

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

На правах рукописи

УДК 548.73:546.45

НИКОЛАЕВ  
Дмитрий Игоревич

ВОССТАНОВЛЕНИЕ И ПРИМЕНЕНИЕ  
ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЗЕРЕН ПО ОРИЕНТАЦИЯМ  
ДЛЯ ПОЛИКРИСТАЛЛОВ КУБИЧЕСКОЙ СИММЕТРИИ.

Специальность 05.13.16 - применение вычислительной  
техники, математического моделирования  
и математических методов для научных исследований

Автореферат диссертации на соискание учёной степени  
кандидата физико-математических наук

Москва - 1989

Работа выполнена в Московском Ордена Трудового Красного Знамени инженерно-физическом институте.

## Научные руководители:

кандидат физико-математических наук, профессор  
кандидат физико-математических наук, доцент

Дмитрий Алексеевич  
ВАСИЛЬКОВ  
Татьяна Ивановна  
САВЕЛОВА

## Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук, профессор  
кандидат технических наук, СИС

Владимир Григорьевич  
МАХАНЬКОВ  
Дрий Анатольевич  
ПЕРЛОВИЧ

## Ведущее научно-исследовательское учреждение:

Харьковский физико-технический институт.

Защита состоится *14 декабря* 1989 г. в *10.30* часов на заседании специализированного совета Д-047.01.04 при Лаборатории вычислительной техники и автоматизации по адресу: г. Дубна Московской области, ОИЯИ, ЛВТА.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Автореферат разослан *3 января* 1989 г.

Учёный секретарь  
специализированного совета

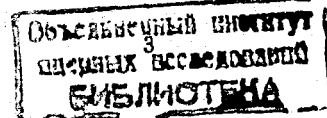
*И.И.* З.М. Иванченко

Актуальность темы. Почти все металлы являются поликристаллами. Было замечено, что существенное влияние на поведение и свойства поликристалла оказывает текстура - совокупность ориентаций входящих в него монокристаллов. Известно, что различные способы обработки металлов приводят к различным текстурам. Поэтому при изготовлении конкретных изделий естественно стремиться к оптимальной, с точки зрения требований, предъявляемых к изделию, текстуре. Отсюда непосредственно вытекает важность решения задачи полного количественного описания текстуры, а также оценок свойств образцов с различной текстурой. Экспериментальные сведения о текстуре содержатся в так называемых полюсных фигурах (ПФ), получаемых в результате дифракционных экспериментов (рассеяние рентгеновских лучей или тепловых нейтронов). Однако наиболее полно текстура поликристаллических материалов описывается с помощью функции распределения зерен по ориентациям (ФРО), которая может быть восстановлена по полюсным фигурам. Дело осложняется тем, что полюсные фигуры содержат неполную информацию о функции распределения зерен по ориентациям, что является следствием условий эксперимента, а сама задача получения искомой функции оказывается некорректной (нет единственности решения). Поэтому необходимо привлекать дополнительную информацию о самой функции распределения зерен по ориентациям. Следует также отметить, что той информации о ФРО, которая может быть извлечена из полюсных фигур, достаточно для решения некоторых практически важных задач (расчёт усреднённых свойств).

Настоящая работа посвящена восстановлению функции распределения зерен по ориентациям в случае кубической симметрии монокристаллов по полюсным фигурам и применению этой функции для получения средних значений физических свойств, описываемых тензорами четвёртого ранга, а также для описания текстуры при фазовых переходах 2-го рода.

Цели работы. 1. Исследование вопросов, связанных с единственностью решения задачи восстановления ФРО по ПФ.  
2. Создание методов получения единственного решения на определённых классах функций.  
3. Применение ФРО для получения средних значений физических свойств, описываемых тензорами 4-го ранга, и описания текстуры фазовых переходов 2-го рода.

Научная новизна. Впервые для кубической симметрии монокристалла рассмотрены классы функций, позволяющие получить



единственное решение задачи восстановления ФРО по ПФ. С помощью предлагаемых методов в работе для реальных экспериментальных данных получена ФРО, с одной стороны, совпадающая в пределах погрешности с полученным общепринятыми методами, а с другой стороны, лишённая двух основных недостатков, которые получаются при вычислении ФРО наиболее распространёнными методами. Впервые показано, что нельзя единственным образом получить ФРО гексагональной фазы по известному ФРО кубической фазы и ориентационному соотношению.

**Практическая и научная ценность.** Рассмотренные в диссертации вопросы могут представлять как практический (по предложенным в работе методам составлены программы, позволяющие обрабатывать конкретные экспериментальные данные), так и некоторый теоретический интерес, поскольку получены классы функций, на которых достигается (по крайней мере теоретически) единственность решения исходной некорректной задачи. Такие классы важны при рассмотрении вопроса о достоверности значимый ФРО, получаемых другими методами. Хотя результаты, приведённые в работе, относятся к кубической симметрии монокристалла, следует сказать, что аналогичные подходы возможны с некоторыми изменениями и при другой симметрии кристаллитов, составляющих образец.

**Апробация и публикации.** Основные результаты исследований докладывались на V Всесоюзной школе-семинаре по некорректным задачам (Саратов, 1985 г.); на Всесоюзной школе-семинаре по условно-корректным задачам физики и анализа (Красноярск, 1986 г.); на VII Всесоюзной конференции по текстурам и рекристаллизации (Уфа, 1987 г.); на Всесоюзной школе-семинаре по количественным методам анализа текстуры (Свердловск, 1989 г.). Основные результаты диссертации опубликованы в работах [I-II].

**Структура диссертации.** Диссертация состоит из введения, четырёх глав и заключения. Работа содержит 103 страницы, включая 4 таблицы, 27 рисунков и список литературы из 71 наименования.

#### Автор защищает:

1. Классы функций, на которых достижимо единственное решение задачи восстановления ФРО по ПФ.
2. Методы восстановления ФРО путём аппроксимации её  $\delta$ -функциями и гауссовскими распределениями.
3. Приложение ФРО в виде линейной комбинации гауссовских распределений для получения средних значений физических свойств, описываемых тензорами четвёртого ранга и для описания текстуры фазовых переходов 2-го рода.

В первой главе приводятся необходимые начальные сведения, определения, общепринятая постановка задачи, а также постановка, в которой может быть достигнута единственность решения. Проводится исследование влияния погрешностей на это решение и дается описание примера модельных расчётов.

Количественно текстура наиболее полно описывается с помощью ФРО (функции распределения ориентаций)  $f(\varphi)$ . Источником информации о ФРО являются полюсные фигуры (ПФ), обозначаемые  $P_{h_i}(y)$ , которые представляют собой проекции ФРО на сферу  $S^2$ .

Поскольку в дифракционных экспериментах не различимы направления  $h_i$  и  $-h_i$  нормалей к кристаллографической плоскости, то оказывается, что измеренная функция  $P_{h_i}(y)$  обладает следующими свойствами симметрии:

$$P_{h_i}(y) = P_{-h_i}(y) = P_{h_i}(-y) = P_{-h_i}(-y).$$

**Постановка задачи:** Задан конечный набор единичных векторов  $h_i \in S^2$  и соответствующий им набор экспериментально измеренных функций  $P_{h_i}(y), \dots, P_{h_n}(y)$ . Требуется найти функцию распределения зерен по ориентациям  $f(\varphi)$ . ПФ связана с  $f(\varphi)$  соотношением:

$$P_{h_i}(y) = \hat{P}(h_i, y, \varphi) f(\varphi),$$

где явный вид оператора  $\hat{P}(h_i, y, \varphi)$  даёт следующая формула:

$$P_{h_i}(y) = \int_{\varphi} (f(|h_i, \varphi|^2(y, 0)) + f(|-h_i, \varphi|^2(y, 0))) d\varphi$$

Она следует из того, что вращение  $\varphi$ , переводящее  $y$  в  $h_i$  ( $h_i = \varphi y$ ) имеет вид:  $\varphi = |h_i, \varphi|^2(y, 0)$ , причём  $\varphi$  - произвольный угол. ФРО  $f(\varphi)$  может быть разложена в ряд по обобщённым сферическим функциям:

$$f(\varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l C_l^{m, \varphi} D_l^{m, \varphi}(\varphi). \quad (I.1)$$

Можно получить следующую важную формулу, которая связывает ПФ с коэффициентами разложения ФРО:

$$P_{h_i}(y) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l (4\pi / (2l+1)) (1 + (-1)^m) C_l^{m, \varphi} y_l^m(y) y_l^m(h_i), \quad (I.2)$$

причём ненулевой вклад в сумму даёт члены с чётными  $l$ .

Запишем теперь  $f(\varphi)$  в виде:

$$f(g) = \tilde{f}(g) + \bar{f}(g),$$

где  $\tilde{f}(g)$  - есть часть суммы (I.I) с чётными индексами  $l$ , а  $\bar{f}(g)$  - есть часть суммы (I.I) с нечётными индексами  $l$ . Оказывается, что оператор  $\hat{P}(h_i, y, g)$  действует таким образом, что

$$\hat{P}(h_i, y, g)\tilde{f}(g) = 0.$$

Иными словами, этот оператор имеет отличное от нуля ядро. Это является следствием симметрии эксперимента по отношению к направлениям  $y$  и  $-y$ , а так же  $h_i$  и  $-h_i$ . Таким образом, задача восстановления ФРО по ПФ является некорректной (нарушена единственность решения). В силу вышесказанного, из экспериментально измеренных ПФ принципиально может быть восстановлено только  $\tilde{f}(g)$ . Кроме того, в каждом методе делается определённое предположение о  $\bar{f}(g)$ . Следует заметить, что достоверным критерием правильности найденной  $f(g)$  может служить только ФРО, полученная путём измерения ориентаций отдельных зёрен. Однако в настоящее время практически нет ФРО, для которой были бы измерены ориентации нескольких тысяч зёрен, хотя развитие электронной микроскопии позволяет надеяться, что такие данные будут получены в ближайшие годы.

Поскольку в реальном образце всегда существует конечное число монокристаллов, ФРО можно представить в виде:

$$f(g) = \sum_{i=1}^N a_i f_i, \quad (I.3)$$

где  $N$  - число кристаллитов,  $a_i > 0$ ,  $f_i$  -  $\delta$ -функция с носителем  $g_i$ . Класс ФРО вида (I.3) обозначим через  $F$ . Решение задачи восстановления ФРО по ПФ ищется ниже в классе  $F$ . Назовём орбитой любой неупорядоченный набор из шести векторов, удовлетворяющих условию: три вектора взаимно перпендикулярны, а три других имеют противоположные направления. Орбиты соответствуют ПФ (100) монокристалла.

**Задача А.** Дана орбита  $J$ , состоящая из векторов  $y_1, \dots, y_6$ . Найти все преобразования  $g \in SO(3)$ , такие, что  $(g^i h_i | i=1, 2, \dots, 6) = J$ .

Решение задачи А получается в виде матрицы:

$$g = \begin{pmatrix} y_1^i & y_2^i & [y_1, y_2]_i \\ y_1^j & y_2^j & [y_1, y_2]_j \\ y_1^k & y_2^k & [y_1, y_2]_k \end{pmatrix}, \quad (I.4)$$

все другие вращения - решения задачи А - получаются из  $g$  умножением слева на  $g_{a,b} \in G_a$ , где  $G_a$  - точечная группа симмет-

рии куба.

**Задача В.** Дано конечное множество единичных векторов  $\mathcal{Z}$  и функция  $r: \mathcal{Z} \rightarrow R^+$ . Найти конечное множество  $(g_1, \dots, g_N) \in SO(3)$  и функцию  $R: (g_1, \dots, g_N) \rightarrow R^+$  со следующими свойствами:

- 1)  $\bigcup_{\substack{i=1, \dots, N \\ j=1, \dots, 6}} (g_j h_i) = (g_j h_i | j=1, \dots, N; i=1, \dots, 6) = \mathcal{Z}$ ,
- 2) для любого  $z \in \mathcal{Z} \quad \sum R(g_j) r(z), \quad (I.5)$

где сумма берётся по всем  $g_j$  таким, что  $z \in (g_j h_i)$ .

**Решение.** Разобьём  $\mathcal{Z}$  на множество орбит  $J$ . На каждой орбите  $J$  выберем упорядоченную пару  $y_j, y_{2j}$ , соответствующую  $h_1, h_2$ .  $g$  однозначно определяется условиями:  $y_j = g_j h_1$ ,  $y_{2j} = g_j h_2$ . Функция  $R$  определяется однозначно из системы уравнений (I.5)

Получены аналитические оценки влияния погрешностей измерения ПФ на определение ФРО вида (I.3).

По описанным выше алгоритмам проводились численные эксперименты. В результате численных экспериментов установлено, что для заданных восьми ориентировок множество  $\mathcal{Z}$  однозначно разбивается на орбиты при уровне погрешности в определении единичного вектора  $0,5^\circ$  (рассматриваются сферические координаты единичных векторов). Если разбиение на орбиты проводится с уровнем погрешности  $1^\circ$ , то орбиты перемешиваются: в нужную орбиту попадают векторы из других орбит. При восстановлении ориентировки по соответствующей орбите с уровнем погрешности  $0,5^\circ$  погрешность определения ориентировки не превосходит  $1,5^\circ - 2^\circ$  (ориентировка  $g$  выражена через углы Эйлера из соответствующей матрицы 3-го порядка (I.4)).

Во второй главе даются определения и свойства статистически обоснованных гауссовских распределений на  $SO(3)$  и  $S^2$ , описывается метод получения ФРО путём аппроксимации круговыми гауссовскими распределениями, а также приводятся результаты, связанные с вычислением канонических гауссовских распределений.

При большом количестве монокристаллов ( $N \gg 10$ ) при наличии ошибок измерения возникает неоднозначность в определении ФРО путём аппроксимации  $f(g)$   $\delta$ -функциями. В этом случае следует воспользоваться аппроксимацией  $f(g)$  гауссовскими распределениями на  $SO(3)$ .

Предлагается искать ФРО в виде суммы гауссовских распределений. Говоря точнее, чётная часть искомого ФРО, должна быть близкой или совпадать с ФРО, которая может быть получе-

на методом Бунге-Роу, а "нечётная" часть - "дописывается" с помощью гауссовских распределений. ПФ от гауссовских распределений не содержат нечётной части, но зависят от параметров, описывающих вес, положение центра и рассеяние относительно максимума. От этих же параметров зависят и гауссовские распределения на группе вращений. Экспериментальные ПФ рассматриваются как источник информации о параметрах нормальных распределений.

В общем случае гауссовское распределение на  $SO(3)$ ,  $f(g)$  представляется в виде абсолютно и равномерно сходящегося ряда по обобщённым шаровым функциям:

$$f(g) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{m=l} C_l^{mn} D_l^{mn}(g). \quad (II.1)$$

Наиболее простой вид имеет круговое гауссовское распределение на  $SO(3)$

$$f(g) = \sum_{\xi=0}^{\infty} (2l+1) \exp(-l(l+1)\xi) \left| \frac{\sin(\xi+\frac{1}{2})}{\sin \xi/2} \right| \quad (II.2)$$

где  $\cos \alpha/2 = \cos \beta/2 \cos(\alpha+\gamma)/2$ . Гауссовские распределения на  $S^2$ , определяются как проекции гауссовских распределений на  $SO(3)$ .

$$f(\xi) d\xi = (8\pi^2)^{-1} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi f(g) \sin \beta d\beta d\alpha = (4\pi) \sum_{m=-l}^l C_l^{mn} D_l^{mn}(g) \sin \beta d\beta d\alpha, \quad (II.3)$$

где  $\xi \in S^2$ ,  $\xi = (-\pi/2 + \alpha, \beta)$ .

ПФ от гауссовских распределений. Полюсные фигуры от гауссовских распределений получаются в виде ряда (I.2) при подстановке вместо коэффициентов  $C_l^{mn}$  коэффициентов разложения гауссовских ФРО по шаровым функциям. В случае кругового гауссовского распределения (II.4) выражение для ПФ имеет вид

$$P_{h_i}(y) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \exp(-l(l+1)\xi^2) P_l(\cos \tau), \quad (II.4)$$

где  $\cos \tau = \cos \theta \cos \psi - \sin \theta \sin \psi \cos(\varphi - \eta)$ ;  $h_i = (\theta, \varphi)$ ;  $y = (\chi, \eta)$ ;  $P_l(\cos \tau)$  - полиномы Лежандра. Приведённая ПФ (II.4) имеет максимум в точке  $\tau=0$  и суммированием по чётным  $l$  учитывает равнозначность направлений  $h_i$  и  $-h_i$  без учёта симметрии кристаллита и образца.

Теорема 5. Полюсная фигура от ФРО в виде гауссовского распределения на  $SO(3)$  является чётной составляющей гауссовского распределения на  $S^2$ .

Если функцию  $f(g)$  представить в виде

$$f(g) = \sum_{k=1}^N \Lambda_k f_k(g, \xi_{0k}, g_{0k}), \quad (II.5)$$

то соответствующая ПФ запишется в виде

$$P_{h_i}(y) = \sum_{k=1}^N \Lambda_k P_{h_i}^k(y, \xi_{0k}, g_{0k}),$$

здесь  $N$  - количество круговых гауссовских распределений,  $\Lambda_k$  - вес каждого распределения,  $g_{0k}$  - описывает положение максимума соответствующего распределения,  $\xi_{0k}$  - параметр, характеризующий рассеяние относительно максимума. В результате исходная задача сводится к отысканию параметров  $g_{0k}$ ,  $\Lambda_k$ ,  $\xi_{0k}$  ( $k=1, \dots, N$ ). При этом количество  $N$  разделяющихся максимумов, как правило, не превышает 10. Отыскание количества круговых гауссовских распределений и положения их максимумов осуществляется методами отдельных ориентировок (глава I). Параметры  $\xi_{0k}$ ,  $\Lambda_k$  ( $k=1, \dots, N$ ) могут быть найдены с помощью следующего итерационного метода.

Рассмотрим функционал

$$L(\Lambda_1, \dots, \Lambda_N; \xi_{01}, \dots, \xi_{0N}) = \int_{S^2} (P_{h_i}(y) - \sum_{k=1}^N \Lambda_k P_{h_i}^k(y, \xi_{0k}, g_{0k}))^2 dy. \quad (II.6)$$

Искомые значения параметров образуют точку минимума функционала  $L$ . Выберем некоторые начальные приближения параметров  $\xi_{0k}^{(0)}$ . Дифференцированием функционала  $L$  по  $\Lambda_k$  получим следующую систему линейных уравнений для нахождения величин  $\Lambda_k$  ( $k=1, \dots, N$ ):

$$\sum_{k=1}^N \Lambda_k \xi_{0k}^{(0)} \tau_k = 0, \quad (1=1, \dots, N),$$

где

$$\xi_{0k} \tau_k = \int_{S^2} P_{h_i}^k(y, \xi_{0k}^{(i-1)}, g_{0k}) P_{h_i}^k(y, \xi_{0k}^{(i)}, g_{0k}) dy;$$

$$\tau_k = \int_{S^2} P_{h_i}^k(y) P_{h_i}^k(y, \xi_{0k}^{(i-1)}, g_{0k}) dy;$$

$\xi_{0k}^{(0)}$  -  $i$ -е приближение к  $\Lambda_k$ . Получим систему линейных уравнений относительно параметров  $\Delta \xi_{0k}^i$ :

$$\sum_{k=1}^N \Delta \xi_{0k}^i u_{k\ell} = v_\ell, \quad (1=1, \dots, N),$$

где

$$u_{k\ell} = \Lambda_k^{(i)} \xi_{0k}^{(i)} \int_{S^2} \frac{\partial}{\partial \xi_{0k}} P_{h_i}^k(y, \xi_{0k}^{(i-1)}, g_{0k}) \frac{\partial}{\partial \xi_{0k}} P_{h_i}^k(y, \xi_{0k}^{(i)}, g_{0k}) dy;$$

$$v_\ell = \Lambda_k^{(i)} \left| \int_{S^2} P_{h_i}^k(y) \frac{\partial}{\partial \xi_{0k}} P_{h_i}^k(y, \xi_{0k}^{(i-1)}, g_{0k}) dy - \int_{S^2} P_{h_i}^k(y) \frac{\partial}{\partial \xi_{0k}} P_{h_i}^k(y, \xi_{0k}^{(i)}, g_{0k}) dy \right|,$$

$$\sum_{k=1}^N \Lambda_k \int_{S^2} P_{h_i}^k(y, \xi_{0k}^{(i-1)}, y) \frac{\partial}{\partial \xi_{0k}} P_{h_i}^k(y, \xi_{0k}^{(i-1)}, g_{0k}) dy,$$

$$\xi_{0k}^{(i)} = ((\xi_{0k}^{(i-1)})^2 + \Delta \xi_{0k}^i)^{1/2}.$$



В третьей главе приводятся примеры использования методов, изложенных в первых двух главах, для получения функции распределения зерен по ориентациям по модельным и экспериментально измеренным полюсным фигурам. В этой главе также рассматриваются вопросы, связанные с оцениванием погрешностей ПФ и ФРО.

При вычислениях с использованием круговых гауссовских распределений на  $SO(3)$  и  $S^2$ , описываемых формулами (II.2) и (II.4), возникает вопрос о количестве членов ряда, позволяющих вычислить значения функций  $f(g)$  и  $P_{h_i}(y)$  с заданной точностью. В этом параграфе приводятся выражения для остатков рядов (II.2) и (II.4) в равномерной и среднеквадратичной метриках в зависимости от параметра  $\epsilon$ , характеризующего рассеяние относительно центра распределения.

В этой главе приводятся также два примера применения вышеизложенных методов для обработки реальных экспериментальных данных. В первом примере рассматривается случай острой текстуры, полученной в результате прокатки монокристалла Ni-Ti. Другой пример относится к текстуре прокатки меди. Проводится сравнение полученных результатов с соответствующими результатами, полученными методом Бунге-Роу.

Трудность восстановления ФРО по ПФ путем аппроксимации круговыми гауссовскими распределениями (II.5) заключается в отыскании параметров этих распределений по экспериментально измеренным ПФ.

При нахождении параметров можно различать следующие случаи: 1) максимумы на ПФ изолированы и изолинии в окрестностях максимумов имеют форму окружностей. В этом случае отыскание количества круговых гауссовских распределений и координат их максимумов  $g_{jk}$  осуществляется путем восстановления отдельных ориентировок. Для нахождения параметров  $\epsilon_{jk}, A_{jk}$  с помощью итерационной процедуры минимизируется функционал (II.6). Заметим, что эта итерационная процедура может быть модифицирована на случай неполных ПФ. 2) На ПФ отсутствуют изолированные максимумы, изолинии которых в окрестностях максимумов имеют форму окружностей. В этом случае для отыскания количества круговых гауссовских распределений и координат их максимумов следует привлечь дополнительную информацию. В отдельных случаях эти параметры могут быть найдены из условия минимального количества таких распределений, аппроксимирующих ПФ с заданной точностью. С учетом этих параметров могут быть найдены параметры  $\epsilon_{jk}, A_{jk}$  ( $k=1, 2, \dots, n$ ). 3) В случае, когда положения максимумов найдены приближенно, а также в случае неполных ПФ можно искать параметры из условия:

$$\max_{y \in S^2} |P_{h_i}(y) - \sum_{k=1}^n A_{jk} P_{h_i}^k(y)| - \min.$$

Минимум такого функционала может быть найден, например, с помощью покоординатной минимизации.

В четвертой главе описываются некоторые применения ФРО. Приводится применение ФРО для нахождения средних значений физических свойств, описываемых тензорами.

Пусть  $E_A$  - свойство отдельного монокристалла, в своей (кристаллита) системе координат. Имеется образец с закрепленной с ним системой координат  $K_A$ . Образец состоит из  $N$  кристаллитов с объемами  $V_i$ , у каждого из которых имеется своя система координат  $K_{g_i}$ , связанная с системой  $K_A$  посредством вращения  $g_i$  ( $i=1, 2, \dots, N$ ). При этом свойство  $E_A$  представляет собой суперпозицию свойств отдельных монокристаллов, или:

$$E_A = \sum_{i=1}^N a_i (E_A)_{g_i}, \quad (IV.1)$$

где  $a_i = V_i / V$ ,  $(E_A)_{g_i}$  - свойство  $E_A$  в системе  $K_A$ .

При переходе к непрерывному случаю сумма заменяется интегралом и мы получаем

$$E_A = \int_{SO(3)} (E_A)_g f(g) dg. \quad (IV.2)$$

Формулы (IV.1) и (IV.2) - определение усредненного значения свойства.

При получении средних по текстуре поликристалла физических свойств можно рассматривать два типа задач:

- 1) требуется найти значения усредненных свойств в одном или нескольких направлениях поликристаллического образца;
- 2) требуется найти значения усредненных свойств, полностью описывающих средние свойства поликристалла.

Ясно, что если решена задача второго типа, то получить решение первой задачи очень легко, подставляя определенные значения параметров. Однако получение решения первой задачи требует меньшего количества вычислений.

1) Решение первой задачи получается следующим образом. Задано  $E_A(h)$  и  $f(g)$ ; требуется найти  $E_A(y)$ . В дискретном случае

$$E_A(y) = \sum_{i=1}^N a_i E_A(g_i h).$$

в непрерывном случае решение будет записано в виде:

$$E_A(y) = \sum_{i=1}^n \sum_{m=1}^l \sum_{n=1}^l c_{i,m,n}^A a_i^m y_i^n(y),$$

если ФРО задано в виде суммы гауссовских распределений

(II.5). В этом случае

$$E_A(\gamma) = \sum_{k=1}^N \sum_{\ell=0}^L A_k (2l+1) \exp(-l(l+1)\epsilon^2) \sum_{j=1}^{N_k} \sum_{m=\ell}^L Y_{\ell}^m(\gamma_j) g_{k\ell} \gamma.$$

2) Решение второй задачи получается следующим образом. Задано  $E_B(\gamma)$  и  $f(\gamma)$ ; требуется найти  $E_A(\gamma)$ . Если  $f(\gamma)$  имеет вид (I.1), а  $E_B(\gamma)$  записано в виде

$$E_B(\gamma) = \sum_{\ell=0}^L \sum_{m, n=\ell}^L D_{\ell}^{mn}(\gamma),$$

то среднее значение свойства будет

$$E_A(\gamma) = \sum_{\ell=0}^L \sum_{m, n, k, \ell} C_{\ell}^{mn, k\ell} D_{\ell}^{mn}(\gamma). \quad (IV.3)$$

В случае, когда  $f(\gamma)$  задано в виде суммы круговых гауссовских распределений, решение может быть записано в виде:

$$E_A(\gamma) = \sum_{k=1}^N \sum_{\ell=0}^L A_k (2l+1) \exp(-l(l+1)\epsilon^2) \sum_{j=1}^{N_k} \sum_{m, n=\ell}^L D_{\ell}^{mn}(\gamma_j) g_{k\ell} \gamma.$$

Наиболее общий случай описывается формулой (IV.3). Однако непосредственное использование этой формулы неудобно из-за большого количества вычислений.

В качестве примера в диссертации рассмотрены упругие свойства поликристаллов с кубической симметрией зерен.

Фазовые превращения 2-го рода твердого тела заключаются в том, что при некоторых значениях температуры происходит изменение типа кристаллической решетки. Если материал до превращения имел текстуру, то он будет обладать текстурой и после превращения в  $\alpha$ -фазе, которая будет определяться исходной текстурой  $\gamma$ -фазы, и  $\gamma \rightarrow \alpha$  ориентационным соотношением. Это называется текстурным превращением.

Идеальные ориентационные соотношения. Принято обозначать исчезающую фазу -  $\gamma$ , а образующуюся  $\alpha$ . Если кристалл исчезающей фазы имел ориентацию  $g_{\gamma}$ , а кристалл появляющейся фазы -  $g_{\alpha}$ , то эти ориентации могут быть получены одна из другой с помощью вращения  $\Delta g$ .

$$g_{\alpha} = \Delta g_{\alpha} g_{\gamma}.$$

ФРО  $\alpha$ -кристаллов получается из ФРО  $\gamma$ -кристаллов с помощью соотношения

$$f_{\alpha}(g) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f_{\gamma}(\Delta g_n^{-1} g).$$

Отметим, что ФРО каждой фазы обладает соответствующей симметрией. Если имеется ФРО кубической фазы и известно ориентационное соотношение, то может быть восстановлена ФРО гекса-

гональной фазы, исключая коэффициенты разложения с  $l=7$ .

Функция ориентационных превращений. В реальном образце ориентационное соотношение  $\Delta g$  выполняется не точно. Естественно ввести плотность вероятности существования определенных ориентационных соотношений  $w(\Delta g)$ , которую принято называть функцией ориентационных превращений (ФОР).

ФРО  $\alpha$ -кристаллов есть интеграл по всем ориентационным соотношениям с учётом вероятности их возникновения, которая может быть и нулём для многих значений  $\Delta g$ .

$$f_{\alpha}(g) = \int_{SO(3)} w(\Delta g) f_{\gamma}(\Delta g^{-1} g) d\Delta g. \quad (IV.4)$$

Предложено считать, что ФОР является нормальным распределением, имеющим круговой характер рассеяния. Если ФРО  $f(\gamma)$  представлена в виде суммы круговых гауссовских распределений, то (IV.4) есть свёртка круговых гауссовских распределений с несовпадающими центрами. Вычисление этой свёртки осуществляется на основании следующей теоремы.

Теорема. Свёртка двух круговых гауссовских распределений с различными центрами есть гауссовское распределение:

$$f(g, g, \epsilon^2) * f(g_2, g, \epsilon_2^2) = f(g, g_2, g, \epsilon^2 + \epsilon_2^2).$$

Если мы имеем ФРО одной фазы в виде суммы гауссовских распределений и полагаем, что ФОР также является нормальным распределением, то можно сразу получить ФРО новой фазы.

В заключении изложены основные выводы диссертационной работы:

1. Для кубической симметрии монокристалла обеспечена единственность решения задачи восстановления ФРО по ПФ, если решение ищется в классе  $\delta$ -функций или в классе гауссовских распределений на  $SO(3)$ . В работе приведены способы построения решения для каждого из этих классов.
2. ФРО, получаемая в виде линейной комбинации гауссовских распределений не имеет ложных максимумов и отрицательных значений, которые свойственны другим способам получения ФРО.
3. Получены формулы, позволяющие выписать ФРО после фазового превращения, если известно ФРО до превращения и ориентационное соотношение. Показано, что свёртка гауссовских распределений на  $SO(3)$  есть гауссовское распределение.

Основные результаты диссертации опубликованы в работах:

1. Качерин А.С., Шкурпатенко В.А., Папиров И.И., Ни-



колаев Д.И. Аналитическое описание текстуры поликристаллических материалов. Полюсная фигура. / Препринт 85-42 ХФТИ, - М.: ЦНИИатоминформ 1985, с. 50.

2. Николаев Д.И., Савёлова Т.И. О единственности решения одной обратной задачи дифракции. / Тез. докл. Всесоюз. школы-семинара по некорректно поставленным задачам. - Саратов: СГУ. 1985. с 109.

3. Николаев Д.И., Савёлова Т.И. Гауссовские распределения на  $SO(3)$  и их приложения для описания текстур. / Препринт 060-86 МИФИ. - м.: Типография МИФИ, 1986, с. 1-24

4. Николаев Д.И., Савёлова Т.И. О решении задачи восстановления функции распределения зерен по ориентациям в поликристаллах методом Роу-Вунге. / Сб. Методы вычислительной физики и их приложения. - М.: Энергоатомиздат, 1986, с. 52-56

5. Николаев Д.И., Савёлова Т.И. О единственности решения одной обратной задачи дифракции. / Сб. Методы вычислительной физики и их приложения. - М.: Энергоатомиздат, 1986, с. 56-60

6. Бухарова Т.И., Николаев Д.И., Савёлова Т.И. Применение гауссовских распределений на  $SO(3)$  для вычисления физических свойств поликристаллов. / Препринт 066-87 МИФИ, - М.: Типография МИФИ, 1987, с. 1-20.

7. Николаев Д.И., Савёлова Т.И. Об аппроксимации решения одной обратной задачи дифракции  $\delta$ - функциями и гауссовскими распределениями. - ЖВМ и МФ, 1987, № 2, с. 88-91.

8. Николаев Д.И., Савёлова Т.И. Численное решение одной обратной задачи дифракции для группы монокристаллов. / Сб. Прикладные методы вычислительной физики. - М.: Энергоатомиздат, 1987, с. 75-78.

9. Бухарова Т.И., Капчерин А.С., Николаев Д.И., Папилов И.И., Савёлова Т.И., Шкуропатенко В.А. Новый метод восстановления функции распределения зерен по ориентациям. Аксиальная текстура. - ФММ, 1988, том 65, вып. 5. с. 934-939.

10. Бухарова Т.И., Николаев Д.И., Савёлова Т.И. Решение одной прямой и обратной задачи дифракции. / Межвуз. сб. Условно-корректные задачи математической физики и анализа. / Под ред. М.М. Лаврентьева. - Красноярск: Изд-во Краснояр. ун-та., 1988, 276 с.

11. Николаев Д.И., Савёлова Т.И. Аппроксимация функции распределения зерен по ориентациям с помощью гауссовских распределений. / Сб. Математическая обработка и интерпретация результатов физических экспериментов. - М.: Энергоатомиздат, 1989, с. 54-56.