ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ
Лаборатория вычислительной техники и автоматизации

На правах рукописи

САВЕЛОВА Татьяна Ивановна

УДК 935.4:517.958

МЕТОДЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ТЕКСТУРЫ ПОЛИКРИСТАЛЛОВ

05.13.16 - применение вычислительной техники, математического моделирования и математических методов в научных исследованиях

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени доктора
физико-математических наук

Дубна 1991

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

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук, профессор — Федор Павлович ВАСИЛЬЕВ

доктор физико-математических наук, профессор — Владимир Григорьевич МАХАНЬКОВ

доктор технических наук, профессор — Борис Константинович СОКОЛОВ

Ведущая организация - Институт математики СО АН СССР

Защита состоится "11" апреля 1991г. в 10³⁰ часов на заседании специализированного Совета Д 047.01.04 при лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ по адресу: 141980 Дубна Московской об. ЛВТА ОИЯИ

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Автореферат разослан "11" марта 1991 года

Ученый секретарь специализированного совета кандидат физико-математических наук — Ив. — З.М.Иванченко

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность и современное состояние проблемы. Актуальность направления исследования обусловлена развитием изучения влияния текстуры поликристаллических материалов на анизотропию его свойств. Наиболее полное количественное описание текстуры возможно с помощью функции распределения зерен по ориентациям (ФРО). ФРО не поддается прямому измерению, экспериментально могут быть получены лишь полюсные фигуры (ПФ). Применение ФРО в физике твердого тела открывает принципиально новые пути исследования текстур поликристаллов. С помощью ФРО появляются перспективы количественного анализа механизмов процесса деформации материалов и их обработки. Кроме того, исследования ФРО позволяют в ряде случаев предложить способы и режимы обработки материалов, направленных на устранение неблагоприятной и на создание желательной текстуры.

Аналитический подход к описанию текстуры материалов все более применяется в физике металлов, чему во многом способствует усовершенствование аппаратуры для текстурного анализа (в том числе рентгенографической, нейтронографической и ультразвуковой), позволяющее вводить измеряемые величины непосредственно в ЭВМ. Математическим методам описания текстур посвящено большое количество работ, особенно за рубежом (полная библиография содержит более трехсот наименований).

В 1921г. Вефер Ф.З. предложил описывать текстуру с помощью полюсных фигур (ПФ). Сначала ПФ определялись рентгеновским фотометодом. С появлением рентгеновского дифрактометра возросли возможности получения количественных полюсных фигур. Однако анализ ПФ по-прежнему сводился к определению нескольких ориентировок.

Новый этап начался в 1960г., когда Виглин А.С. предложил описывать текстуру с помощью функции распределения зерен по ориентациям. К сожалению, ФРО не поддается обычно прямому измерению. Измерить можно только полюсные фигуры. Это приводит к основной задаче количественного текстурного анализа: вычислить функцию распределения зерен по ориентациям, зная конечное число полюсных фигур, полученных из эксперимента.

В работах Роу Р.Ж. и Бунге Г.Ж. в 1965г. был предложен получивший широкое распространение метод вычисления ФРО, связанный с разложением функции распределения зерен по ориентациям в ряд по обобщенным шаровым функциям и с разложением полюсных фигур в ряд по сферическим функциям. Однако многочисленные попытки вычислить ФРО методом Роу-Бунге часто приводили к неправдоподобным результатам. Причины этого были вскрыты Маттхизом З. в 1979г., который обнаружил неединственность решения данной задачи. Даже если известны все теоретически возможные ПФ (бесчисленное множество), то можно получить лишь четные коэффициенты разложения ФРО в ряд по обобщенным шаровым функциям.

В настоящее время известны как методы получения "четной" части ФРО (метод Роу-Бунге, векторный метод Руэро-Баро, метод Имхофа Ж. и др.), так и методы получения "полной" ФРО (метод "нуль-области" Бунге Г.Ж., итерационный метод Маттхиза З., метод "квадратичной формы"Ван Хута Р. и др.).

Вопросам исследования корректности решения задачи восстановления ФРО по ПФ с помощью стандартных функций посвящены многие работы Маттхиза и его учеников.

Хотя вопросам получения ФРО по ПФ, исследованию корректности исходной задачи посвящено много работ, в том числе монографии (Бунге Г.Ж. 1969г., 1982г., Маттхиз З., Винэл Г.В., Хеллинг К. 1987, 1988, 1989гг.), но эта задача и в настоящее время далека от завершения. Запросы практического использования ФРО в области физики твердого тела требуют создания эффективного устойчивого метода получения функции распределения зерен по ориентациям.

Цели работы.

1. Исследование вопросов корректности решения задачи восстановления функции распределения зерен по ориентациям поликристаллов по экспериментально измеренным полюсным фигурам.
2. Определение и вычисление гауссовских распределений на группе $SO(3)$ и сфере S^2, изучение их свойств.
3. Создание методов корректного решения задачи восстановления ФРО по ПФ.

Научная новизна.

Степень новизны результатов определяется:

- исследованием на корректность задачи восстановления функции распределения зерен по ориентациям поликристаллов по полюсным фигурам;
- нахождением областей зависимостей полюсных фигур путем корректного решения ультрагиперболических уравнений. Последние получены из выведенных на основе изоморфизма $SO(3) \sim SU(2)/\{\pm 1\} \sim \mathbb{R}P^3$ формул обращения для вычисления ФРО по ПФ;
- получением гауссовских распределений на $SO(3)$ и S^2 общего вида, при этом гауссовские распределения на группе $SO(3)$ удовлетворяют центральной предельной теореме;
- созданием новых методов решения задачи восстановления ФРО по ПФ.

Практическая и научная ценность.

Разработанные в диссертации методы и основанные на них алгоритмы описания текстуры поликристаллов использованы для создания численных алгоритмов и програм обработки экспериментальных данных в виде полюсных фигур, полученных рентгеновским или нейтронным способом, с целью получения ФРО для материалов гексагональной и кубической симметрии (бериллий, цирконий, медь, сталь и т.д.). Эти методы могут быть применены для создания численных алгоритмов и програм для вычисления ФРО по ПФ для поликристаллов других симметрий, а также в геофизике для различных геологических образцов.

Разработанные в диссертации методы нахождения областей зависимостей полюсных фигур могут быть использованы для вычисления значений полных ПФ и обратных ПФ по измеренным экспериментально полюсным фигурам, а также для уменьшения погрешностей измерения ПФ с целью получения согласованных между собой ПФ, отвечающих различным кристаллографическим направлениям.

Разработанные в диссертации методы получения ФРО по ПФ с помощью круговых гауссовских распределений для материалов гексагональной симметрии реализованы в программы, внедренные в ХФТИ АН УССР.

Полученные в работе гауссовские распределения на группе $SO(3)$ и сфере S^2 могут быть использованы также в других областях науки и техники.

Апробация работы и публикации.

Результаты диссертационной работы докладывались на Всесоюзных конференциях и семинарах: Всесоюзных конференциях по методам решения некорректно поставленных задач во Фрунзе (1979г.), Самарканде (1985г.), Саратове (1985г.), Красноярске (1986г.); на Всесоюзных конференциях по текстурам и рекристаллизации в металлах и сплавах в Горьком (1983г.), Уфе (1987г.), на школах-семинарах по количественным методам анализа текстуры в Черноголовке (1982г.), Свердловске (1989г.), а также на научных конференциях в МИФИ и научных семинарах в ИПМ АН СССР, ВМК МГУ, ВЦ МГУ, ИМ СО АН СССР (Новосибирск), ИФМ Ур О АН СССР (Свердловск), СИЯИ (Дубна) и в других организациях.

Структура диссертации. Диссертация состоит из введения, пяти глав, приложения, заключения. Работа содержит 226 страницы, включая 55 рисунков и список литературы из 164 наименований.

Автор защищает:

1. Формулы обращения для вычисления четной части ФРО по ПФ.
2. Методы вычисления областей зависимостей прямых и обратных полюсных фигур путем решения ультрагиперболических уравнений.
3. Определение и вычисление гауссовских распределений на группе $SO(3)$ и сфере S^2.
4. Методы корректного решения задачи восстановления ФРО по ПФ путем аппроксимации функции распределения зерен по ориентациям поликристаллов круговыми гауссовскими распределениями на $SO(3)$ и гауссовскими распределениями канонического вида на S^2.
5. Методы регуляризации интегральных уравнений I-го рода в классе обобщенных функций.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во вводной части работы содержится постановка обратной задачи кристаллофизики, состоящей в восстановлении функции распределения зерен по ориентациям поликристаллов по найденным из эксперимента полюсным фигурам. Приведен краткий обзор существующих методов решения задачи.

В главе I дана математическая постановка задачи восстановления функции распределения зерен по ориентациям поликристаллов, исследуются вопросы корректности ее решения.

Решение данной задачи сводится к решению интегрального уравнения на группе $SO(3)$:

$$P_{h_i}(y)=\hat{P}f(g)=(4\pi)^{-1}\int_0^{2\pi}\left[f(\{\varphi,\theta,\psi'\}^{-1}\{\eta,\chi,0\})+f(\{\varphi+\pi,\pi-\theta,\psi'\}^{-1}\{\eta,\chi,0\})\right]d\psi', \quad (I)$$

где $f(g)$ есть ФРО, $g=\{\alpha,\beta,\gamma\}\in SO(3)$, $0\le\alpha$, $\gamma<2\pi$, $0\le\beta\le\pi$ – углы Эйлера вращения. В уравнении (I) ПФ $P_{h_i}(y)$ имеет $h=\{\varphi,\theta\}$ кристаллографическое направление, $y=\{\eta,\chi\}$ – направление в пространстве R^3, $0\le\varphi$, $\eta<2\pi$, $0\le\theta$, $\chi\le\pi$ – сферические координаты векторов $h,y\in S^2$.

Пусть $f(g)\in\mathcal{L}^2$ – пространство квадратично интегрируемых функций на группе $SO(3)$. В этом случае $f(g)$ можно разложить в ряд по обобщенным шаровым функциям $\{T^{\ell}_{mn}(g)\}$, $\ell=0,1,2,\dots$, $m,n=-\ell,-\ell+1,\dots,\ell-1,\ell$. Рассмотрим разложение $f(g)=f_1(g)+f_2(g)$, $\mathcal{L}^2=H_1\oplus H_2$, $f_1(g)\in H_1$, $f_2(g)\in H_2$, где H_1 (соответсвенно H_2) – подпространство, натянутое на четные (нечетные) шаровые функции. Тогда $f_2(g)\in \mathrm{Ker}\,\hat{P}$.

На основе изоморфизмов $SO(3)\sim SU(2)/\{\pm 1\}\sim RP^3$, где $SU(2)$ группа унитарных унимодулярных матриц второго порядка, RP^3 трехмерное проективное пространство, с помощью обобщения преобразования Радона из уравнения (I) получено бесконечно много формул обращения. В качестве следствия отсюда получаем, что функция $P_{h_i}(y)$ является суммой решений двух ультрагиперболических уравнений.

При отображении $SO(3)\sim RP^3$ семейства кривых $\pm h=gy$, $g\in SO(3)$, $h,y\in S^2$ переходят в прямые $x^{\pm}=a^{\pm}t+b^{\pm}$,

$$a^{\pm}=\left\{-\frac{y_1\pm h_1}{y_3\mp h_3},\ -\frac{y_2\mp h_2}{y_3\mp h_3},\ 1\right\},$$

$$b^{\pm}=\left\{\frac{y_2\pm h_2}{y_3\mp h_3},\ -\frac{y_1\mp h_1}{y_3\mp h_3},\ 0\right\},$$

где $h=\{h_1,h_2,h_3\}$, $y=\{y_1,y_2,y_3\}$ единичные векторы в R^3, $y_3\ne\pm h_3$, параметр $|t|<+\infty$, $x=(x_1,x_2,x_3)$. Тогда уравнение (I) примет вид

$$P_h(\psi) = \frac{1}{2}[\hat f(a^+, b^+) + \hat f(a^-, b^-)],$$
$$\hat f(a, b) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(at + b)\,dt. \qquad (2)$$

Рассмотрим задачу построения формул обращения в случае, когда известны интегралы от функции по прямым, используя обобщения преобразования Радона.

Пусть $R^3 = E \oplus L$, причем e базис в E, e_1, e_2 базис в L. Имеем разложение $a(A) = e + a_1 e_1 + a_2 e_2$, $b(s) = s_1 e_1 + s_2 e_2$. Обозначим $F(A, s) \equiv \hat f(a(A), b(s))$, $A = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$, $s = (s_1, s_2)$. Для любой точки $x = (x_1, x_2, x_3)$ положим $x_3 \in E$, $(x_1, x_2) \in L$, $s_1 = x_1 - a_1 x_3$, $s_2 = x_2 - a_2 x_3$, т.е. $s = s(A, x)$. Рассмотрим прямые вида $a(A + \mu C)t + b(s)$, $s = s(A, x)$, $|t| < +\infty$, параметр $|\mu| < +\infty$, $C = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$. Пусть $d(C, D_s) = (c_1 \frac{\partial}{\partial s_1} + c_2 \frac{\partial}{\partial s_2})$.

Теорема I.I. Пусть преобразование Фурье функции $f(x)$, $x \in R^3$ – абсолютно интегрируемая функция. Тогда для решения уравнения (2) справедливы формулы обращения:

$$f_1(x) = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty} d(C, D_s)\{F(A^+ + \mu C, s^+) + F(A^- + \mu C, s^-)\}\,d\mu,$$

где $A^{\pm} = \begin{pmatrix} a_1^{\pm} \\ a_2^{\pm} \end{pmatrix}$, $s^{\pm} = s(A^{\pm}, x)$.

В главе II используется решение системы двух ультрагиперболических уравнений для нахождения областей зависимостей полюсных фигур, как прямых, так и обратных.

Для ПФ $P_{h_i}(y) \equiv F(\varphi, \theta, \gamma, \chi)$, где $h = \{\varphi, \theta\}$, $y = \{\gamma, \chi\}$, $0 \le \varphi$, $\gamma < 2\pi$, $0 \le \theta$, $\chi \le \pi$ – сферические координаты h, y, получено ультрагиперболическое уравнение

$$(1 - z^2)\frac{\partial^2 F}{\partial z^2} - 2z\frac{\partial F}{\partial z} + \frac{1}{1 - z^2}\frac{\partial^2 F}{\partial \gamma^2} =$$
$$= (1 - w^2)\frac{\partial^2 F}{\partial w^2} - 2w\frac{\partial F}{\partial w} + \frac{1}{1 - w^2}\frac{\partial^2 F}{\partial \varphi^2}, \qquad z = \cos\chi,\ w = \cos\theta.$$

Далее в главе II рассматривается решение характеристической задачи Коши для ультрагиперболического уравнения

$$\sum_{i=1}^{n} u_{x_i x_i} = \sum_{i=1}^{n} u_{z_i z_i}, \qquad (3)$$

где $u = u(x, z)$, $x = (x_1, x_2, \dots, x_i)$, $z = (z_1, z_2, \dots, z_n)$,

$$u(x_1, \dots, x_n, z_1, \dots, z_{n-1}, \sqrt{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \sum_{i=1}^{n-1} z_i^2}) = f(x_1, \dots, x_n, z_1, \dots, z_{n-1}). \qquad (4)$$

Теорема 2.3. Если функция $u(x, z)$, удовлетворяющая уравнению (3), четная по z_n, задана в виде (4), то $u(x, z)$ однозначно восстанавливается внутри характеристического конуса

$$\sum_{i=1}^{n} x_i^2 \le \sum_{i=1}^{n} z_i^2.$$

Кроме того, рассматривается задача продолжения решения ультрагиперболического уравнения с заданного многообразия в более широкую область.

Теорема 2.5. Если функция $u(x, z)$, четная по переменной $z_n - z_n^0 = t$, удовлетворяет уравнению (3) и задана при $\sum_{i=1}^{n}(x_i - x_i^0)^2 \le a^2$, $\sum_{i=1}^{n}(z_i - z_i^0)^2 \le \varepsilon^2$, то она однозначно восстанавливается в конусе

$$\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_i - x_i^0)^2} + \sqrt{\sum_{i=1}^{n}(z_i - z_i^0)^2} \le a.$$

Результаты теоремы 2.5 обобщаются с помощью ультралоренцовых преобразований. Предложены численные алгоритмы решения характеристической задачи Коши и задачи продолжения решений для ультрагиперболических уравнений (3).

Полученые результаты имеют приложения к нахождению областей зависимостей ПФ.

Функция $P_{h_i}(y)$ является суммой решений двух ультрагиперболических уравнений

$$\frac{\partial^2 \psi^{\pm}}{\partial x_1^{\pm 2}} + \frac{\partial^2 \psi^{\pm}}{\partial x_2^{\pm 2}} = \frac{\partial^2 \psi^{\pm}}{\partial z_1^{\pm 2}} + \frac{\partial^2 \psi^{\pm}}{\partial z_2^{\pm 2}}, \qquad (5)$$

где

$$z_1^{\pm} = -\frac{2y_1}{y_3 \mp h_3}, \quad z_2^{\pm} = \frac{2y_2}{y_3 \mp h_3},$$

$$z_1^{\pm} = \pm\frac{2h_2}{y_3 \mp h_3}, \quad z_2^{\pm} = \mp\frac{2h_1}{y_3 \mp h_3}.$$

При этом имеем $P_{h_i}(y) = \Psi^{+} + \Psi^{-}$.

Применяя результаты о продолжении решения ультрагиперболических уравнений и ультралоренцовы преобразования к уравнениям (5), получаем различные варианты вычисления областей зависимостей прямых (h_i фиксировано) и обратных (y фиксировано) полюсных фигур.

Глава III посвящена гауссовским распределениям на группе $SO(3)$ и двумерной сфере S^2.

Определение I. Распределение вероятностей $d\mu(g)$ на $SO(3)$ гауссовское, если $d\mu(g)$ безгранично делимо, не является идемпотентной мерой и может быть представлено в виде:

$$\int_{SO(3)} T_g\, d\mu(g) = \exp\Big\{\sum_{i,j=1}^{3} d_{ij} A^i A^j + \sum_{i=1}^{3} d_i A^i\Big\}, \tag{6}$$

где T_g представление группы, A^i - инфинитезимальные операторы, (d_{ij}) - неотрицательно определенная симметричная матрица третьего порядка, d_i действительные числа (i, j = 1,2,3), dg - инвариантная мера на группе $SO(3)$. Сформулирована центральная предельная теорема Р.К.Партасарати, которая имеет место для гауссовского распределения (ГР), указаны способы вычисления ГР и доказаны некоторые его свойства - найден вид коэффициентов разложения для так называемых канонических гауссовских распределений, когда в соотношении (6) $d_i = 0$, $d_{ij} = 0$, $i \neq j$ (i, j = 1,2,3), дана оценка скорости сходимости ряда Фурье для кругового гауссовского распределения (КГР), доказана теорема о свертке и т.д.

Из соотношения (6) получаем для КГР при $d_{11} = d_{22} = d_{33} = \varepsilon^2$, $d_i = 0$, $d_{ij} = 0$, $i \neq j$ (i, j = 1,2,3) выражение:

$$d\mu(g) = f(g)\,dg,$$

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

где $\cos(t/2) = \cos(\beta/2)\cos[(\alpha+\gamma)/2]$, $t \in [0, 2\pi]$, $dg = \frac{1}{\pi}\sin^2\frac{t}{2}\,dt$.

Гауссовские распределения на $SO(3)$ индуцируют гауссовские распределения на S^2.

Определение 2. Гауссовское распределение на S^2 определяется из соотношения (6) при $d_{ij} = 0$, $d_i = 0$, где i или j равны 3, когда нет зависимости от γ.

Если $d\mu(g) = f(g)\,dg$ - гауссовское распределение на $SO(3)$, удовлетворяющее соотношению (6) при $d_{ij} = 0$, $d_i = 0$, i или j равно 3, $g = \{\alpha, \beta, \gamma\} \in SO(3)$, $0 \le \alpha, \gamma < 2\pi$, $0 \le \beta \le \pi$, то гауссовское распределение $\bar{f}(\alpha,\beta)$ на S^2 получаем следующим образом:

$$\bar{f}(\alpha,\beta)\sin\beta\, d\alpha\, d\beta = (8\pi^2)^{-1}\int_0^{2\pi}[f(g)\sin\beta\, d\alpha\, d\beta]\,d\gamma =$$

$$= (4\pi)^{-1}\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} C^{l}_{mo}\, T^{l}_{mo}(g)\sin\beta\, d\alpha\, d\beta,$$

$T^{l}_{mo}(g)$ - обобщенные шаровые функции.

При этом круговое гауссовское распределение на S^2 имеет вид:

$$f(\beta) = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\exp\{-l(l+1)\varepsilon^2\}\,P_l(\cos\beta), \tag{8}$$

где $P_l(\cos\beta)$ полиномы Лежандра.

Гауссовские распределения на S^{n-1} в R^n $(n \ge 2)$ могут быть получены в качестве фундаментального решения уравнения параболического типа на сфере S^{n-1}.

Рассмотрим уравнение

$$\frac{1}{\sin^{n-2}\beta}\frac{\partial}{\partial\beta}\left(\sin^{n-2}\beta\,\frac{\partial f}{\partial\beta}\right) = \frac{1}{R}\frac{\partial f}{\partial t}, \tag{9}$$

где $f=f(\beta,t),\ t\in[0,2\pi],\ k>0,\ t\geq 0,\ n\geq 2.$

Определение 3. Фундаментальным решением уравнения (9) $f_{n-1}(\beta,t)\equiv F_{n-1}(u,t),\quad u=\cos\beta$, называется решение, обладающее свойствами:

$$S_{n-1}\int_0^{\pi} f_{n-1}(\beta,t)\sin^{n-2}\beta\,d\beta=1,\quad f_{n-1}(\beta,0)=\frac{\delta(\beta)}{S_{n-1}\sin^{n-2}\beta},\quad S_{n-1}=\frac{2\pi^{n/2}}{\Gamma(n/2)}.$$

Фундаментальное решение уравнения (9) имеет вид

$$f_{n-1}(\beta,t)\equiv F_{n-1}(u,t)=(S_{n-1}2p)^{-1}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+2p)\exp\{-l(l+2p)kt\}C_l^{p}(u),\qquad (10)$$

$$p=\frac{n-2}{2}>0,\quad C_l^{p}(u)=\frac{\Gamma(l+2p)}{\Gamma(l+1)\Gamma(2p)}\ F(l+2p,-l,p+1,\frac{1-u}{2})-$$

многочлены Гегенбауэра, $F(\alpha,\beta,\gamma,x)$ – гипергеометрическая функция. Из (10) как частные случаи получаем функции (8) при $n=3$ и (7) при $n=4$.

В главе IУ рассматриваются методы восстановления ФРО по ПФ путем аппроксимации гауссовскими распределениями на $SO(3)$.

Из всех гауссовских распределений на группе $SO(3)$ наиболее простой вид имеют КГР (7), остальные гауссовские распределения могут быть получены лишь численно из соотношения (6). Поэтому наиболее простой алгоритм решения задачи получаем при аппроксимации ФРО $f(g)$ круговыми гауссовскими распределениями. Алгоритм состоит из трех этапов.

Шаг I. Определяем количество N КГР $f^{\Gamma}(g,g_{ok},\varepsilon_{ok}^2)$ и положения их "центров" g_{ok}, к = I,2,..., N;

Шаг 2. Представляет ФРО в виде суммы КГР с неизвестными параметрами – "весами" A_k и "полуширинами" ε_{ok}^2:

$$f(g)=\sum_{k=1}^{N}A_k f^{\Gamma}(g,g_{ok},\varepsilon_{ok}^2).\qquad (11)$$

Шаг 3. Находим параметры A_k, ε_{ok}^2, к = I,2,..., N, сравнивая ПФ от ФРО $f(g)$ вида (II) с экспериментально измеренными ПФ.

Шаг I решается методом отдельных ориентировок, если есть экспериментально измеренные ПФ, на которых положения максимумов

$P_{h_i}(y)$ не перекрываются между собой (такие алгоритмы разработаны для случаев гексагональной, кубической, орторомбической симметрий поликристаллов), либо из физических соображений о количестве компонент текстуры и положении их "центров".

На основе данного алгоритма составлены программы для вычисления ФРО по ПФ для материалов гексагональной и кубической симметрий.

Учитывая возможности современных измерений ПФ (наличие погрешностей 5-50%, присутствие примесей в образце, дефектов в кристаллах, неоднородность материала и т.д.), нам представляется, что решение задачи восстановления ФРО по ПФ путем аппроксимации КГР является достаточно простым и обладает рядом преимуществ по сравнению с другими методами. Отметим некоторые из них:

I. Сведение исходной задачи к нахождению сравнительно небольшого количества параметров.

2. Решение данной задачи является единственным в классе функций, представимых в виде суммы заданного числа КГР с известными "центрами".

3. Решение задачи устойчиво относительно погрешностей измерений ПФ (вычисления проводились для уровня ошибок 5-10% в окрестности максимума ФРО).

4. Решение задачи в виде суммы КГР наглядно и позволяет представлять ФРО в привычном для экспериментаторов виде как совокупность основных ориентаций и рассеяний вокруг них (т.е. положения главных максимумов и аналога дисперсии для соответствующих КГР).

5. Данная функция $f(g)$ неотрицательна и не имеет ложных максимумов в случае, когда на ПФ мы можем "разделить" положения "центров".

Кроме того, дан алгоритм аппроксимации ФРО гауссовскими распределениями канонического вида. В этом случае задача определения параметров ГР является нелинейной. Для поликристаллов гексагональной симметрии указаны случаи единственного решения задачи и даны численные алгоритмы нахождения трех параметров для гауссовского распределения канонического вида по одной полюсной фигуре.

Глава У посвящена методам регуляризации решения интегральных уравнений в классе обобщенных функций, в том числе задачи суммирования рядов Фурье и дифференцирования функции, известной с погрешностью, включая дифференцирование дробного порядка. Эти задачи возникают в главах I-IУ настоящей работы.

Обозначим через S' пространство обобщенных функций. Рассмотрим уравнение

$$Ax(t) \equiv k(t)*x(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} k(t-t')x(t')dt' = f(t), \qquad (I2)$$

где $k(t)$, $x(t)$, $f(t)\in S'$. Пусть $\hat{k}(t) = F^{-1}\{(F[k(t)])^{-1}\}\in S'$, где $F\,(F^{-1})$ преобразование (обратное) Фурье. Будем считать, что при наличии точных данных уравнение (I2) имеет единственное решение $x(t)$. Пусть вместо функции $f(t)$ имеем $\{f_\delta(t)\}\in S'$, причем $f_\delta(t)\to f(t)$ при $\delta\to 0$, $0<\delta<\delta_0$, в S', т.е. $(f_\delta,\psi)\to(f,\psi)$ при $\delta\to 0$ для любой функции $\psi(t)\in S$, где S – множество основных функций. Пусть $\{\psi_\alpha(t)\}\in S$, $0<\alpha<\alpha_0$, такое, что $\psi_\alpha(t)\to\delta(t)$ при $\alpha\to 0$. Положим

$$x_\alpha^\delta(t) = f_\delta(t)*\{\hat k(t)*\psi_\alpha(t)\}, \qquad (I3a)$$

$$x_\alpha^\delta(t) = \{f_\delta(t)*\psi_\alpha(t)\}*\hat k(t), \qquad (I3б)$$

соответственно тогда, когда

а) функционалы $\hat k(t)*\psi_\alpha(t)$ финитны при $0<\alpha<\alpha_0$;

б) функционалы $f_\delta(t)*\psi_\alpha(t)$ финитны при $0<\alpha<\alpha_0$, $0<\delta<\delta_0$ и сосредоточены на одном промежутке.

Теорема 5.I. Семейство приближенных регуляризованных решений $\{x_\alpha^\delta(t)\}\to x(t)$ в S' при $\alpha,\delta\to 0$, где $x_\alpha^\delta(t)$ вычисляется по формуле (I3a), или (I3б) в случае выполнения условия а) или б).

Теорема 5.2. Если выполнено условие а) или б), $\|x_\alpha(t)\|_{L_p}\to\|x(t)\|_{L_p}$, $\delta\|\hat k(t)*\psi_\alpha(t)\|_{L_r}\to 0$ при $\alpha,\delta\to 0$, где $\|f_\delta(t)-f(t)\|_{L_q}\le\delta$, $1/p=1/q+1/r-1$, $1<p<+\infty$, $q, r\geq 1$, то $x_\alpha^\delta(t)\to x(t)$ в L_p– норме.

Пусть $x(t)\in L_p[0,2\pi]$, $f(t)\in L_q[0,2\pi]$ периодичны с периодом 2π, $k(t)=\delta(t)$.

Следствие 5.3. При $\delta\alpha^{-1+1/r}\to 0$, α, $\delta\to 0$, имеем

$$\sum_k \Phi(\alpha k)\tilde f_k \exp\{ikt\}\to\sum_k f_k\exp\{ikt\}$$

в норме $L_p[0,2\pi]$; $1<p<+\infty$, где $\|f_\delta(t)-f(t)\|_{L_q}\le\delta$,

$1/p=1/q+1/r-1$, $r\geq 1$, $f_k=(2\pi)^{-1}\int_0^{2\pi}f(t)\exp\{-ikt\}dt$, $\Phi(\omega)=F[\psi(t)]$.

Приведенные методы регуляризации распространяются на нелинейные уравнения, а также на случай функции многих переменных.

Для класса интегральных уравнений типа свертки со случайными ошибками в ядре и правой части решена задача оптимальной регуляризации.

Получена связь метода регуляризации А.Н.Тихонова для уравнений типа свертки с ядрами определенных видов с решением соответствующих им краевых задач.

В приложении приведены численные алгоритмы методов аппроксимации функции распределения зерен по ориентациям δ – функциями и круговыми гауссовскими распределениями (7) на группе $SO(3)$ для поликристаллических материалов гексагональной и кубической симметрий, даны блок-схемы программ для реализации этих методов на ЭВМ.

ФРО поликристалла может быть представлено в виде

$$f(g)=\sum_{k=1}^{N} a_k\,\delta(g g_k^{-1}), \qquad (I4)$$

где $a_k>0$, $\delta(gg_k^{-1})$ – δ – функция с носителем в $g_k\in SO(3)$, $k=1,2,\ldots,N$. Показано, что ФРО вида (I4) определяется однозначто по одной полюсной фигуре $\{10\bar{1}0\}$ для поликристаллов гексагональной симметрии, $\{100\}$ (или $\{110\}$ или $\{111\}$) – для материалов кубической симметрии. На практике в связи с ошибками измерений этот метод может быть использован при наличии небольшого количества зерен в образце $N\leq$ 5–40. Метод аппроксимации δ – функциями применяется для нахождения количества максимумов ФРО и их координат, если они не перекрываются между собой в пределах погрешностей измерений, при решении исходной задачи методом аппроксимации ФРО круговыми гауссовскими распределениями. Приведены расчетные формулы для получения ФРО путем аппроксимации КГР. По численным алгоритмам составлены программы для поликристаллов гексагональной и кубической симметрий на языке ФОРТРАН для ЭВМ серии СМ. Модельные расчеты делались для группы монокристаллов 5-I00 с разной сеткой измерений и решение прямой и обратной задачи для ФРО в виде суммы одного-трех КГР.

По экспериментальным полюсным фигурам вычислялась ФРО методом

15. О решении одной обратной задачи дифракции. Докл. АН СССР, 1982, т.266, № 3, с.590-593.

16. О свойствах решений одной обратной задачи дифракции. Сб. Теоретико-функц.и числ. методы исследования физич. процессов, М., Энергоиздат, 1982, с.124-128.

17. Функции распределения зерен по ориентациям и их гауссовские приближения. Зав.лаб., 1984, т.50, № 5, с.48-52.

18. Гауссовские распределения на $SO/3/$ и их приложения для описания текстур. Препринт 060-86, МИФИ, М., 1986, с.24 (Совм. с Николаевым Д.И.).

19. Предисловие к русскому изданию. В кн. Новые методы исследования текстуры поликристаллических материалов. М., Металлургия, 1985, с.10-30.

20. Формулы обращения для решения задачи восстановления функции распределения ориентации поликристаллов по полюсным фигурам и их следствия. IУ Всесоюзная конф. по текстурам и рекристаллизации в металлах и сплавах, Горький, 1983, с.231-232.

21. О приближенном решении одной обратной задачи дифракции. Всесоюзная школа-семинар по теории некорректных задач, Самарканд, 1983, с.192-193.

22. О единственности решения задачи восстановления функции распределения ориентации кристаллов по полюсным фигурам. Всесоюзная школа-семинар по теории некорректных задач. Самарканд, 1983, с.53.(совместно с Бухаровой Т.И.).

23. Восстановление полной функции распределения ориентировок. Зав.лаб., 1985, т.51, № 10, с.56-60. (Совм. с Бухаровой Т.И.)

24. Приближенное решение одной обратной задачи дифракции. ЖВМ и МФ, 1985, т.25, № 4, с.617-622 (Совм. с Бухаровой Т.И.).

25. Гауссовские приближения решения одной обратной задачи дифракции. Труды Всесоюзной школы-семинара по некорректно поставленным задачам, Саратов, 1985, с.25-26 (Совм. с Николаевым Д.И.).

26. О единственности решения одной обратной задачи дифракции. Труды Всесоюзной школы-семинара по некорректно поставленным задачам. Саратов, 1985, с.109-110. (Совм. с Николаевым Д.И.).

27. О решении задачи восстановления функции распределения зерен по ориентациям в поликристаллах методом Роу-Бунге. Сб. Методы вычисл. физики и их приложения. М. Энергоатомиздат, 1986, с.52-56. (Совм. с Николаевым Д.И.).

28. О единственности решения одной обратной задачи дифракции. Сб. Методы вычисл. физики и их приложения, М., Энергоатомиздат, 1986, с.56-60. (Совм. с Николаевым Д.И.).

29. Аппроксимация решения обратной задачи дифракции δ-функциями и гауссовскими распределениями. ЖВМ и МФ, 1987, т.27, № 5, с.791-793. (Совм. с Николаевым Д.И.).

30. Использование канонических гауссовских распределений на $SO/3/$ для аппроксимации ФРО. У Всесоюзная конференция "Текстуры и рекристаллизация в металлах и сплавах", Уфа, 1987, ч.П, с.217.

31. Гауссовские распределения канонического вида на $SO/3/$. Сб. Прикладные методы вычислительной физики, М., Энергоатомиздат, 1987, с.46-50. (Совм. с Карауловым Д.А.).

32. Численное решение одной обратной задачи дифракции. Сб. Прикладные методы вычисл. физики, М., Энергоатомиздат, 1987, с.75-78. (Совм. с Николаевым Д.И.).

33. Новый метод восстановления ФРО. Аксиальная текстура. ФММ, 1988, т.65, вып.5, с.934-939. (Совм. с Бухаровой Т.И., Капчериным А.С., Николаевым Д.И., Папировым И.И., Шкуропатенко В.А.).

34. Применение гауссовских распределений на $SO/3/$ для вычисления физических свойств поликристаллов. Препринт МИФИ 066-87, М. 1987, с.1-18. (Совм. с Бухаровой Т.И., Николаевым Д.И.).

35. Гауссовское распределение зерен по ориентациям поликристаллов. Межвузовский сборник "Условно-корректные задачи математической физики и анализа". Красноярск, 1988, с.152-156.

36. Решение одной прямой и обратной задачи дифракции. Межвузовский сборник "Условно-корректные задачи матем. физики и анализа". Красноярск, 1988, с.65-68. (Совм. с Бухаровой Т.И., Николаевым Д.И.).

37. Свойства решений одной задачи дифракции. Деп. ВИНИТИ, № 8969-В 87. реферат Изв. ВУЗ ов матем., 1988, № 4, с.88.

38. Применение метода регуляризации при обработке результатов теплофизических экспериментов. Изв. ВУЗов. Нефть и газ, 1987, № 6, с.57-62. (Совм. с Булейко В.М.).

аппроксимации КГР для случаев аксиальной текстуры и текстуры прокатки бериллия, сплава титана с ниобием, стали, меди. Для расчета ФРО использовались одна-две полюсные фигуры, полученные рентгеновским способом или методом дифракции нейтронов.

Отметим, что при вычислении ФРО методом Роу-Бунге для поликристаллов гексагональной и кубической симметрий требуется не менее четырех ПФ для получения коэффициентов разложения ФРО по обобщенным шаровым функциям до $\ell \geq 22$. Метод аппроксимации ФРО круговыми гауссовскими распределениями применим для материалов с любой кристаллографической симметрией, при этом нужно иметь не более трех ПФ.

В заключении приведены основные результаты, полученные автором:

1. Пользуясь изоморфизмом $SO(3) \sim SU(2)/\{\pm 1\} \sim RP^3$, доказано бесконечно много формул обращения для вычисления "половины" функции распределения зерен по ориентациям.

2. Получены ультрагиперболические дифференциальные уравнения для полюсных фигур, установлена корректность их решения. Полученные результаты позволяют продолжать экспериментально измеренные неполные полюсные фигуры, а также находить области зависимостей прямых и обратных полюсных фигур.

3. Определены гауссовские распределения на группе $SO(3)$, удовлетворяющие центральной предельной теореме. Построены гауссовские распределения на S^2 как "проекции" гауссовских распределений на $SO(3)$. Эти распределения могут быть использованы не только в кристаллофизике, но и в других областях научных исследований. Изучены свойства гауссовских распределений на $SO(3)$ и S^2: приведение к каноническому виду, свойства коэффициентов разложения в ряд Фурье по шаровым и сферическим функциям, свойства свертки, зависимость от параметров, являющихся аналогом корреляционной матрицы и т.д.

4. Предложены методы решения задачи восстановления ФРО по ПФ путем аппроксимации ее гауссовскими распределениями на $SO(3)$, указаны классы корректности решения. Эти методы применимы для изучения текстур в физике металлов, геофизике. На основе этих методов составлены программы для вычисления ФРО для материалов гексагональной и кубической симметрий (медь, сталь, алюминий, бериллий, цирконий, титан и др.).

Основные результаты диссертации опубликованы в работах:

1. Об оценке скорости сходимости регуляризованных решений уравнения типа свертки с погрешностями в ядре и правой части. ЖВМ и МФ, 1976, т.16, № 5, с.1091-1101. (Совм. с Зябревым Н.Б.).

2. Об оптимальной регуляризации операторных уравнений с погрешностями в задании оператора и правой части. ЖВМ и МФ, 1977, т.17, № 6, с.1579-1583.

3. Об оптимальной регуляризации уравнений типа свертки с приближенными правой частью и ядром. ЖВМ и МФ, 1978, т.18, с.218-222.

4. Об оптимальной регуляризации уравнений типа свертки со случайными помехами в ядре и правой части. ЖВМ и МФ, 1978, т.18, № 2, с.275-283.

5. О регуляризации при помощи операторов типа Фейера. ЖВМ и МФ. 1978, т.18, № 3, с.583-588.

6. О регуляризации нелинейных интегральных уравнений типа свертки. ЖВМ и МФ, 1979, т.19, № 1, с.22-28.

7. О применении проекционных методов к решению неустойчивых задач. ЖВМ и МФ, 1979, т.19, № 5, с.1091-1096. (Совм. с Кноповой С.М.).

8. Об устойчивом суммировании рядов Фурье. ЖВМ и МФ, 1979, т.19, № 4, с.830-835.

9. Об устойчивом дифференцировании функций. ЖВМ и МФ, 1980, т.20, № 2, с.501-505.

10. О регуляризации уравнения типа свертки в классе обобщенных функций. ЖВМ и МФ, 1982, т.2, № 1, с.231-235.

11. О регуляризации методом усреднения некорректных задач. Всесоюзная конференция по некорректным задачам, Изд. ИЛИМ, Фрунзе, 1979, с.104-105.

12. О регуляризации линейных интегральных уравнений типа свертки. Сб. Матем. методы исследования физич.процессов. М., Энергоиздат, 1982, с.127-134.

13. О связи метода регуляризации А.Н.Тихонова для некоторых уравнений типа свертки с решением краевых задач. ЖВМ и МФ, 1982, т.22, № 6, с.1316-1322.

14. О некорректности одной задачи кристаллофизики. ЖВМ и МФ, 1983, т.23, № 4, с.922-928. (Совм. с Волковым Н.Г.).

39. Гауссовские распределения на $SO/3/$ и полюсные фигуры. Препринт МИФИ 090-88, 1988, с.I-22.(Совм. с Ратниковой Т.А.).

40. Описание класса корректности решения одной обратной задачи кристаллофизики. Сб. Мат. обработка и интерпретация результатов физ. экспериментов. М., Энергоатомиздат, 1989, с.16-19. (Совм. с Бухаровой Т.И.).

41. Аппроксимация функции распределения зерен по ориентациям с помощью гауссовских распределений. Сб. Мат. обработка и интерпретация результатов физ. экспериментов. М., Энергоатомиздат, 1989, с.54-56. (Совм. с Николаевым Д.И.).

42. Полюсные фигуры гауссовских распределений канонического вида. Сб. обработка и интерпретация результатов физ. экспериментов. М., Энергоатомиздат, 1989, с.76-81. (Совм. с Шалаевым М.А.).

43. Вычисление ПФ и восстановление ФРО по ПФ для гауссовских распределений канонического вида. Зав. лаб., 1989, т.55, № 9, с.57-60.

44. Аналитическое описание текстуры с помощью гауссовских распределений. Изв. АН СССР, Металлы, 1989, № 6, с.165-169. (Совм. с Николаевым Д.И.).

45. Численный метод решения характеристической задачи Коши для ультрагиперболических уравнений. ЖВМ и МФ, 1990, т.30, № 2, с.320-325.

46. Восстановление гауссовских распределений канонического вида по полюсным фигурам. Сб. Мат. моделирование задач механики сплошной среды. М., Энергоатомиздат, 1989, с.61-64. (Совм. с Леиной С.Е.).

47. Гауссовские распределения на S^2. Сб. Мат. моделирование задач механики сплошной среды. М., Энергоатомиздат, 1989, с.73-77. (Совм. с Ратниковой Т.А.).

48. Решение одной обратной задачи дифракции для монокристаллов кварца. Сб. Матем.моделирование задач механики сплошной среды. М., Энергоатомиздат, 1989, с.77-80. (Совм. с Ратниковой Т.А.).

Подп. к печати 28 XII. 90 г. Заказ 3298 Тираж 100 экз.

Типография МИФИ, Каширское шоссе, д.31.