

СООБЩЕНИЯ  
ОБЪЕДИНЕННОГО  
ИНСТИТУТА  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА

2976/82

28/11-82

P14-82-203

К.Фельдманн

АНАЛИЗ ТЕКСТУР  
ПО НЕПОЛНЫМ ПОЛЮСНЫМ ФИГУРАМ

(математическое обоснование  
и описание программы ICROFI )

1982

## ВВЕДЕНИЕ

Широко распространенным методом для определения преимущественных ориентаций зерен в поликристаллическом агрегате является трехмерный текстурный анализ. Он связывает трехмерную функцию распределения ориентаций или, точнее, приведенную функцию распределения ориентаций /ФРО/<sup>1</sup> с экспериментальными данными /полюсные фигуры /ПФ/ или измерения ориентаций отдельных зерен/<sup>2</sup>.

Метод трехмерного текстурного анализа позволяет решить целый ряд проблем, связанных с текстурой материалов. В работе<sup>3</sup> представлена комплексная программа ЭВМ, работающая на основе полностью измеренных ПФ. При использовании рентгеновской дифракции для определения полюсных фигур из-за сильного поглощения в веществе часто возникают серьезные трудности при измерении полных ПФ. Поэтому представляется целесообразным и даже необходимым<sup>4</sup> разработать этот метод и для неполных ПФ.

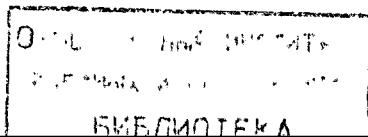
В настоящей работе предлагается система программ, позволяющая вычислять коэффициенты разложения в ряд сферических функций и факторы нормировки для используемых ПФ. В зависимости от возможностей имеющейся ЭВМ можно расширить систему программ до определения ФРО, обращенных полюсных фигур /ОПФ/, "теоретических" полюсных фигур на основе известных коэффициентов разложения и дальше до графического изображения указанных текстурных функций.

## МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ

Математический формализм, связанный с трехмерным текстурным анализом, подробно описывается в монографии<sup>2</sup>. Поэтому ограничимся в данной работе указанием основных выражений, необходимых для понимания процедуры расчета. Функцию распределения ориентаций  $f(g)$  можно разложить в ряд по обобщенным сферическим функциям, а полюсные фигуры - в ряд по простым сферическим функциям, при этом коэффициенты разложения одинаковы в обоих случаях:

$$f(g) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{\mu=1} M(l) \cdot N(l) \sum_{\nu=1} C_{\rho}^{\mu\nu} T_{\rho}^{\mu\nu}(g)$$

/1/



$$P_{\vec{h}_i}(\vec{y}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{4\pi}{2\ell+1} \sum_{\mu=1}^{M(\ell)} \sum_{\nu=1}^{N(\ell)} C_{\ell}^{\mu\nu} k_{\ell}^{\mu}(\vec{h}_i) k_{\ell}^{\nu}(\vec{y}), \quad /2/$$

причем  $T_{\ell}^{\mu\nu}(g)$  - симметризованные обобщенные сферические функции для ориентации  $g$ , определяемой обычно в пространстве Эйлеровых углов. Симметризованные сферические функции  $k_{\ell}^{\mu}(\vec{h}_i)$  и  $k_{\ell}^{\nu}(\vec{y})$  учитывают симметрию кристаллической решетки и образца /относительно текстуры/ при данном направлении  $\vec{h}_i = [hk\ell]$  и  $\vec{y}$  в координатных системах кристалла и образца соответственно. Симметризация сферических функций в значительной мере уменьшает сложность математической проблемы /2/.  $M(\ell)$  и  $N(\ell)$  - число линейно независимых сферических функций для данной степени разложения  $\ell$  /см. рис.1/. Для определения коэффициентов разложений  $C_{\ell}^{\mu\nu}$  требуется минимальное отклонение вычисленных ПФ от измеренных полюсных фигур в исследуемом диапазоне  $D$  /см.рис.2/. Таким образом получается условие минимума:

$$\text{Min} \left\{ \sum_i \int_D [N_{\vec{h}_i} \hat{P}_{\vec{h}_i}(\vec{y})_{\text{наб.}} - P_{\vec{h}_i}(\vec{y})_{\text{выч.}}]^2 dy \right\}, \quad /3/$$

где  $i$  - номер полюсной фигуры,  $\hat{P}_{\vec{h}_i}(\vec{y})_{\text{наб.}}$  - ненормированная экспериментальная ПФ, а  $N_{\vec{h}_i}$  - ее фактор нормировки. После замены  $P_{\vec{h}_i}(\vec{y})_{\text{выч.}}$  выражением /2/ и дифференцирования по  $C_{\ell}^{\mu\nu}$  /кроме  $C_0^{11}=1$  / и  $N_{\vec{h}_i}$ , получается система линейных уравнений для определения  $C_{\ell}^{\mu\nu}$ :

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{\mu=1}^{M(\ell)} \sum_{\nu=1}^{N(\ell)} C_{\ell}^{\mu\nu} E_{\ell\ell'}^{\mu\nu\nu'} = -E_{0\ell'}^{1\nu'}, \quad /4/$$

где использованы следующие обозначения:

$$E_{\ell\ell'}^{\mu\nu\nu'} = P_{\ell\ell'}^{\mu\mu'} \cdot Q_{\ell\ell'}^{\nu\nu'} - \frac{16\pi^2}{(2\ell+1)(2\ell'+1)} \sum_i \frac{a_{\ell}^{\mu\nu}(\vec{h}_i) a_{\ell'}^{\mu'\nu'}(\vec{h}_i)}{Q_{\vec{h}_i}}, \quad /5/$$

$$Q_{\vec{h}_i} = \int_D [\hat{P}_{\vec{h}_i}(\vec{y})_{\text{наб.}}]^2 dy, \quad /6/$$

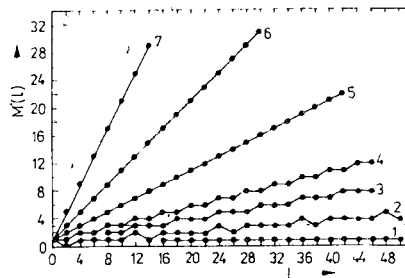


Рис.1. Число линейно независимых сферических функций в зависимости от степени разложения для разных симметрий кристаллов и деформаций. 1 - симметрия вращения; 2 - кубическая; 3 - гексагональная; 4 - тетрагональная; 5 - ромбическая /текстура прокатки/; 6 - моноклиная; 7 - триклинная.

$$a_{\ell}^{\mu\nu}(\vec{h}_i) = k_{\ell}^{\mu}(\vec{h}_i) \int_{\text{наб.}} \hat{P}_{\vec{h}_i}(\vec{y}) k_{\ell}^{\nu}(\vec{y}) dy, \quad /7/$$

$$P_{\ell\ell'}^{\mu\mu'} = \frac{16\pi^2}{(2\ell+1)(2\ell'+1)} \sum_i k_{\ell}^{\mu}(\vec{h}_i) k_{\ell'}^{\mu'}(\vec{h}_i), \quad /8/$$

$$Q_{\ell\ell'}^{\nu\nu'} = \int_D k_{\ell}^{\nu}(\vec{y}) k_{\ell'}^{\nu'}(\vec{y}) dy. \quad /9/$$

Факторы нормировки измеренных полюсных фигур  $\hat{P}_{\vec{h}_i}(\vec{y})$  даются выражением:

$$N_{\vec{h}_i} = \frac{1}{Q_{\vec{h}_i}} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{\mu=1}^{M(\ell)} \sum_{\nu=1}^{N(\ell)} C_{\ell}^{\mu\nu} a_{\ell}^{\mu\nu}(\vec{h}_i). \quad /10/$$

В случае полностью измеренных ПФ выражения /4/ и /10/ можно преобразовать в формулы, полученные с использованием ортогональности сферических функций /2,3/.

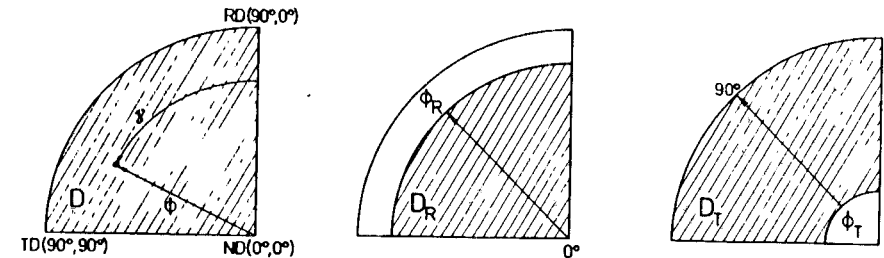


Рис.2. Области полюсной фигуры, доступные для измерения в случае отражения ( $D_R$ ) и пропускания ( $D_T$ ). RD - направление прокатки, TD - поперечное направление, ND - направление нормали.

Порядок системы уравнений /4/ таков, что невозможно решить ее без использования ЭВМ. В таблице указывается число необходимых уравнений для разных симметрий кристаллической решетки и для разных степеней разложения. При этом предполагается ромбическая симметрия измеренных полюсных фигур.

Быстрый рост системы уравнений с увеличением степени разложения или понижением кристаллической симметрии явно виден в таблице. Система еще сильнее растет с понижением симметрии измеренных ПФ. Поэтому метод обработки неполностью измеренных полюсных фигур ограничен высокой симметрией по текстуре даже при наличии мощной ЭВМ.

Таблица

Степень разложения	Куб.	Гекс.	Тетраг.	Ромб.
10	18	35	49	90
12	32	56	77	139
14	40	80	109	203
16	58	107	154	284
18	78	147	204	384
20	100	191	270	505
22	124	239	342	649

ОПИСАНИЕ ПРОГРАММЫ

Программа для текстурного анализа на основе неполных полюсных фигур ICPOFI написана на фортране. Она предназначена для обработки ПФ с ромбической или аксиальной симметрией, т.е. ввод экспериментальных данных ограничен одной четвертью полюсной фигуры. Такие симметрии являются достаточными для текстурного исследования большинства технических образцов. Допускается обработка не больше чем 12 неполных ПФ от веществ с кубической, гексагональной, тетрагональной или ромбической решеткой. Полюсные фигуры измеряются по  $\gamma$  от  $\gamma=0^\circ$  до  $\gamma=90^\circ$  в шагах  $\Delta\gamma \geq 2^\circ$  /см. рис.2/ и по углу  $\Phi$  от  $\Phi_1 \geq 0^\circ$  до  $\Phi_2 \leq 90^\circ$  также в шагах  $\Delta\Phi \geq 2^\circ$ , причем  $\Delta\Phi$  не обязательно равны  $\Delta\gamma$ . Исследуемый диапазон от  $\Phi_1$  до  $\Phi_2$  должен быть идентичным для всех ПФ. Для ввода в программу используются ненормированные, но исправленные по поглощению и т.д. полюсные фигуры. На их основе вычисляются коэффициенты разложения  $C_{\ell}^{\mu\nu}$  и факторы нормировки ПФ  $N_{h_i}^{\mu\nu}$  /рис.3/. Число определяемых коэффициентов  $C_{\ell}^{\mu\nu}$  ограничено до 124 соответственно кубической решетке при разложении до  $\ell=22$  /см. таблицу/. При наличии более мощной ЭВМ это число легко увеличивается. По желанию можно определить по известным  $C_{\ell}^{\mu\nu}$  любой комплект из двенадцати "теоретических" полных ПФ. Дальше программа может вычислить обращенные полюсные фигуры для направлений прокатки и нормали и для поперечного направления. Кроме того, можно определять приведенную ФРО. ПФ, ОПФ и ФРО выводятся в виде таблиц. Для графического изображения этих текстурных функций программа может распечатать координаты линий постоянной плотности ориентации.

Программа ICPOFI написана для ЭВМ БЭСМ-6. При работе на ЭВМ меньшей мощности описанный максимальный вариант можно постепенно сокращать до версии, вычисляющей только коэффициенты  $C_{\ell}^{\mu\nu}$  и факторы нормировки  $N_{h_i}^{\mu\nu}$ . Дальнейшее уменьшение может

```

.....
ICPOFI (100) (100) (100) (100) (100) (100)
.....
0.1350 0.1348 0.0647 0.4596 0.3771 0.2581
.....
F1 F2 F3 F4 F5 F6 F7 F8 F9 F10 F11 F12
.....
1 1 1.7850 -1.0640 1.1344 -0.4607 0.7145 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000
2 1 0.7925 -0.4819 1.1344 -0.4607 0.7145 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000
3 1 -0.2168 -0.3643 0.6606 -1.0217 0.7145 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000
4 1 0.0966 -1.2641 0.6606 0.0421 0.6606 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000
5 1 -0.4195 0.6816 0.0731 -0.3763 0.4481 -0.4481 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000
6 1 0.0967 -0.8621 0.2647 -0.2647 0.2647 0.2647 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000
7 1 -0.3184 0.3946 -0.7367 -0.1672 0.1672 0.1672 0.1672 0.0000 0.0000 0.0000
8 1 0.3263 -0.6624 0.1766 -0.6021 0.0054 0.0017 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000
9 1 -0.2268 0.3946 -0.7367 -0.1672 0.1672 0.1672 0.1672 0.0000 0.0000 0.0000
10 1 0.1176 -0.3761 0.6476 -0.6867 0.1786 0.0000 0.0000 0.0024 0.0000 0.0000
11 1 0.1946 -0.2500 0.4676 -0.3627 0.1900 -0.1668 0.0000 0.3134 -0.3134 0.0000
12 1 0.0961 -0.2268 0.6762 0.1713 0.0386 0.0000 0.0016 0.0000 0.0000 0.0000
13 1 0.0636 -0.2500 0.4676 -0.3627 0.1900 -0.1668 0.0000 0.3134 -0.3134 0.0000
14 1 0.0487 -0.2773 0.2766 -0.1410 0.0710 0.0000 0.0000 0.0010 0.0000 0.0000
.....

```

Рис.3. Факторы нормировки для ПФ, используемые в расчете, и коэффициенты  $C_{\ell}^{\mu\nu}$ .

идти за счет массива  $E_{\ell\ell}^{\mu\nu}$  и числа определенных  $C_{\ell}^{\mu\nu}$  соответственно.

Программа не учитывает круг проблем, связанных с коэффициентами разложения  $C_{\ell}^{\mu\nu}$  с нечетной степенью  $\ell$ . Единого алгоритма для решения этих вопросов пока не существует. Это обстоятельство приводит к появлению добавочных, нереальных максимумов в приведенной ФРО, но не влияет на вычисленные ПФ, ОПФ и макроскопические свойства.

ТОЧНОСТЬ ОПРЕДЕЛЕНИЯ КОЭФФИЦИЕНТОВ  $C_{\ell}^{\mu\nu}$

Коэффициенты  $C_{\ell}^{\mu\nu}$  получаются с использованием метода наименьших квадратов и конечного разложения в ряд по сферическим функциям экспериментальных ПФ. Таким образом,  $C_{\ell}^{\mu\nu}$  определяются с ошибками, которые обусловлены следующими факторами.

1. Измеренные полюсные фигуры содержат экспериментальные ошибки.
2. Так как  $C_{\ell}^{\mu\nu}$  для всех возможных комбинаций  $\ell, \mu, \nu$  связаны друг с другом в системе уравнений /4/, величина коэффициентов разложения зависит от степени разложения  $\ell_{max}$ , причем значения  $C_{\ell}^{\mu\nu}$  с низким  $\ell$  сходятся с повышением степени разложения, т.е. при достаточно большой  $\ell_{max}$  основные черты ФРО постепенно фиксируются, изменения происходят только в тонкой структуре.
3. При большой  $\ell$  и большом угловом расстоянии между экспериментальными точками численное интегрирование /ур. /7/ и /9// может влиять на точность вычисления коэффициентов  $C_{\ell}^{\mu\nu}$  /5/ из-за осцилляции сферических функций по углам  $\Phi$  и  $\gamma$ . Поэтому в

программе имеется возможность уменьшить угловое расстояние с помощью квадратичной интерполяции до  $\Delta\Phi = \Delta\gamma = 2^\circ$ .

4. Эффекты округления ЭВМ в процессе вычисления существенной роли не играют по сравнению с предыдущими пунктами.

Особый интерес представляет знание необходимой области измеренных полюсных фигур в режимах отражения и пропускания /рис.2/. Для исследования этого вычислялось среднее квадратичное отклонение ФРО, вычисленное на базе неполных ПФ от ФРО, определенной с помощью полных ПФ /6/:

$$\Delta\Phi = \frac{\int_{\phi} [f_{\Phi}(g) - f_p(g)]^2 dg}{\int_{\phi} [f(g) - f_p(g)]^2 dg} = \frac{\sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{1}{2\ell+1} \sum_{\mu=1}^{M(\ell)} \sum_{\nu=1}^{N(\ell)} [C_{\ell}^{\mu\nu}(\Phi) - C_{\ell}^{\mu\nu}]^2}{\sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{1}{2\ell+1} \sum_{\mu=1}^{M(\ell)} \sum_{\nu=1}^{N(\ell)} [C_{\ell}^{\mu\nu}]^2 - 1}, //1/$$

причем  $f_p(g) \equiv 1$  является равномерным распределением ориентаций.

Отклонения  $\Delta\Phi$  вычислялись с учетом разных областей, измеренных с помощью нейтронной дифракции, полюсных фигур для железа с кубической симметрией решетки и для двух образцов из титана с гексагональной симметрией.

При использовании железа для расчетов применялось четыре ПФ. Из рис.4 видно, что текстурный анализ дает хорошие результаты, если диапазон измерения сделан от  $\Phi_1 = 0^\circ$  до  $\Phi_2 \geq 60^\circ$  в режиме отражения и от  $\Phi_1 \leq 30^\circ$  до  $\Phi_2 = 90^\circ$  при пропускании. Такие области совпадают с данными из /6/.

Для гексагональных образцов использовался титан, деформированный прокаткой на 51% и 76% соответственно. Результаты расчетов изображены на рис.5 и 6. Видно, что область, позволяющая провести текстурный анализ с достаточной точностью, заметна меньше, чем для кубической решетки. Хорошие результаты ожидаются, если диапазон измерения сделан от  $\Phi_1 = 0^\circ$  до  $\Phi_2 \geq 70^\circ$ . Рис.5 показывает, что в этом случае измерения только на пропускание практически невозможны. Хотя на рис.6 сокращение области измерений от  $\Phi_1 \leq 15^\circ$  до  $\Phi_2 = 90^\circ$  на коэффициенты  $C_{\ell}^{\mu\nu}$  сильно не влияет, такие исследования на образце с неизвестной текстурой представляются ненадежными.

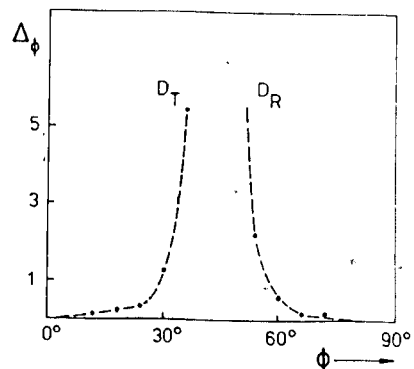


Рис.4. Ход отклонения  $\Delta\Phi$  в случае отражения ( $D_R$ ) и пропускания ( $D_T$ ) для текстуры проката железа.

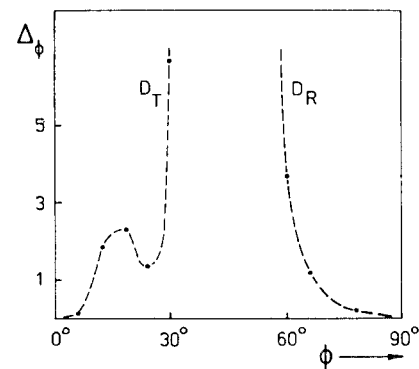


Рис.5. Ход отклонения  $\Delta\Phi$  для текстуры проката титана /степень деформации  $\eta = 51\%$ .

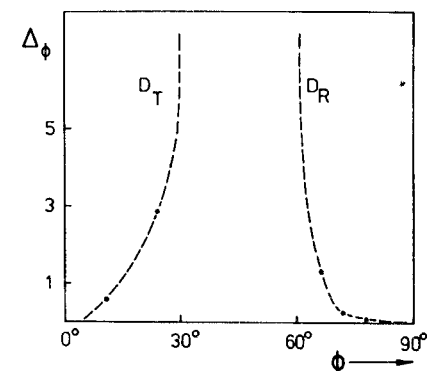


Рис.6. Ход отклонения  $\Delta\Phi$  для текстуры проката титана /степень деформации  $\eta = 76\%$ .

#### ОБРАЩЕНИЕ К ПРОГРАММЕ

Для использования программы ICROFI необходимо вводить следующую информацию:

- /1/: сведения о числе ПФ, степени разложения, характеристические числа для симметрии решетки и образца /  $k=0$  - куб.,  $k=1$  - ромб.,  $k=2$  - тетраг.,  $k=3$  - гекс.,  $k=18$  - акс./,  $\Phi_1$ ,  $\Phi_2$  - число точек по углу  $\gamma$ , угловое расстояние по  $\Phi$  и по  $\gamma$  до и после интерполяции, управляющие числа для определения текстурных функций ПФ, ОПФ и ФРО.
- /2/: текстовая характеристика измерения и образца /напр., номер измерения и т.д./.
- /3/: миллеровские индексы, используемые для расчета ПФ.
- /4/: факторы для построения симметризованных сферических функций кубической симметрии /2/.
- /5/: полюсные фигуры.
- /6/: при необходимости - значения изолиний текстурных функций.

Счетное время программы зависит от степени использования ее ресурсов. На БЭСМ-6 счетное время составляет ~4 мин с использованием минимальных возможностей программы для разложения до  $\ell = 22$  и использования 4ПФ от вещества с кубической симметрией. Полная версия программы ICROFI занимает 66466 з слов, а сокращенный вариант - 57634 з слов оперативной памяти БЭСМ-6.

#### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе представлена программа для ЭВМ, позволяющая провести количественный текстурный анализ с использова-

нием доступной для рентгеновской дифракции области полюсных фигур. В других методах, в частности, в нейтронной дифракции по времени пролета, программа даст возможность экономить значительную часть времени измерения. Она позволяет решить большинство текстурных проблем, возникающих в технологических процессах. При исследовании неизвестных типов текстур рекомендуется определить область применения метода, как это показано на примере текстуры проката титана.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Matthies S. Kristall und Technik, 1980, 15, p.1323.
2. Bunge H.-J. Mathematische Methoden der Texturanalyse. Akademie-Verlag, Berlin, 1969.
3. Фельдманн К. ОИЯИ, P11-80-844, Дубна, 1980.
4. Решение III Всесоюзной конференции по текстурам и рекристаллизации в металлах и сплавах. Изд-во Красноярского политехнического института, Красноярск, 1980.
5. Feldmann K. et al. Texture, 1980, 4, p.1.
6. Jura J., Pospiech J. Texture, 1978, 3, p.1.

Рукопись поступила в издательский отдел  
18 марта 1982 года.

Фельдманн К.

P14-82-203

Анализ текстур по неполным полюсным фигурам  
/математическое обоснование и описание программы ICPOFI /

Дается математическое обоснование анализа текстур по неполным полюсным фигурам. Приведены основные формулы. Описывается программа ЭВМ для вычисления коэффициентов разложения в ряд по сферическим функциям. Используются полюсные фигуры от образца с орторомбической симметрией и кубической /или гексагональной, тетрагональной, орторомбической/ решеткой. На основе коэффициентов программа позволяет вычислять функцию распределения ориентаций, полюсные фигуры и обращенные полюсные фигуры. Определяются необходимые области неполных полюсных фигур в случаях отражения и пропуска для разных симметрий решетки.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1982

Feldmann K.

P14-82-203

Texture Analysis on the Base of Incomplete Pole Figures  
(Mathematical Background and ICPOFI Program Description)

The mathematical background for quantitative texture analysis on the base of incomplete pole figures is described. The most important formulae are given. A computer program is described for determination of series expansion coefficients with respect to spherical harmonics. Pole figures from samples with orthorhombic symmetry can be used. The crystal lattice is allowed to have cubic, hexagonal, tetragonal or orthorhombic symmetry. On the base of coefficients the program is able to calculate orientation distribution function, inverted pole figures and recalculated pole figures. The necessary range of incomplete pole figures is determined for reflection and transmission cases respectively and for different lattice symmetries.

The investigation has been performed at the Laboratory of Neutron Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1982

Перевод О.С.Виноградовой.