

## ВЫЧИСЛЕНИЕ ФРО И ПФ АКСИАЛЬНОЙ КОМПОНЕНТЫ НОРМАЛЬНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕКСТУРЫ

© 2019 г. В. Г. Попков<sup>1,\*</sup>, Т. И. Савелова<sup>1,\*\*</sup>, Т. М. Иванова<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, Москва, 115409, Россия*

*\*e-mail: barsukkin@gmail.com*

*\*\*e-mail: TISavelova@mephi.ru*

Поступила в редакцию 21.03.2019 г.

После доработки 30.03.2019 г.

Принята к публикации 09.04.2019 г.

Аппроксимация стандартными функциями — один из методов восстановления функции распределения ориентаций зерен в поликристаллических материалах по набору экспериментально измеренных полюсных фигур. На практике для решения этой задачи часто используются центральное и каноническое нормальные распределения. Центральное распределение имеет круговой характер рассеяния, каноническое — неизотропный. Функция распределения ориентаций может иметь пиковые и аксиальные компоненты. Пиковая компонента имеет колоколообразную форму с единственным максимумом в ориентационном пространстве. Аксиальная является усреднением пиковой относительно вращений вокруг выделенной оси.

В данной работе вычислены функции распределения ориентаций для аксиальных компонент центрального и канонического нормальных распределений, построены полюсные фигуры для канонического нормального распределения с различными параметрами. Произведено количественное и качественное сравнение точного и аппроксимирующего выражений для аксиальной компоненты центрального нормального распределения. Сделан вывод о целесообразности применения аппроксимирующей функции для упрощения вычисления аксиальной компоненты для нормального распределения с круговым и некруговым характером рассеяния текстуры поликристаллов. Поскольку реальные текстуры обычно включают в себя несколько аксиальных компонент с разными параметрами и весами, вычисления функции распределения по ориентациям сильно упростятся при использовании аппроксимирующего выражения.

*Ключевые слова:* функция распределения ориентаций, полюсная фигура, аксиальная текстура, нормальное распределение

**DOI:** 10.1134/S2304487X19030106

### ВВЕДЕНИЕ

Восстановление функции распределения зерен по ориентациям (ФРО) поликристаллических материалов по полученным из рентгеновского или нейтронного эксперимента полюсным фигурам (ПФ) является основной задачей количественного текстурного анализа [1]. Одним из методов вычисления ФРО по ПФ является метод аппроксимации стандартными функциями, среди которых наиболее известны нормальные распределения (НР) ([2]–[5]).

В частности, в текстурном анализе используются центральное нормальное распределение (ЦНР), имеющее круговой характер рассеяния, и неизотропное каноническое нормальное распределение (КНР) ([4], [6]). Обычно функция распределения ориентаций представляется набором пиковых и аксиальных компонент. Пиковая компонента имеет колоколообразную форму с един-

ственным максимумом в ориентационном пространстве. Аксиальная является усреднением пиковой относительно вращений вокруг выделенной оси.

Центральные нормальные распределения представляются в виде ряда по характерам представлений группы вращений  $SO(3)$ , а канонические нормальные распределения — в виде ряда по обобщенным шаровым функциям, коэффициенты которого могут быть найдены только численно ([4], [6]). В [5] получена приближенная аналитическая формула для вычисления КНР. В [7] дан численный анализ аналитическому приближению канонических нормальных распределений.

Для аксиальной компоненты центральных нормальных распределений известно выражение в виде ряда по полиномам Лежандра [3]. В [8], [9] дано приближение для аксиальной компоненты

ЦНР и КНР в замкнутой форме, упрощающее вычисления соответствующих распределений.

В настоящей работе проведены вычисления аксиальной компоненты ЦНР и КНР и полюсных фигур для некоторого набора параметров. Дано сравнение точной и аппроксимирующей функций для случая аксиальной компоненты центрального нормального распределения.

### 1. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ

Пусть  $g = (\varphi, \theta, \psi)$  – углы Эйлера вращения на группе  $SO(3)$ ,  $0 \leq \varphi, \psi < 2\pi$ ,  $0 \leq \theta \leq \pi$ .

Определение 1 ([4], [6]). Распределение вероятностей  $\mu(g)$  на  $SO(3)$  является нормальным, если  $\mu(g)$  безгранично делимо, не является идемпотентной мерой и может быть представлено в виде

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

где  $T_g$  – неприводимое представление группы,  $A_i$  – инфинитезимальные операторы представления,  $(\alpha_{ij})$  – неотрицательно определенная симметричная матрица 3-го порядка,  $\alpha_i$  – действительные числа. В этом случае  $d\mu(g) = f(g)dg$ .

Определение 2. Нормальное распределение называется каноническим (КНР), если в уравнении (1)  $\alpha_{ij} = \alpha_i \delta_{ij}$ ,  $\alpha_i = 0$ ,  $i, j = 1, 2, 3$ . Каноническое нормальное распределение может быть представлено в виде ряда Фурье по обобщенным сферическим функциям:

$$f(g) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m,n=-l}^l C_{mn}^l t_{mn}^l(g), \quad (2)$$

где коэффициенты разложения  $C_{mn}^l$  могут быть найдены численно из уравнения (1).

Определение 3. Нормальное распределение называется центральным (ЦНР), если в (1)  $\alpha_{ij} = \varepsilon^2 \delta_{ij}$ ,  $\alpha_i = 0$ ,  $i, j = 1, 2, 3$ . Центральное нормальное распределение имеет вид

$$f(g) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \exp\{-l(l+1)\varepsilon^2\} \frac{\sin((l+1/2)\omega)}{\sin(\omega/2)}, \quad (3)$$

где  $g = [\mathbf{n}, \omega]$  – представление вращения через мгновенную ось  $\mathbf{n}$  и угол поворота,  $\omega \in [0, \pi]$ ,  $\cos \omega = \frac{1}{2}(\text{Sp}(g) - 1)$ .

### 2. АКСИАЛЬНАЯ КОМПОНЕНТА ЦЕНТРАЛЬНОГО НОРМАЛЬНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

Для ЦНР (3) при наличии аксиальной компоненты текстуры с осью  $\mathbf{n}_A$  выражение для ФРО имеет вид ([6], с. 106)

$$f^{\text{axial}}(g, g_0, \mathbf{n}_A, \varepsilon^2) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \exp\{-l(l+1)\varepsilon^2\} P_l((g\mathbf{n}_A, g_0\mathbf{n}_A)), \quad (4)$$

где  $g_0$  – центр НР,  $P_l(z)$  – полиномы Лежандра.

В [8] получено аппроксимирующее выражение для аксиальной компоненты ЦНР (4) в виде

$$f_{\text{approx}}^{\text{axial}}(g, g_0, \mathbf{n}_A, \varepsilon^2) = \frac{\frac{1}{\varepsilon^2} + \frac{1}{2} \left(1 - [\mathbf{n}_A, \mathbf{n}]^2 \left(\sin \frac{\omega}{2}\right)^2\right)}{\left(1 - [\mathbf{n}_A, \mathbf{n}]^2 \left(\sin \frac{\omega}{2}\right)^2\right)^{3/2}} \times \exp \left\{ -\frac{1}{\varepsilon^2} \frac{[\mathbf{n}_A, \mathbf{n}]^2 \left(\sin \frac{\omega}{2}\right)^2}{1 - [\mathbf{n}_A, \mathbf{n}]^2 \left(\sin \frac{\omega}{2}\right)^2} \right\}, \quad (5)$$

где  $\omega$  – угол поворота вокруг мгновенной оси  $\mathbf{n}$ , представляющие  $g_0^{-1}g$ .

В частном случае вращения вокруг оси  $OZ$   $\mathbf{n}_A = (0, 0, 1)$ , и из (5) находим

$$f_{\text{approx}}^{\text{axial}}(g, g_0, (0, 0, 1), \varepsilon^2) = \frac{\frac{1}{\varepsilon^2} + \frac{1}{2} \left(\cos \frac{\theta}{2}\right)^2}{\left(\cos \frac{\theta}{2}\right)^3} \exp \left\{ -\frac{1}{\varepsilon^2} \left(\tan \frac{\theta}{2}\right)^2 \right\}, \quad (6)$$

где  $\theta$  – второй угол Эйлера для вращения  $g_0^{-1}g$ .

### 3. АППРОКСИМАЦИЯ ДЛЯ АКСИАЛЬНОЙ КОМПОНЕНТЫ КАНОНИЧЕСКОГО НОРМАЛЬНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

В работе [9] аппроксимация аксиальной компоненты для канонического нормального распределения (2) с осью  $\mathbf{n}_A = (0, 0, 1)$  и параметрами рассеяния  $\varepsilon_i^2 = \alpha_{ii}$ ,  $i = 1, 2, 3$  имеет вид

$$f_{\text{approx}}^{\text{axial}}(g, g_0, (0, 0, 1), \varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon_1 \varepsilon_2 \varepsilon_3} \frac{1 + \frac{1}{2A} + \frac{B^2}{A^2}}{\sqrt{A} \left(\cos \frac{\theta}{2}\right)^4} \exp \left\{ -\frac{AC - B^2}{A} \right\}, \quad (7)$$

где

$$A = \left( \frac{(\cos \psi)^2}{\varepsilon_1^2} + \frac{(\sin \psi)^2}{\varepsilon_2^2} \right) \left( \tan \frac{\theta}{2} \right)^2 + \frac{1}{\varepsilon_3^2},$$

$$B = \left( \frac{1}{\varepsilon_2^2} - \frac{1}{\varepsilon_1^2} \right) \sin \psi \cos \psi \left( \tan \frac{\theta}{2} \right)^2,$$

$$C = \left( \frac{(\sin \psi)^2}{\varepsilon_1^2} + \frac{(\cos \psi)^2}{\varepsilon_2^2} \right) \left( \tan \frac{\theta}{2} \right)^2.$$

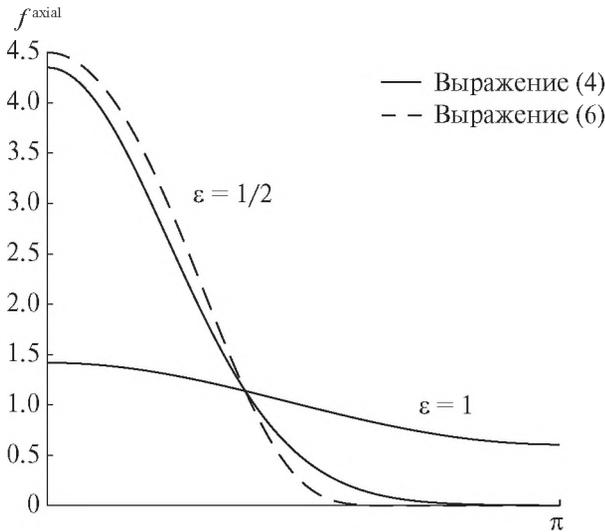


Рис. 1. Точное выражение (4) и аппроксимирующее выражение (6) аксиальной компоненты ЦНР для  $\epsilon = 1$  и  $\epsilon = 1/2$ .

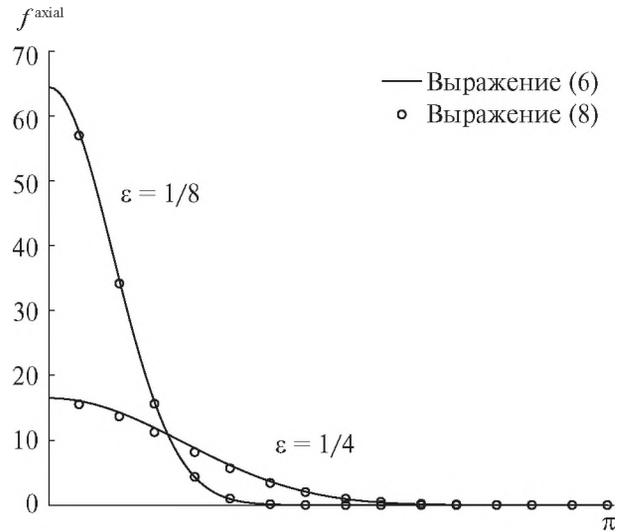


Рис. 2. Аппроксимирующие выражения (6) и (8) аксиальной компоненты ЦНР для  $\epsilon = 1/4$  и  $\epsilon = 1/8$ .

При изотропном рассеянии  $\epsilon_i = \epsilon, i = 1, 2, 3$ , и распределение (7) переходит в (6).

#### 4. ВЫЧИСЛЕНИЕ ФРО ДЛЯ АКСИАЛЬНОЙ КОМПОНЕНТЫ ЦНР

В работе проведены вычисления аксиальной компоненты ЦНР с осью  $\mathbf{n}_A = (0, 0, 1)$  и параметрами рассеяния  $\epsilon = 2^{-k}, k = 0, 1, 2, 3$  для сравнения с аксиальной компонентой, определяемой выражением (6). Результаты приведены на рис. 1 (для значений  $\epsilon = 1$  и  $\epsilon = 1/2$ ), рис. 2 (для значений  $\epsilon = 1/4$  и  $\epsilon = 1/8$ ). При  $\epsilon = 1$  и  $\epsilon = 1/2$  в выражении (4) количество слагаемых выбиралось по формуле  $l_{\max} = \frac{\sqrt{-\ln \delta}}{\epsilon}$ , где  $\delta = 10^{-3}$  – погрешность вычисления. При  $\epsilon = 1/4$  и  $\epsilon = 1/8$  суммирование ряда (4) заменялось аппроксимирующим выражением ([6], с. 266)

$$f_{\text{approx}}^{\text{axial}}(g, g_0, (0, 0, 1), \epsilon^2) = \frac{1}{\epsilon^2} \exp\left(-\frac{\theta^2}{4\epsilon^2}\right). \quad (8)$$

Можно заключить, что при значениях  $\epsilon < 1/2$  аппроксимирующее распределение (6) дает результаты, практически совпадающие с таковыми для аксиальной компоненты ЦНР (4).

Для сравнения точности приближения  $f^{\text{axial}} = f_1(\theta)$  (4) аппроксимирующей функцией  $f_{\text{approx}}^{\text{axial}} = f_2(\theta)$  (6) вычислены величины

$$\Delta_1 = \max_{0 \leq \theta \leq \pi} |f_1(\theta) - f_2(\theta)| \frac{1}{2} \sin \theta,$$

$$\Delta_2 = \left( \int_0^\pi [f_1(\theta) - f_2(\theta)]^2 \frac{1}{2} \sin \theta d\theta \right)^{1/2}.$$

Результаты для различных значений  $\epsilon$  занесены в таблицу 1.

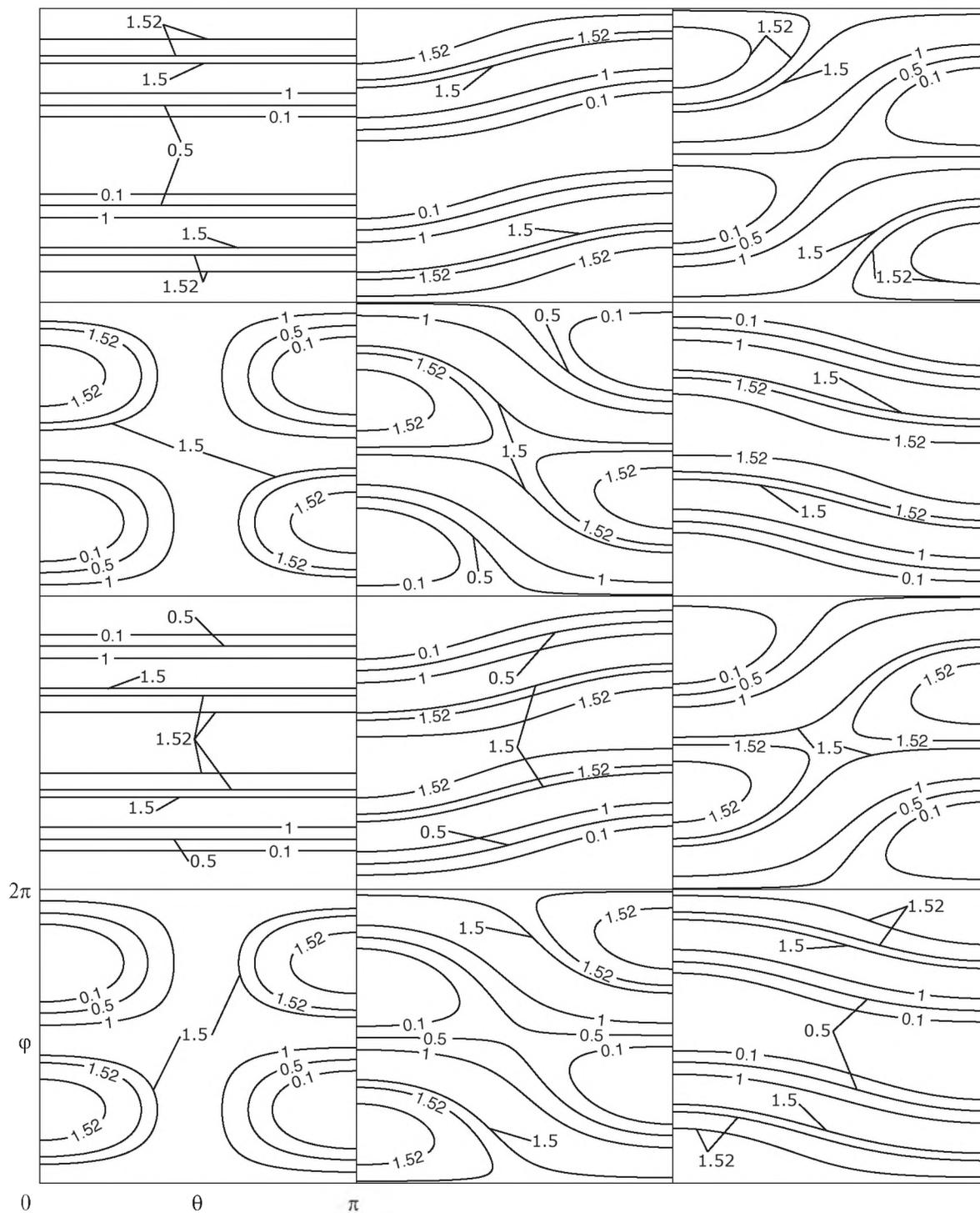
Из табл. 1 видим, что с уменьшением  $\epsilon$  погрешность аппроксимации уменьшается с 0.23 до 0.03 в норме  $\Delta_1$  и с 0.38 до 0.05 в норме  $\Delta_2$ .

В работе были выполнены вычисления аксиальной компоненты аппроксимирующего распределения (5) с осью текстуры  $\mathbf{n}_A = (1, 0, 0)$  и  $g_0 = (0, 0, 0)$   $\epsilon = 1$  и  $\epsilon = 1/8$  по формуле

$$f_{\text{approx}}^{\text{axial}}(g, g_0, (1, 0, 0), \epsilon^2) = \frac{1}{\epsilon^2} + \frac{1 + \cos \varphi \cos \psi - \sin \varphi \sin \psi \cos \theta}{4} \times \left( \frac{1 + \cos \varphi \cos \psi - \sin \varphi \sin \psi \cos \theta}{2} \right)^{3/2} \times \exp \left\{ -\frac{1}{\epsilon^2} \frac{1 - (\cos \varphi \cos \psi - \sin \varphi \sin \psi \cos \theta)}{1 + \cos \varphi \cos \psi - \sin \varphi \sin \psi \cos \theta} \right\}.$$

Таблица 1

$\epsilon$	1	1/2	1/4	1/8
$\Delta_1$	0.2338	0.1237	0.0662	0.0331
$\Delta_2$	0.3792	0.1950	0.0962	0.0478



**Рис. 3.** Сечения аппроксимирующего выражения аксиальной компоненты ЦНР ( $\epsilon = 1$ ) для  $k = 0, 1, \dots, 11$  слева направо и сверху вниз.

Сечения полученных ФРО приведены на рис. 3 ( $\epsilon = 1$ ) и рис. 4 ( $\epsilon = 1/8$ ). Данные сечения построены для значений  $\psi_k = \frac{\pi}{6}k$ ,  $k = 0, 1, \dots, 11$ , угол  $\theta \in [0, \pi]$  отсчитывается по горизонтали, а угол  $\phi \in [0, 2\pi]$  – по вертикали.

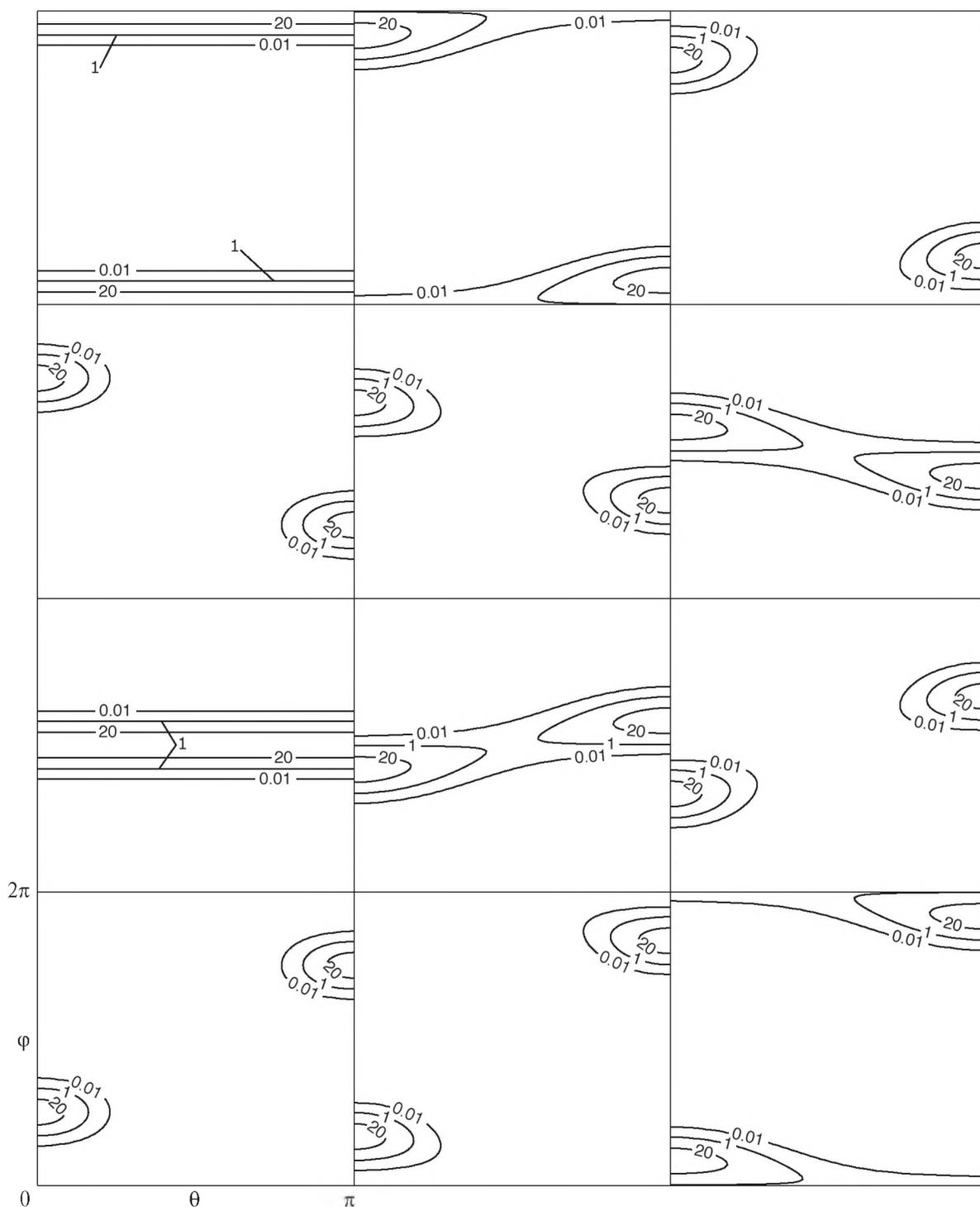
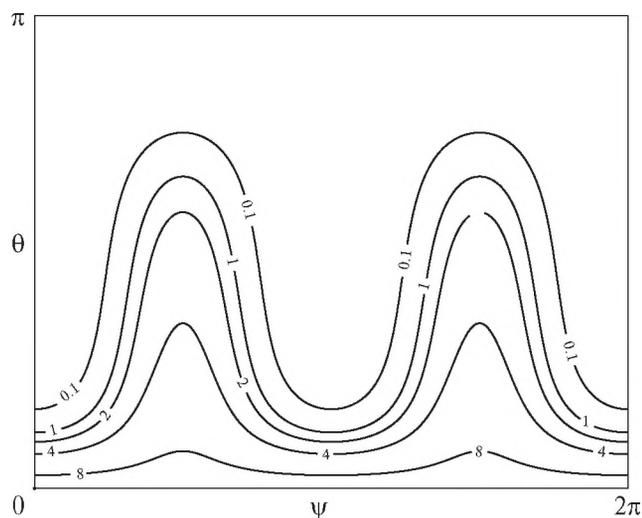


Рис. 4. Сечения аппроксимирующего выражения аксиальной компоненты ЦНР ( $\epsilon = 1/8$ ) для  $k = 0, 1, \dots, 11$  слева направо и сверху вниз.

5. ВЫЧИСЛЕНИЕ ФРО И ПФ ДЛЯ АКСИАЛЬНОЙ КОМПОНЕНТЫ КНР

В работе проведены вычисления аксиальной компоненты канонического нормального рас-

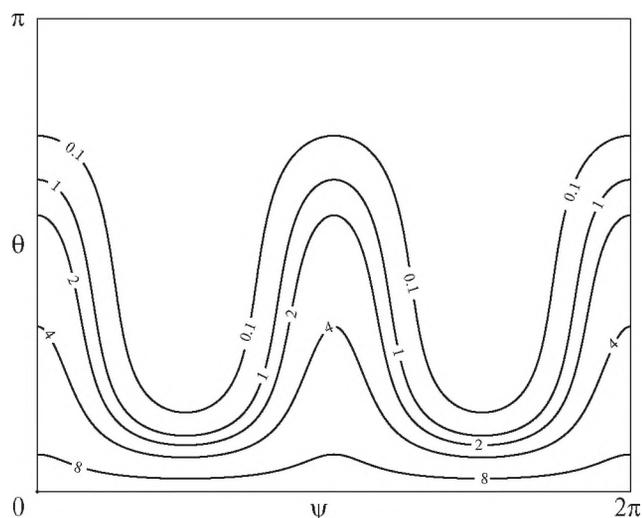
пределения по аппроксимирующей формуле (7) для оси вращения  $\mathbf{n}_A = (0, 0, 1)$  и наборов параметров рассеяния  $(\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3) = (1, \frac{1}{8}, \frac{1}{2})$  и  $(\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3) = (\frac{1}{8}, 1, \frac{1}{2})$ .



**Рис. 5.** Линии уровня аппроксимирующего выражения (7) аксиальной компоненты КНР при  $(\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3) = (1, \frac{1}{8}, \frac{1}{2})$ .

Результаты приведены на рис. 5 и рис. 6 соответственно. Угол  $\psi \in [0, 2\pi]$  отсчитывается по горизонтали, а угол  $\theta \in [0, \pi]$  – по вертикали.

Полюсная фигура, порожденная распределением (7) с осью  $\mathbf{n}_A = (0, 0, 1)$  и параметрами рассе-

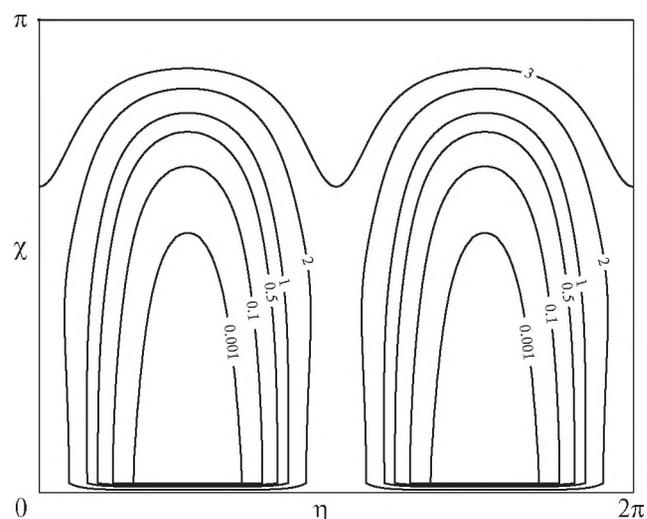


**Рис. 6.** Линии уровня аппроксимирующего выражения (7) аксиальной компоненты КНР при  $(\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3) = (1, \frac{1}{8}, \frac{1}{2})$ .

яния  $(\frac{1}{8}, 1, \frac{1}{2})$ , вычислена с использованием уравнений связи  $\pm \mathbf{y} = g\mathbf{h}$ , где  $\mathbf{y} \in S^2$  – направление в образце,  $\mathbf{h} \in S^2$  – кристаллографическое направление. На рис. 7 приведена ПФ для  $\mathbf{h} = (1, 0, 0)$ ,  $\mathbf{y}$  определяется полярным углом  $\chi \in [0, \pi/2]$  и азимутальным углом  $\eta \in [0, 2\pi]$ .

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе рассмотрены и проиллюстрированы функция распределения ориентаций для аксиальной компоненты центрального и канонического нормального распределения и полюсная фигура, порождаемая аксиальной компонентой КНР. Полученные в ([8], [9]) аппроксимирующие выражения позволяют проще вычислять аксиальные компоненты для нормального распределения с круговым и некруговым характером рассеяния текстуры поликристаллов относительно оси вращения. Если учесть, что в реальных текстурах присутствуют, как правило, несколько аксиальных компонент с разными весами и параметрами ([3], [6]), то расчеты ФРО и ПФ для них заметно упростятся.



**Рис. 7.** Полюсная фигура аппроксимирующего выражения аксиальной компоненты КНР для рис. 6 для  $\mathbf{h} = (1, 0, 0)$ .

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bunge H.J. *Texture Analysis in Material Science. Mathematical Methods*. London, Butterworths Publ., 1982.
2. Schaeben H. A Unified View of Methods to Resolve the Inverse Problem of Texture Goniometry. *Textures and Microstructures*, 1996. V. 25. № 2–4. P. 171–181.
3. Бухарова Т.И., Капчерин А.С., Николаев Д.И., Папиров И.И., Савелова Т.И., Шкуропатенко В.А. Новый метод восстановления функции распределения зерен по ориентациям. *Аксиальная текстура. ФММ*, 1988. Т. 65. № 5. С. 934–939.
4. Bucharova T.I., Savyolova T.I. Application of Normal Distribution on  $SO(3)$  and  $S^n$  for Orientation Distribution Function Approximation. *Textures and Microstructures*. 1993. V. 21. P. 161–176.
5. Ivanova T.M., Nikolaev D.I. New Standard Function for Quantitative Texture Analysis. *Phys. stat. sol. (b)*. 2001. V. 228. № 3. P. 825–836.
6. Савелова Т.И., Иванова Т.М., Сыпченко М.В. Методы решения некорректных задач текстурного анализа и их приложения. М., НИЯУ МИФИ, 2012.
7. Попков В.Г., Савелова Т.И. Метод аналитических приближений вычисления канонических нормальных распределений на группе  $SO(3)$ . *Вестник НИЯУ МИФИ*, 2018. Т. 7. № 4. С. 360–366.
8. Ivanova T.M. Axial closed form texture component approximating the canonical normal distribution. 7th International conference “Problems of Mathematical Physics and Mathematical Modelling”: Books of abstracts (Moscow, NRNU MEPhI, 25–27 June). Moscow, 2018. P. 105–106.
9. Ivanova T.M. Axial closed-form texture component approximating the canonical normal distribution. *Journal of Physics: Conf. Series* 1205 (2019) 012021.

---

Vestnik Natsional'nogo issledovatel'skogo yadernogo universiteta “MIFI”, 2019, vol. 8, no. 3. pp. 289–296

---

## Calculation of the Orientation Distribution Function and Pole Figures of the Axial Component of the Normal Texture Distribution

V. G. Popkov<sup>a,#</sup>, T. I. Savyolova<sup>a,##</sup>, and T. M. Ivanova<sup>a</sup>

<sup>a</sup> National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, 115409 Russia

<sup>#</sup>e-mail: barsukkin@gmail.com

<sup>##</sup>e-mail: TISavelova@mephi.ru

Received March 21, 2019; revised March 30, 2019; accepted April 9, 2019

**Abstract**—Approximation by standard functions is one of the methods to reconstruct the orientation distribution function of grains in polycrystalline materials from a set of experimentally measured pole figures. In practice, the central and canonical normal distributions are often used to solve this problem. The central distribution has a circular scattering character, whereas the canonical one is anisotropic. The orientation distribution function can have peak and axial components. The peak component is bell-shaped and has a single maximum in the orientational space. The axial component is the average of the peak component over rotations around the selected axis. The distribution functions for the orientations of the axial components of the central and canonical normal distributions have been calculated. Pole figures for the canonical normal distribution with different parameters are constructed. The exact and approximating expressions for the axial component of the central normal distribution have been compared quantitatively and qualitatively. It is appropriate to use an approximating function to simplify the calculation of the axial component for a normal distribution with circular and noncircular scattering patterns of the texture of polycrystals. Since real textures usually include several axial components with different parameters and weights, calculations of the orientation distribution function are greatly simplified when using the approximating expression.

**Keywords:** orientation distribution function, pole figure, axial texture, normal distribution

DOI: 10.1134/S2304487X19030106

## REFERENCES

1. Bunge H.J. *Texture Analysis in Material Science. Mathematical Methods*. London, Butterworths Publ., 1982.
2. Schaeben H. A Unified View of Methods to Resolve the Inverse Problem of Texture Goniometry. *Textures and Microstructures*, 1996, vol. 25, no. 2–4, pp. 171–181.
3. Bukharova T.I., Kapcherin A.S., Nikolaev D.I., Papirov I.I., Savyolova T.I., Shкуропатенко В.А. Novyj metod vosstanovlenija funkcii raspredelenija zzyoren po orientacijam. Aksial'naja tekstura [New method of restoring the distribution function of grains by orientations. Axial texture]. *Fiz. Met. i Metallov.*, 1988, vol. 65, no. 5, pp. 934–939 (in Russian).

4. Bucharova T.I., Savyolova T.I. Application of Normal Distribution on  $SO(3)$  and  $S^n$  for Orientation Distribution Function Approximation. *Textures and Microstructures*. 1993, vol. 21, pp. 161–176.
5. Ivanova T.M., Nikolaev D.I. New Standard Function for Quantitative Texture Analysis. *Phys. stat. sol. (b)*, 2001, vol. 228, no. 3, pp. 825–836.
6. Savyolova T.I., Ivanova T.M., Sypchenko M.V. *Metody reshenija nekorrektnykh zadach teksturnogo analiza i ikh prilozhenija* [Methods for solving incorrect texture analysis tasks and their applications]. Moscow, NIYaU MIFI Publ., 2012 (in Russian).
7. Popkov V.G., Savyolova T.I. Metod analiticheskikh priblizhenij vychislenija kanonicheskikh normal'nykh raspredelenij na gruppe  $SO(3)$  [Analytic Approximation Method for Calculations of Canonical Normal Distributions on  $SO(3)$  Group]. *Vesnik NIYaU MIFI*, 2018, vol. 7, no. 4, pp. 360–366 (in Russian).
8. Ivanova T.M. Axial closed form texture component approximating the canonical normal distribution. *7th International conference "Problems of Mathematical Physics and Mathematical Modelling": Books of abstracts (Moscow, NRNU MEPhI, 25–27 June)*. Moscow, 2018, pp. 105–106.
9. Ivanova T.M. Axial closed-form texture component approximating the canonical normal distribution. *Journal of Physics: Conf. Series* 1205 (2019) 012021.