнаружить в образце кристаллит с ориентацией g (g является вращением трехмерного евклидова пространства, $g \in \text{SO}(3)$). ФРО используется для решения различных научных и производственных задач: вычисления усредненных свойств материала, исследования методов обработки материала, изучения процессов формирования текстуры и т.д.

Ранее ФРО вычислялась из экспериментально полученных рентгеновским или нейтронным методом полюсных фигур (**ПФ**) [1–2]. В последние годы активно развиваются методы электронной микроскопии, в частности метод дифракции отраженных электронов (**EBSD** – Electron Backscattering Diffraction). Эти методы позволяют получать большое количество измерений (порядка 10^4 – 10^7) отдельных кристаллографических ориентаций и предоставляют исследователям обширную информацию о текстуре материала: позволяют изучать размеры зерен, границы между зернами, углы разориентации между двумя соседними зернами (т.е. разницы между соседними ориентациями). Методы электронной микроскопии получили широкое распространение, однако ряд вопросов о точности получаемых результатов остается открытым.

Перечислим некоторые такие вопросы.

1) Вопрос об определении необходимого количества зерен, измеренных с помощью метода EBSD. Во многих исследованиях, например, в [3], отмечено, что ФРО одного и того же материала, вычисленные по различным экспериментальным данным (рентгеновским ПФ и с помощью методов электронной микроскопии), могут существенно отличаться, что обусловлено различной статисти-

кой измерений. Поэтому представляется важным проведение исследования зависимости точности вычисления ФРО от объема измеренных ориентаций.

2) Важен вопрос об учете остроты текстуры (аналога дисперсии распределения ориентаций зерен) при выборе объема выборки, шага измерений и других параметров проведения эксперимента [4, 5].

3) Достаточно новым и мало изученным является фактор статистической зависимости соседних ориентировок [6, 7] и его связь с шагом измерения.

4) Является важным вопрос о выборе порогового значения угла разориентации между соседними зернами, позволяющего определить количество, границы и формы зерен [8].

5) Из-за сильной деформации образца, а также на границах зерен не всегда можно определить ориентацию кристаллитов. Наличие таких неиндексируемых областей является одной из проблем EBSD метода, которую решают усреднением неопределенных ориентаций по известным соседним.

Можно сказать, что развитие технологии эксперимента опережает развитие математического аппарата по обработке экспериментальных данных электронной микроскопии. Поэтому представляет интерес изучение подобных вопросов с помощью математического моделирования отдельных ориентаций и ФРО.

В связи с этим в диссертационной работе предложен метод математического моделирования ФРО, который позволил исследовать влияние различных параметров проведения эксперимента и параметров обработки данных на точность вычисления ФРО.

Целью диссертационной работы является разработка метода моделирования функции распределения ориентаций зерен поликристаллического материала, составление комплекса программ и проведение ряда исследований о влиянии различных факторов на точность вычисления ФРО.

Методы исследования. В диссертационной работе для получения отдельных ориентаций использовался специализированный метод Монте-Карло, описанный в работе [4]. Этот метод позволяет моделировать дискретные нормальные распределения на группе $SO(3)$. Для вычисления ФРО по дискретным данным применялся ядерный метод [9].

В диссертационной работе решены следующие задачи:

- 1) разработан метод математического моделирования функции распределения ориентаций по набору отдельных ориентировок, составлен комплекс программ и проведены численные расчеты;
- 2) исследована зависимость точности восстановления ФРО от числовых значений параметров, а именно: объема выборки, характеристики распределения (аналога остроты текстуры);
- 3) показано влияние погрешности определения ориентации на результат вычисления ФРО;
- 4) численно определены наилучшие ядра сглаживания для ядерного метода: это ядро Епанечникова и ядро с косинусом;
- 5) предложено два метода определения параметра сглаживания;
- 6) разработана модель статистической зависимости элементов выборки, проведено численное исследование влияния статистической зависимости ориентировок на результат вычисления ФРО;
- 7) предложен метод вычисления усредненных упругих свойств по отдельным ориентациям. По экспериментально полученным данным проведен расчет усредненных упругих свойств поликристаллического магния и вычислена ФРО.

Научная новизна работы

- Впервые наиболее полно аналитически и численно проведено математическое моделирование ФРО с помощью специализированного метода Монте-Карло вычисления дискретных нормальных распределений на группе $SO(3)$.
- Проведено исследование точности вычисления ФРО по набору индивидуальных кристаллографических ориентаций ядерным методом в зависимости от различных параметров (объем выборки, острота текстуры, количество сверток, ядро сглаживания, параметр сглаживания).

- Проведено моделирование погрешностей измерений ориентаций, исследовано их влияние на точность вычисления ФРО.
- Впервые предложена модель и алгоритм вычисления статистической зависимости ориентаций, проведено исследование влияния статистической зависимости на точность вычисления ФРО.

Обоснованность и достоверность результатов работы.

Практически любую текстуру можно аппроксимировать стандартными распределениями (одним или несколькими), это показано, например, в работе [10]. Поэтому в диссертационной работе для моделирования набора ориентаций зерен поликристалла использовалось дискретное нормальное распределение на группе $SO(3)$, получаемое методом Монте-Карло [4]. Для проверки достоверности получаемых результатов модельная ФРО сравнивалась с известным распределением в виде ряда по обобщенным шаровым функциям [11].

Апробация работы.

Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на следующих научных семинарах и конференциях:

- 1) научный семинар кафедры прикладной математики НИ-ЯУ МИФИ, 2007, 2008, 2009 и 2010 гг.;
- 2) международная конференция “New Achievements in Materials and Environmental Sciences”, Metz, France, 7–9 ноября 2007 г.;
- 3) международная конференция «Inverse Problems: Modeling and Simulation», at Oludeniz, Fithiye, Turkey, May 26–30, 2008 г.;
- 4) научный семинар в университете г. Метц (Франция), 10 июля 2008 г.;
- 5) международная конференция «Рентгеновское, синхротронное излучения, нейтроны и электроны для исследования наносистем и материалов. Нано-био-инфо-когнитивные технологии», Москва, Россия, 16–20 ноября, 2009 г.;
- 6) ежегодная Научная Сессия НИЯУ МИФИ, Москва, январь 2006, 2007, 2008 и 2009 гг.;
- 7) научный семинар в Институте металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, 27 мая 2010 г.;

8) научный семинар в Объединенном институте ядерных исследований, ЛНФ, Дубна, 8 июня 2010 г.

Практическая значимость работы. Полученные в диссертационной работе результаты позволяют подобрать некоторые параметры проведения EBSD измерений ориентаций отдельных зерен, параметры вычисления ФРО по набору ориентаций, помогут также оценить погрешность вычисления ФРО.

На защиту выносятся:

1) метод численного моделирования ФРО по набору отдельных ориентаций, полученных специализированным методом Монте-Карло для нормальных распределений на группе $SO(3)$;

2) результаты расчета зависимости точности вычисления ФРО от числовых значений параметров: объем выборки и острота текстуры при использовании ядерного метода;

3) выбор ядра сглаживания для вычисления ФРО;

4) методы определения параметра сглаживания в ядерном методе;

5) модель и алгоритм численного расчета статистической зависимости элементов выборки, результат ее влияния на точность вычисления ФРО;

6) результаты численного моделирования погрешности в элементах выборки и ее влияния на результат вычисления ФРО;

7) метод расчета упругих свойств материала на основе данных EBSD измерений.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, пяти разделов и заключения. Работа содержит 123 страницы, включая 35 рисунков, 11 таблиц и список литературы, состоящий из 131 наименования литературных источников.

Краткое содержание работы

Во введении обсуждается актуальность темы исследования, приводится общая характеристика диссертационной работы, а так-

же ее структура, дается краткий обзор литературы по тематике работы.

В первом разделе приводятся основные понятия текстурного анализа, такие как: ориентация кристаллита, функция распределения ориентаций, полюсная фигура. В первом разделе описываются экспериментальные методы получения ориентировок зерен поликристаллического материала: рентгеновский способ измерения полюсных фигур, нейтронный способ измерения полюсных фигур, методы электронной микроскопии измерения ориентировок отдельных зерен (SEM, TEM, EBSD). Схема EBSD установки приведена на рис. 1.

В разделе представлен обзор литературы, освещающей направления научных исследований последних лет по текстурному анализу. Приведены основные методы вычисления ФРО по дискретным наборам данных: метод гистограмм, проекционный и ядерный методы. Ядерный метод восстановления ФРО по дискретному набору данных заключается в следующем [12]:

Пусть функция распределения ориентаций $f(g)$, $g \in SO(3)$ представляется в виде ряда по обобщенным шаровым функциям $T_l^{mn}(g)$ [11]:

$$f(g) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m,n=-l}^l C_l^{mn} T_l^{mn}(g), \quad (1)$$

вращение g задается тремя углами Эйлера: $g = (\varphi, \theta, \psi)$, $-\pi \leq \varphi, \psi < \pi$, $0 \leq \theta \leq \pi$.

По выборке из независимых ориентировок $g_1, \dots, g_N$, отвечающих функции распределения $f(g)$, рассмотрим ядерную оценку

$$f_N(g) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N q(g_i^{-1}g), \quad (2)$$

где N – объем выборки, $q(t) \geq 0$ – ядерная функция (или ядро сглаживания) с условием нормировки на группе:

$$\int_{-\pi}^{\pi} q(t) \frac{1}{\pi} \sin^2 \frac{t}{2} dt = 1. \quad (3)$$

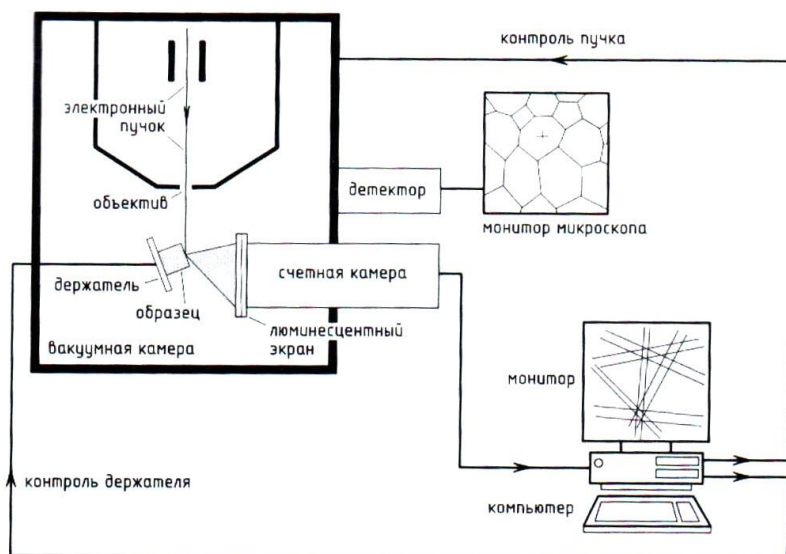


Рис. 1. Схема EBSD установки

Во втором разделе дается определение нормального распределения на группе $SO(3)$, описывается специализированный метод Монте-Карло получения дискретных нормальных распределений на группе $SO(3)$ [4]. Согласно этому методу каждое вращение моделируется в виде матрицы:

$$\eta = \prod_{j=1}^n \left(g_n^0 g_0 \left\{ \prod_{i=1}^3 q^i g_1 \left[2 \left(\frac{6\tilde{\alpha}_{ii}}{n} \right)^{1/2} \left(\eta_i^j - \frac{1}{2} \right) \right] (q^i)^{-1} \right\} (g_0)^{-1} \right), \quad (4)$$

где η_i^j – независимые реализации равномерно распределенной случайной величины на интервале $[0,1]$, n – количество сверток, q^i – параметры группы, g_0 , g_n^0 , $\tilde{\alpha}_{ii}$ – параметры нормального распределения. Для получения одного вращения, являющегося приближенной реализацией нормально распределенной на $SO(3)$ величины, требуется $3n$ случайных равномерно распределенных на $[0,1]$ чисел.

В диссертационной работе для проведения численных экспериментов используется центральное нормальное распределение (ЦНР), представимое в следующем виде [10]:

$$f(t) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \exp\{-l(l+1)\varepsilon^2\} \sin(l+1/2)t / \sin(t/2) \frac{1}{\pi} \sin^2 \frac{t}{2}, \quad (5)$$

где параметр t связан с углами Эйлера соотношением $\cos(t/2) = \cos(\theta/2)\cos((\varphi+\psi)/2)$, $-\pi \leq t < \pi$, ε – параметр ЦНР (аналог дисперсии) или параметр остроты текстуры. При $\varepsilon \rightarrow +\infty$ получаем равномерное распределение зерен по ориентациям, при $\varepsilon \rightarrow 0$ – монокристалл. Ряд (5) обрезается при значении $l_{\max} = \sqrt{-\ln \delta_0} / \varepsilon$, обеспечивающем точность вычислений $\delta_0 = 10^{-5}$ [10].

Для проведения численных расчетов ФРО автором составлены комплексы программ в системе аналитических вычислений Maple12 [13].

По критерию χ^2 проводится сравнение центрального нормального распределения в виде ряда по обобщенным шаровым функциям и дискретного ЦНР, полученного методом Монте-Карло. С уровнем доверия 95% гипотеза о совпадении этих распределений принимается для всех значений объема выборки ($N=500, 1000, 2000, 3000$) и параметра остроты текстуры ($\varepsilon^2 = 2^{-k}$, $k=0, \dots, 6$).

В разделе приводятся результаты численного исследования точности ядерного метода вычисления ФРО по наборам отдельных ориентировок в зависимости от числовых значений параметров: объема выборки N , параметра остроты текстуры ε , количества сверток n (в том числе и для трехмерного случая). Для одномерного случая ЦНР (5) в качестве ядерной оценки используется

$$f_N(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N q\left(\frac{t-t_i}{h_N}\right), \quad (6)$$

где h_N – параметр сглаживания.

Результаты представлены на графиках 2–4 для значений объема выборки $N=500$ (рис. 2), $N=1000$ (рис. 3) и $N=3000$ (рис. 4) и параметров распределения $\varepsilon=1$ (рис. 2–4а), $\varepsilon=1/2$ (рис. 2–4б) и $\varepsilon=1/8$ (рис. 2–4в). Параметр сглаживания принимался $h_N=0,1$. Штриховой линией представлено точное распределение (полученное суммированием ряда (5)), сплошной линией – сглаженное ядерным методом.

Можно заключить, что при уменьшении параметра остроты текстуры погрешность вычисления ФРО растет, а при увеличении объема выборки N – погрешность уменьшается.

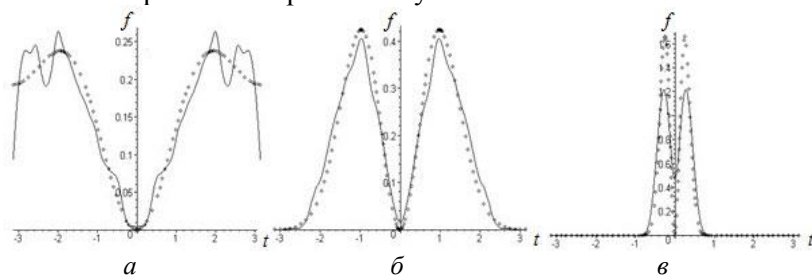


Рис. 2. Сравнение сглаженного (сплошная линия) и точного (штриховая линия) распределений при объеме выборки $N=500$ (случай $a - \varepsilon=1$, случай $б - \varepsilon=1/2$, случай $в - \varepsilon=1/8$)

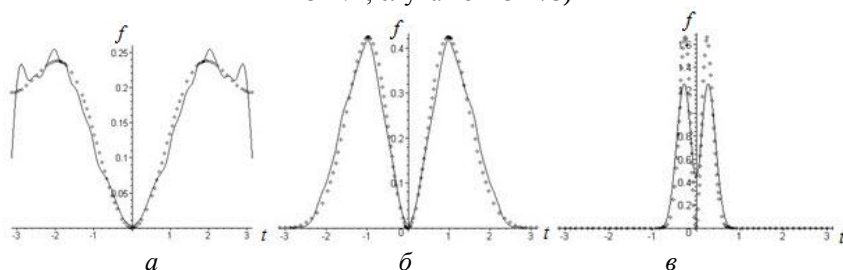


Рис. 3. Сравнение сглаженного (сплошная линия) и точного (штриховая линия) распределений при объеме выборки $N=1000$ (случай $a - \varepsilon=1$, случай $б - \varepsilon=1/2$, случай $в - \varepsilon=1/8$)

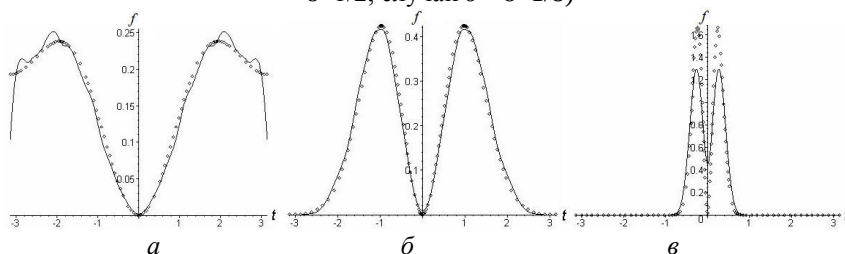


Рис. 4. Сравнение сглаженного (сплошная линия) и точного (штриховая линия) распределений при объеме выборки $N=3000$ (случай $a - \varepsilon=1$, случай $б - \varepsilon=1/2$, случай $в - \varepsilon=1/8$)

Во втором разделе рассматривается, в том числе, и трехмерный случай ЦНР. Результаты представлены в диссертационной ра-

боте на графиках и в таблицах в виде среднеквадратичного отклонения точной ФРО в виде частичной суммы ряда (5) от сглаженной.

Во втором разделе проводилось исследование влияния погрешности определения ориентировок на результат вычисления ФРО. Для этого к каждому элементу выборки добавлялась случайная погрешность, распределенная равномерно или по нормальному закону. Рассматривались выборки объемом $N=500$ с остротой текстуры $\varepsilon^2=2^{-k}$, $k=0, \dots, 6$, вычислялась ФРО. Получено, что погрешности элементов выборки порядка до 10 % от максимума точной функции влияют на результат незначительно, а погрешности порядка 10–30 % – сильно искажают восстановленную функцию распределения.

Таким образом, во втором разделе с помощью критерия χ^2 показано совпадение дискретного распределения и распределения в виде ряда по обобщенным шаровым функциям. Также получены зависимости точности вычисления ФРО от числовых значений объема выборки, остроты текстуры, количества сверток, погрешности определения ориентаций.

В третьем разделе проводится численное исследование влияния ядра сглаживания на точность восстановления ФРО по набору отдельных ориентировок, рассматриваются следующие ядра [15]:

$$а) \text{ гауссово ядро } q_1(t) = C_1 \exp(-t^2/2); \quad (7)$$

$$б) \text{ ядро } q_2(t) = C_2 \cos^{2k}\left(\frac{t}{2}\right), \quad k = 1, 2, \dots; \quad (8)$$

$$в) \text{ ядро Епанечникова } q_3(t) = C_3(1-t^2), \quad |t| \leq 1; \quad (9)$$

$$г) \text{ ядро Дирихле } q_4(t) = C_4 \frac{\sin(t)}{t}; \quad (10)$$

$$д) \text{ ядро Валле-Пуссена } q_5(t) = C_5 \left(\frac{\sin(t/2)}{t/2} \right)^2; \quad (11)$$

$$е) \text{ модифицированное ядро Валле-Пуссена } q_6(t) = C_6 \left\{ (a+1)q_5(t) - \frac{a^2}{a+1} q_5\left(\frac{at}{a+2}\right) \right\}, \quad a > 0; \quad (12)$$

ж) ядро Абеля–Пуассона

$$q_7(t) = C_7(1-k^2) \frac{(1+k^2)^2 + 4k^2 \cos^2(t/2)}{\left((1+k^2)^2 - 4k^2 \cos^2(t/2)\right)^2}; \quad (13)$$

з) оптимальное в метрике L_2 ядро $q^{opt}(t)$, полученное в [14]:

$$q^{opt}(t) = \sum_{l=0}^{\infty} Q_l^{opt} \sin(l+1/2)t / \sin(t/2),$$

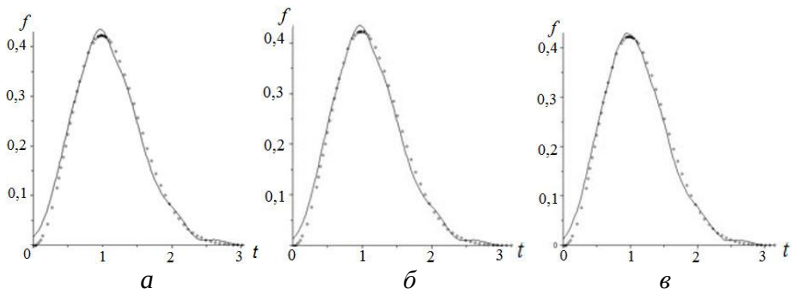
$$Q_l^{opt} = \frac{(2l+1) \sum_{m,n=-l}^l |C_{mn}^l|^2}{\left\{ \sum_{m,n=-l}^l |C_{mn}^l|^2 \right\} + \left\{ \sum_{m,n=-l}^l D\hat{C}_{mn}^l \right\}}, \quad (14)$$

где $D\hat{C}_{mn}^l$ – дисперсии оценки коэффициентов разложения C_{mn}^l

Для каждого ядра автором проводится вычисление наилучшего значения параметра сглаживания, путем минимизации величины:

$$\min_{h_N} \Delta^2 = \min_{h_N} \int_0^{\pi} (f(t) - f_N(t))^2 dt. \quad (15)$$

Результаты сглаживания для параметра распределения $\varepsilon=1/2$ и объема выборки $N=500$ представлены на рис. 5, $a-z$, для ядер $a-z$ соответственно. Штриховой линией представлено точное распределение (5), сплошной линией – сглаженное ядерным методом.



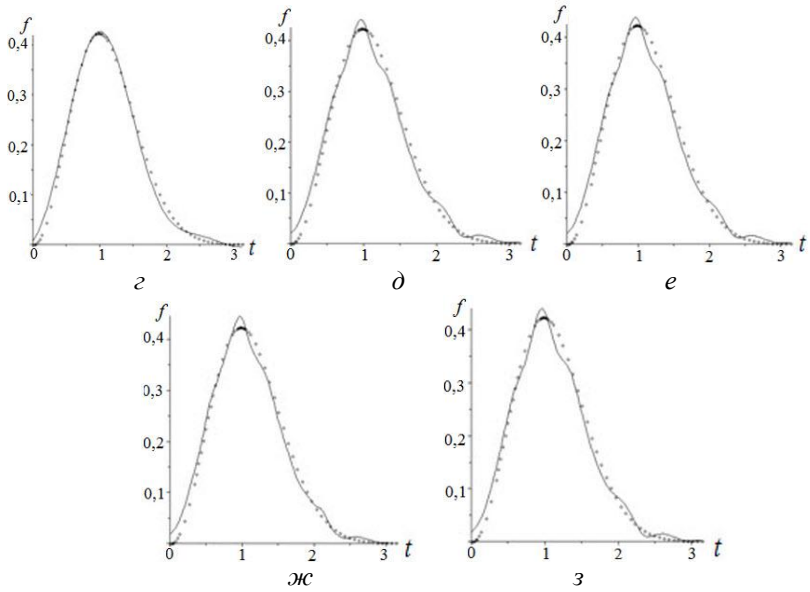


Рис. 5. Сравнение ФРО: точной (штриховая линия) и восстановленной ядерным методом с различными ядрами (сплошная линия), $\varepsilon = 1/2$ (a – ядро Гаусса, b – ядро с косинусом, v – ядро Епанечникова, z – ядро Дирихле, ∂ – ядро Валле-Пуссена, e – модифицированное ядро Валле-Пуссена, $ж$ – ядро Абеля-Пуассона, $з$ – оптимальное в метрике L_2 ядро)

На численных примерах показывается, что лучшими являются: ядро Епанечникова и ядро с косинусом.

Для использования на практике автором впервые предлагается два метода вычисления параметра сглаживания. Первый метод основывается на сравнении рентгеновских или нейтронных полюсных фигур и полюсных фигур, вычисленных по отдельным ориентировкам:

$$\min_{h_N} \frac{\|P_h(\bar{y}) - \hat{P}_h(\bar{y})\|_{L_2}}{\|P_h(\bar{y})\|_{L_2}}, \quad (16)$$

где $P_h(\bar{y})$ – полюсная фигура, измеренная рентгеновским или нейтронным способом, $\hat{P}_h(\bar{y})$ – интегральная проекция ФРО на единичную сферу S^2 , вычисленная на основе ядерной оценки ФРО (2) [1, 10].

Второй метод основывается на использовании статистики Пирсона:

$$\min_{h_N} \left(\sum_{i=1}^v \frac{(N_i - N\hat{p}_i)^2}{N_i} + \alpha\Omega \right), \quad (17)$$

где N_i – количество ориентировок g_i , попавших в интервал разбиения G_i , $\hat{p}_i = \int_{G_i} f_N^k(g) dg$ – вероятность попасть в интервал разбиения G_i , N – объем измеренных ориентировок, Ω – стабилизирующий функционал. Параметр $\alpha > 0$ находится подбором. В таблице 1 приведены примеры вычисления параметра сглаживания по перечисленным методам для ядра Епанечникова и ядра Гаусса, как наиболее часто используемого на практике.

Таблица 1. Сравнение значений параметра сглаживания

Метод получения h_N	Ядро Гаусса	Ядро Епанечникова
Через ПФ	0,275	0,420
Через статистику Пирсона	0,158	0,675
Точное значение (из сравнения с точным распределением)	0,185	0,285

Таким образом, в третьем разделе с помощью численных исследований показано, что лучшими являются ядра Епанечникова и ядро с косинусом, также предложено два метода численного определения параметра сглаживания для ядерного метода.

В четвертом разделе содержится обзор исследований статистической зависимости ориентаций соседних зерен [6, 7]. Приводятся аналитические оценки математического ожидания и дисперсии ядерной оценки ФРО для статистически зависимых данных [16].

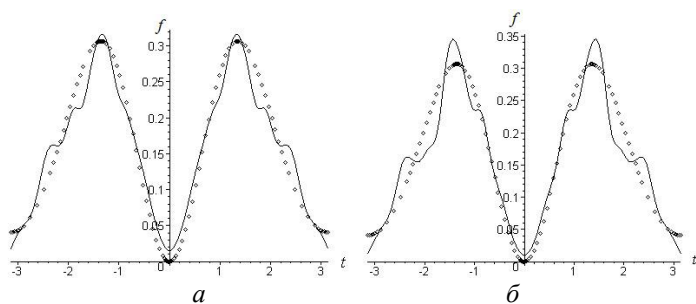
Автором впервые предлагается модель статистически зависимых ориентаций. Составляется выборка из N ориентаций следующим образом: $t_1, \dots, t_{N_1}, t_1, \dots, t_{N_2}, \dots, t_1, \dots, t_{N_k}$, где $N_1 + N_2 + \dots + N_k = N$, $N_1 \geq N_2 \geq \dots \geq N_k$. Первые N_1 элементов независимы между собой и получены методом Монте-Карло [4]. Следующие N_2 ори-

ентаций взяты подряд из предыдущей выборки N_1 , начиная с первого элемента, и добавлены в конец конструируемой выборки. Следующие N_3 элементов взяты подряд начиная с первого элемента из выборки N_1 и т.д. Таким образом, конструируется выборка из N элементов, состоящая из нескольких подвыборок k из повторяющихся ориентаций. Такая модель означает, что более крупные зерна измеряются чаще, более мелкие – реже. Для $N = 500$ рассмотрено 4 примера:

- а) $k = 3, N_1 = 250, N_2 = 166, N_3 = 84$;
- б) $k = 6, N_1 = 200, N_2 = 100, N_3 = 80, N_4 = 60, N_5 = 40, N_6 = 20$;
- в) $k = 9, N_1 = 100, N_2 = 90, N_3 = 80, N_4 = 70, N_5 = 60, N_6 = 40, N_7 = 30, N_8 = 20, N_9 = 10$;
- г) $k = 1, N = 500$.

Пример *в* представляет собой случай с наиболее высоким уровнем статистической зависимости, в случае *г* – все ориентировки статистически независимы. На рис. 6, *а–г* приведены данные ФРО для случаев *а–г* соответственно. Штриховой линией показано точное распределение в виде частичной суммы ряда Фурье (5), сплошной линией – сглаженное ядерным методом. Параметр распределения $\varepsilon = 1/2$.

В случае сильной статистической зависимости можно наблюдать возрастание ФРО в районе максимума (рис. 6*в*), что можно объяснить тем, что одни и те же ориентировки измеряются многократно. Таким образом, получаем ухудшение результатов вычисления, что говорит о необходимости увеличивать объем выборки.



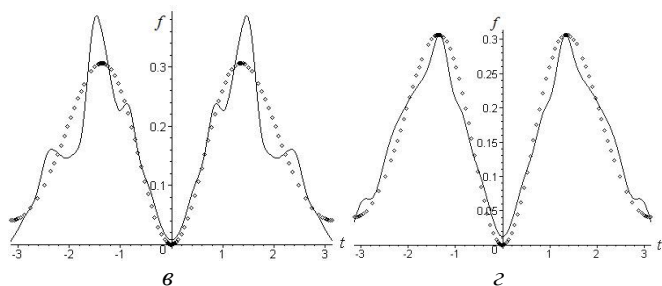


Рис. 6. Сравнение точного распределения с независимыми ориентировками (штриховая линия) и сглаженного – с учетом зависимости (сплошная линия), $N=500$, $\varepsilon=1/2$. На рисунках *a–г* представлены соответствующие случаи зависимости

В разделе предложена модель зеренной структуры образца. Для этого интервал $(0, \pi)$ разбивается на n равных частей, считается количество элементов в каждом участке и строится новая выборка, состоящая из элементов, равных серединам интервалов, повторенным столько раз, сколько элементов попало в каждый участок разбиения. Рассматривается два примера: 50 интервалов разбиения – образец более крупнозернистый и 100 – более мелкозернистый. На рис. 7*а* и 7*б* приведены данные ФРО для случаев 50, 100 интервалов разбиения соответственно. Штриховой линией показано точное распределение, сплошной линией – сглаженное ядерным методом. Параметр распределения $\varepsilon=1/8$.

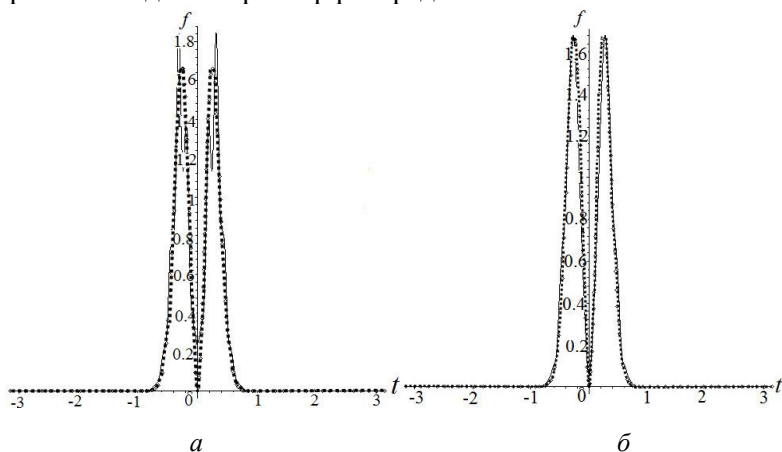


Рис. 7. Сравнение точного распределения (штриховая линия) и сглаженного – с учетом размера зерен (сплошная линия), $N=500$, $\varepsilon=1/8$ (*a* – 50 участков разбиения, *б* – 100 участков разбиения)

На рис. 7а график сильно изрезан в области максимума исходной функции и не достигает минимума в точке $t = 0$. Можно сделать вывод, что в случае крупнозернистых образцов (рис. 7а) – при наличии больших зерен в образце – необходимо увеличивать объем выборки и, соответственно, увеличивать количество измеряемых зерен.

Таким образом, в разделе получено, что наличие статистической зависимости элементов выборки приводит к возрастанию ФРО в районе максимума и требует увеличения объема выборки. Также увеличения объема выборки требует наличие крупных зерен в образце.

В пятом разделе рассматриваются особенности проведения EBSD эксперимента по получению ориентировок зерен поликристаллического материала. По экспериментально полученным ориентировкам вычисляются ФРО и усредненные упругие свойства магния.

Исследование проводится на основе реальных данных ориентировок зерен поликристаллического магния и аустенитной стали. Образец Mg-0.49%Al-0.47%Ca, был получен прессованием при температуре 340°C в институте ИМЕТ им. А.А. Байкова РАН. Образец стали Fe-22%Mn-0.6%C, деформированный сдвигом при комнатной температуре, был получен в лаборатории LETAM университета г. Метц, Франция. Измерения проводились в лаборатории LETAM университета г. Метц, Франция.

Можно отметить следующие факторы, влияющие на точность вычисления ФРО:

- 1) Выбор шага измерения по координатам.
- 2) Задание порогового значения угла разориентации между соседними зернами, определяющего границы между зернами. Например, на рис. 8, а–б приведены две карты EBSD измерений одного и того же материала (сталь) с разными значениями угла разориентации (на рис. 8, а – 3° и получено 127 зерен, на рис. 8, б – 20° , получено 67 зерен). Области, закрашенные одним цветом, представляют собой отдельные зерна. Такие карты получают измерением ориентировки в каждой точке сетки, последовательно перемещаясь по поверхности образца.

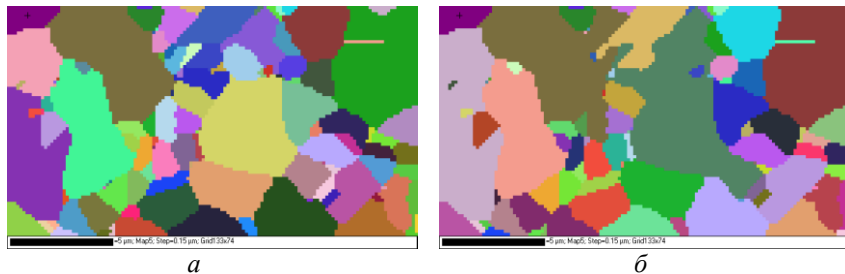


Рис. 8. EBSD карты одного и того же материала (сталь) с различными пороговыми значениями угла разориентации (*а* – 3° , *б* – 20°)

3) Неиндексируемые области, т.е. те участки материала, ориентации которых не удалось измерить. На рис. 9 приведена карта материала стали, более темным цветом отмечены неиндексируемые участки. На практике таким участкам присваиваются ориентации, усредненные по соседним известным ориентировкам.

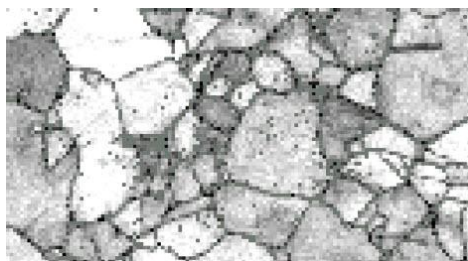
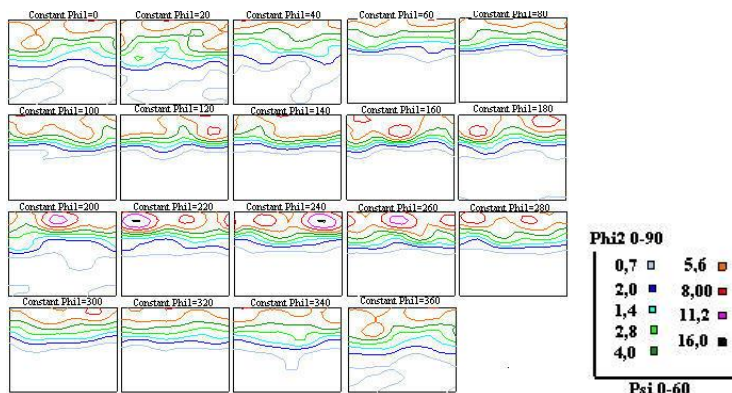


Рис. 9. Неиндексируемые области (EBSD карта стали)

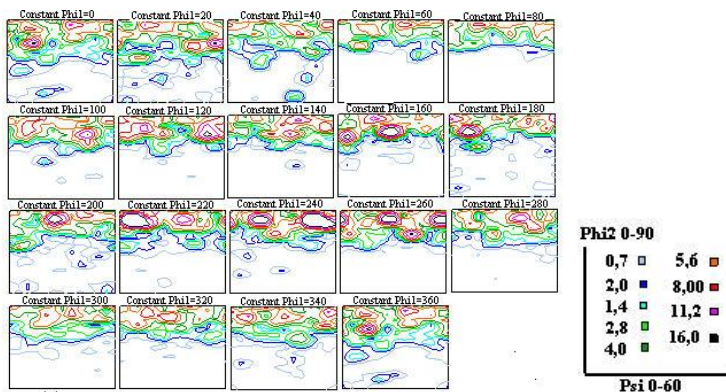
4) Факт статистической зависимости ориентаций оказывает влияние на точность проводимых вычислений.

5) Параметры обработки данных, например, параметр сглаживания в ядерном методе. По экспериментальным данным магния проводилось вычисление ФРО с помощью программы NKL Channel 5 system [17]. На рис. 10 приведены сечения ФРО с различными значениями параметра сглаживания. На рис. 10, *а*, параметр сглаживания равен 8° , на рис. 10, *б*, параметр сглаживания равен 4° .

Можно сказать, что каждый из указанных выше параметров оказывает влияние на точность вычисления ФРО.



a



б

Рис. 10. Сечение ФРО магния при различных значениях параметров обработки (*a* – значение параметра сглаживания 8° , *б* – 4°)

Ранее вычисление усредненных упругих свойств материала требовало вычисления ФРО по экспериментально измеренным полюсным фигурам [18]. В диссертационной работе был предложен метод вычисления упругих свойств напрямую по измеренным ориентировкам.

Основным законом теории упругости твердых тел в области малых деформаций является закон Гука, который для анизотропных тел имеет вид:

$$\varepsilon_{ij} = S_{ijkl} \sigma_{kl}, \quad (18)$$

где S_{ijkl} – тензор упругой податливости, σ_{kl} – тензор напряжения, ε_{ij} – тензор деформации. Для кристаллов гексагональной симметрии число независимых компонент тензора упругой податливости равно пяти [19]. В соответствии с правилом преобразования тензора четвертого ранга при повороте системы координат, компоненты тензора четвертого ранга преобразуются следующим образом:

$$S_{i'j'k'l'}(g) = g_{i'i} g_{j'j} g_{k'k} g_{l'l} S_{ijkl}^0, \quad (19)$$

где S_{ijkl}^0 – свойство монокристалла, $g_{i'i}$ – направляющие косинусы оси i' кристаллической системы координат по отношению к оси i системы координат образца. Зная ориентировки всех зерен образца, можно провести усреднение коэффициентов упругой податливости по зернам $1, \dots, N$:

$$S_{ijkl} = \sum_{m=1}^N W_m S_{ijkl}(g_m), \quad (20)$$

где W_m – весовой коэффициент, соответствующий размеру зерна.

По результатам вычислений было получено, что значения компонент тензора упругой податливости оказались меньше значений компонент тензора упругой податливости монокристалла магния.

Заключение

В диссертационной работе получены следующие результаты:

1) разработан метод математического моделирования функции распределения ориентаций по набору отдельных ориентировок, составлен комплекс программ и проведены вычисления ФРО;

2) исследована зависимость точности восстановления ФРО от числовых значений параметров, а именно: объема выборки, характеристики распределения (аналога остроты текстуры);

3) показано влияние погрешности определения ориентации на результат вычисления ФРО;

4) численно определены наилучшие ядра сглаживания для ядерного метода: это ядро Епанечникова и ядро с косинусом;

5) предложено два метода определения параметра сглаживания: сравнение экспериментальных полюсных фигур (рентгеновских или нейтронных) и полюсных фигур, полученных из набора отдельных ориентировок методом гистограмм; сравнение результатов вычислений и частот по критерию χ^2 ;

6) предложена модель и алгоритм вычисления статистической зависимости элементов выборки, численно исследовано влияние зависимости на результат вычисления ФРО. Показано, что наличие статистической зависимости ориентировок влияет на ФРО как уменьшение объема выборки;

7) предложен метод расчета усредненных упругих свойств поликристалла по отдельным ориентировкам. Для текстурированного магния проведен расчет компонентов тензора упругой податливости.

Автор выражает глубокую признательность своему научному руководителю проф. Т.И. Савеловой за ценные советы и всестороннюю поддержку, а также с.н.с. В.Н. Серебряному за данный образец магния, проф. F. Wagner за предоставленную возможность ознакомления с техникой проведения EBSD измерений во Франции (университет г. Метц).

Список литературы

1) *Савелова Т.И.* Предисловие к книге «Новые методы исследования текстуры поликристаллических материалов», М., Металлургия, 1985, с. 10 – 30.

2) *Bunge H.J.* Texture Analysis in Material Sciences. Mathematical Methods // Butterworths Publ., London, 1982. – p. 593.

3) *E. Guilmeau, C. Henrist, T.S. Suzuki, Y. Sakka, D. Chateigner, D. Grossin and B. Ouladiaf.* Texture of Alumina by neutron diffraction and SEM-EBSD // Textures of Materials, ICOTOM 14, 2005, p. 1395 – 1400.

4) *Боровков М.В., Савелова Т.И.* Нормальные распределения на SO(3). М., МИФИ, 2002. – 94 с.

5) *Prazolo S., Sursaeва V.G., Prior D.J.* Optical grain size measurements: What is being measured? Comparative study of optical and

EBSD grain size determination in 2D Al foil // Textures of Materials, ICOTOM 14, 2005, p. 213 – 218.

6) *Boogaart K.G.* Statistics for individual crystallographic orientation measurement // PHD thesis. Aachen, Shaker, 2002, p. 1 – 161.

7) *Boogaart K.G.* Statistical Errors of Texture Entities Based on EBSD Orientation Measurements // Material Science Forum. ICOTOM 14, 2005, p. 179 – 184.

8) *Савелова Т.И., Сыпченко М.В.* Получение ориентаций отдельных зерен поликристаллов при EBSD измерениях и вычисление ФРО и ПФ, М.: МИФИ, Препринт 001-2009, 20с.

9) *Крянев А.В., Лукин Г.В.* Математические методы обработки неопределенных данных. – М.: ФМЛ, 2003. – 214 с.

10) *Савелова Т.И., Бухарова Т.И.* Представления группы $SU(2)$ и их применение. Учебное пособие. М.: МИФИ, 1996. – 113с.

11) *Виленкин Н.Я.* Специальные функции и теория представления групп. М.: Наука, 1965. – 596 с.

12) *Савелова Т.И., Сыпченко М.В.* Вычисление функции распределения ориентаций по набору отдельных ориентировок на группе вращений $SO(3)$ // Журнал вычислит. матем. и матем. физ., 2007, т. 47, №6, с. 1015–1028.

13) *Дьяконов В.* Maple 7: учебный курс. – СПб.: Питер, 2002. – 672 с.

14) *Савелова Т.И., Аганин К.П.* Аналитические и численные оценки точности ядерных и проекционных методов восстановления плотности распределения ориентаций на группе вращений $SO(3)$, М.: МИФИ, Препринт 004 – 2007. – 48 с.

15) *Деврой Л., Дьёрфи Л.* Непараметрическое оценивание плотности. М., Мир, 1988. – 407с.

16) *Савелова Т.И., Сыпченко М.В.* Оценка точности восстановления функции распределения зерен по ориентациям для зависимых ориентаций и с учетом размеров зерен // Журнал вычислит. матем. и матем. физ. – 2009. – Т. 49. – №5. – С. 1–11.

17) <http://hkl-channel.software.informer.com>

18) *Никишин А.В.* Описание текстуры и расчета упругих свойств поликристаллов на основе нормальных распределений на группе $SO(3)$ и их проекций на сферу: Дис. канд. физ.-мат. наук, М.: МИФИ. – 2008. – 105 с.

19) *Шаскольская М.П.* Кристаллография. – М.:Высшая школа, 1984. – 386 с.

Основные результаты диссертации представлены в работах:

1) *Савелова Т.И., Сыпченко М.В.* Вычисление функции распределения ориентаций по набору отдельных ориентировок на группе вращений $SO(3)$ // Журнал вычислительной математики и математической физики, №6, 2007, т. 47, с. 970–982.

2) *Савелова Т.И., Сыпченко М.В.* Оценка точности ядерных методов для зависимых ориентаций и с учетом размеров зерен для восстановления функции распределения зерен по ориентациям на группе $SO(3)$ // Журнал вычислительной математики и математической физики, 2009, т. 49, №5, с. 1–11.

3) *Сыпченко М.В., Савелова Т.И.* Некоторые проблемы измерений ориентаций отдельных зерен и вычисление усредненных упругих свойств магния // Заводская лаборатория и диагностика материалов, 2010, №6, с. 39 – 44.

4) *Сыпченко М.В., Савелова Т.И.* Исследование точности моделирования текстуры поликристалла по данным измерений отдельных ориентировок // Кристаллография, 2010, т.55, №4, с. 744–748.

5) *Ivanova T.M., Savyolova T.I., Sympchenko M.V.* The Modified Component Method for Calculation of Orientation Distribution Function from Pole Figures // Inverse Problems in Science and Engineering, v. 18, 2010, p. 163 – 171.

6) *Савелова Т.И., Иванова Т.М., Сыпченко М.В.* Применение нормальных распределений на группе $SO(3)$ в текстурном анализе, М.:НИЯУ МИФИ, Монография, 2010 – 104 с.

7) *Савелова Т.И., Сыпченко М.В., Коренькова Е.Ф.* Оценки точности статистических характеристик нормальных распределений на группе вращений $SO(3)$, М. МИФИ, Препринт 002-2006. – 34 с.

8) *Савелова Т.И., Сыпченко М.В.* Получение ориентаций отдельных зерен поликристаллов при EBSD измерениях и вычисление ФРО и ПФ, М.: МИФИ, Препринт 001-2009. – 20 с.

9) *Savyolova T.I., Sympchenko M.V.* Estimation of accuracy of kernel and projective methods of probability density distribution restoration from individual orientations on group $SO(3)$ // The 3-rd French –

Russian seminar “New Achievements in Materials and Environmental Sciences”, 7–9 ноября 2007, Metz, 2008 с. 173176.

10) *Савелова Т.И., Сыпченко М.В.* Исследование точности ядерных оценок для ЦНР на $SO(3)$ // Науч. сессия МИФИ–2007; Сб. науч. тр. в 15 т. М.: МИФИ, 2007, т. 7, с. 138139.

11) *Савелова Т.И., Сыпченко М.В.* Восстановление ФРО по набору из зависимых ориентировок ядерным методом // Науч. сессия МИФИ–2008; Сб. науч. тр. в 15 т. М.: МИФИ, 2008, т. 9, с. 94 – 95.

12) *Сыпченко М.В.* Некорректность математического моделирования ФРО по данным EBSD эксперимента // Науч. сессия МИФИ–2009; Аннотации докладов, 3 т., М.: МИФИ, 2009, т. 2, с. 134.

13) *Сыпченко М. В., Савелова Т.И.* Исследование точности моделирования текстуры поликристалла по данным измерений отдельных ориентировок // Тезисы докладов конференции «Рентгеновское, синхротронное излучения, нейтроны и электроны для исследования наносистем и материалов. Нано-Био-Инфо-Когнитивные технологии-2009», 16-21 ноября 2009, М.: ИК РАН-РНЦ КИ, с. 525.

14) *Рогинский К.Н., Савелова Т.И., Сыпченко М.В.* Вычисление количественных характеристик текстуры для поликристаллов на основе измерений электронной микроскопии // Российская школа конференция с международным участием «Математика, информатика, их приложения и роль в образовании» 14-18 декабря 2009 года, с. 203204.