

УДК 539.26.01

ПРОВЕРКА АДЕКВАТНОСТИ ВОССТАНОВЛЕНИЯ ПФ ПО EBSD ИЗМЕРЕНИЯМ, ВЫПОЛНЕННЫМ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ЗНАЧЕНИЯХ ПАРАМЕТРОВ ЭКСПЕРИМЕНТА

© 2020 г. А. О. Овчинникова^{1,*}, Т. И. Савелова¹

¹ *Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, Москва, 115409, Россия*

**e-mail: aoantonova@mail.ru*

Поступила в редакцию 16.11.2019 г.

После доработки 10.12.2019 г.

Принята к публикации 18.12.2019 г.

В данной работе выполнена проверка адекватности восстановления полюсных фигур (ПФ) по результатам EBSD (Electron Back Scattering Diffraction) эксперимента с помощью новой методики оценки близости двух ПФ. Данный метод основан на аналоге критерия Колмогорова–Смирнова на сфере S^2 и учитывает вероятностную природу ПФ, а также предлагает количественную меру близости сравниваемых ПФ. В данном исследовании выбранный метод был предложен для количественного сравнения ПФ, вычисленной по результатам EBSD эксперимента, с ПФ исследуемого поликристаллического образца с целью оценки влияния выбранных значений параметров EBSD эксперимента на распределение, порождающее ПФ. Подобное сравнение становится возможным благодаря математическому моделированию поликристаллического образца и EBSD эксперимента по его исследованию. Представлен расчет новой метрики близости ПФ образца и ПФ, полученной в результате модельных EBSD измерений при варьировании параметров эксперимента: шага сканирования и порогового угла разориентации. Для сравнения приведены аналогичные результаты вычисления *RP*-фактора, широко используемого для оценки различий между двумя ПФ. Обе метрики были применены для изучения влияния параметра остроты текстуры образца на результат EBSD эксперимента при различных значениях шага сканирования и порогового угла разориентации.

Ключевые слова: EBSD, шаг сканирования, пороговый угол разориентации, поликристалл, математическое моделирование, полюсные фигуры, *RP*-фактор, критерий Колмогорова–Смирнова, количественный текстурный анализ

DOI: 10.1134/S2304487X2001006X

ВВЕДЕНИЕ

Параметры эксперимента EBSD (Electron Back Scattering Diffraction), шаг сканирования и пороговый угол разориентации имеют большое значение для получения достоверных результатов EBSD эксперимента [1–4]. Однако экспериментальный характер исследований материалов с помощью EBSD метода не позволяет сравнить результаты эксперимента с оригинальными характеристиками образца для настройки параметров измерений [5, 6]. Подобное исследование становится возможным с помощью математического моделирования образца и EBSD эксперимента. Ранее авторами была предложена модель поверхности поликристаллического образца и эксперимента по измерению ориентаций зерен на данной поверхности методом EBSD [7, 8], которая в последствии была модифицирована за счет усовершенствования модели зеренной структуры [8]. Для оценки адекватности выбора значений пара-

метров EBSD эксперимента сравниваются текстурные и структурные характеристики, вычисленные по результатам модельного эксперимента, с соответствующими характеристиками модельного образца, которые считаются эталонными.

Наиболее полной характеристикой текстуры является функция распределения ориентаций (ФРО) [10]. Традиционно для исследования текстуры экспериментально измеряются лишь интегральные проекции ФРО – полюсные фигуры (ПФ), отвечающие определенному кристаллографическому направлению [11–13]. ПФ является удобной для визуального анализа характеристикой материала (изображается в виде линий уровня полюсной плотности на единичной сфере S^2). Для сравнения двух ПФ в количественном текстурном анализе наиболее часто используется *RP*-фактор, предложенный в работе [14], чтобы характеризовать сходство измеренных и рассчитанных ПФ. Однако, данная метрика для сравнения текстур может применяться только к кон-

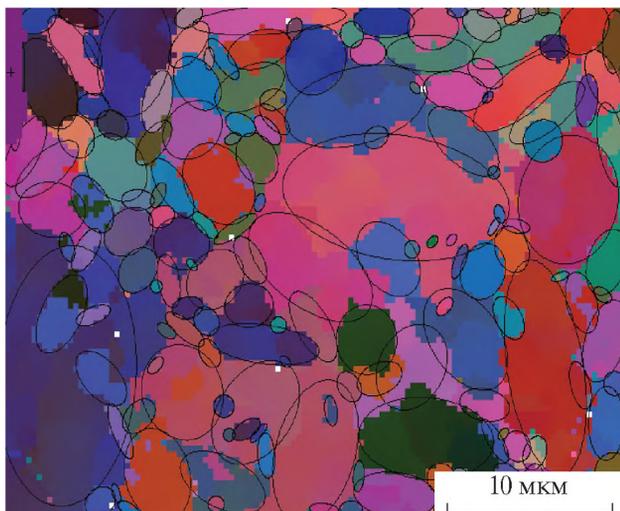


Рис. 1. EBSD карта образца стали, на которой зерна аппроксимированы эллипсами.

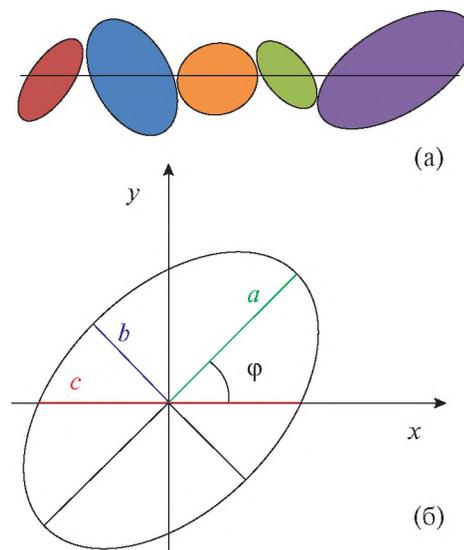


Рис. 2. Схема модельного образца (а) и модели сечения отдельного зерна в виде эллипса (б).

кретным ПФ и не позволяет сделать какие-либо выводы о порождающих распределениях. В работе [15] предложена мера KSP сравнения двух ПФ, основанная на аналоге критерия Колмогорова–Смирнова [16, 17] для сферы S^2 . Данная метрика делает возможным статистически значимое сравнения ПФ для разных образцов.

В данном исследовании было предложено использовать метрику KSP для количественного сравнения ПФ, вычисленной по результатам модельных измерений, с ПФ исследуемого модельного образца с целью оценки влияния выбранных значений параметра EBSD эксперимента на распределение, порождающее ПФ. Для моделирования поверхности образца поликристалла и дальнейшего EBSD эксперимента использована модель, предложенная в работе [9]. С помощью метрики KSP оценено влияние остроты текстуры исследуемого образца на восстановление ПФ по набору EBSD измерений при варьировании параметров эксперимента. Результат представлен в виде графика зависимости значения KSP от параметра остроты текстуры. Для сравнения аналогичные вычисления проведены для RP -фактора.

МЕТОДЫ

Описание моделей поликристаллического образца и EBSD эксперимента

Модельный поликристалл рассматривается как статистический объект S , состоящий из N зерен:

$$S = \{U_i, i = 1, \dots, N\}, U = [x, c, \omega, g(\varphi, \theta, \psi), \delta]. \quad (1)$$

Так определенный вектор U рассматривается как модель сечения отдельного зерна на поверх-

ности образца. В U плоское сечение зерна определяется как повернутый эллипс по аналогии с реальным экспериментом, проводимым с использованием программного обеспечения HKL CHANNEL 5 (Oxford Instruments, Великобритания) [18] и сканирующего электронного микроскопа EVO 50 XVP SEM (ZEISS, Германия), рис. 1. Размер сечения x рассчитывается также как диаметр круга, равного по площади эллипсу. При этом последующие модельные EBSD измерения выполняются вдоль хорд c эллипсов, аппроксимирующих сечения зерен (рис. 2б, 2в). Размеры зерен x моделируются с помощью метода Неймана как случайные величины, подчиняющиеся Γ -распределению $\Gamma(2,1)$, средний размер зерна \bar{x} равен 2.0 мкм [7, 8].

Границы зерен δ определены как случайные величины, равномерно распределенные в интервале $[0, 2\bar{x}/10]$, так что общий размер границ составляет 10% от размера всех зерен.

Моделирование ориентаций зерен выполнено с помощью специализированного метода Монте-Карло для ФРО в форме центрального нормального распределения (ЦНР) [19, 20]:

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

где $t \in [-\pi, \pi]$, $\cos \frac{t}{2} = \cos \frac{\varphi + \psi}{2} \cos \frac{\theta}{2}$; $\chi_l = \sin\left(l + \frac{1}{2}\right)t / \sin \frac{t}{2}$ – характеры представлений группы вращений $SO(3)$; $\frac{1}{\pi} \sin^2 \frac{t}{2} dt$ – инвариантная мера, ϵ – параметр остроты текстуры. При $\epsilon \rightarrow 0$

текстура поликристаллического образца стремится к текстуре монокристалла; $\varepsilon = 1$ соответствует равномерному распределению зерен по ориентациям.

В формулах (1) ω обозначают углы разориентаций между двумя соседними зернами [19].

Определим оператор $\Phi(\mathbf{S}, h, \omega_0)$, моделирующий результат EBSD исследования образца \mathbf{S} с параметрами (h, ω_0) , где $h \in (0, H)$, $H > 0$ – шаг сканирования по модельной поверхности образца, $\omega_0 \in \Omega_0 \subseteq (0, \pi)$ – пороговый угол разориентации. Предполагается, что сканирование ориентаций выполняется вдоль хорд эллипсов. Хорда эллипса вычисляется как

$$c = \frac{x}{\sqrt{(\cos \alpha)^2/k + k(\sin \alpha)^2}}, \quad (3)$$

где x – это диаметр круга, равный по площади данному эллипсу, α – угол поворота эллипса, $k = a/b$ (см. рис. 2б). Предложенная модель с зернами в форме эллипсов представляется более достоверной, согласно процедуре обработки данных в реальном EBSD эксперименте (рис. 1).

Результаты модельных EBSD измерений образца \mathbf{S} могут быть представлены в виде

$$\tilde{\mathbf{S}} = \{\tilde{\mathbf{U}}_i, i = 1, \dots, \tilde{N}\}, \quad \tilde{\mathbf{U}} = [\tilde{x}, \tilde{\omega}, \tilde{g}(\tilde{\varphi}, \tilde{\theta}, \tilde{\psi})]. \quad (4)$$

Метрики для количественной оценки близости ПФ образца и EBSD измерений

ПФ называется графическое изображение функции $P_h(\mathbf{y})$, заданной на единичной сфере $\mathbf{y} = \{\eta, \chi\} \in S^2$ [21]. В отличие от ФРО, которая аналитически описывает кристаллографическую текстуру во всем объеме исследуемого образца, ПФ предоставляют информацию о пространственном распределении кристаллографических направлений \mathbf{h} и являются проекциями ФРО на эти направления.

Для расчета значений ПФ по выборке ориентировок g_i , $i = 1, \dots, N$ в данной работе использовалась статистическая оценка ПФ с ядром в виде ЦНР [22]

$$\hat{P}_h(\mathbf{y}) = \sum_{l(2)=0}^{\infty} (2l+1) \exp\{-l(l+1)\alpha^2\} \times \\ \times \sum_{i=1}^N C_i P^l(g_i^{-1} g_i^{-1} g_h(3,3)), \\ \mathbf{y} = \{\eta, \chi\}, \quad -\pi \leq \eta \leq \pi, \quad 0 \leq \chi \leq \pi, \\ \mathbf{h} = \{\varphi, \theta\}, \quad -\pi \leq \varphi, \psi \leq \pi, \quad 0 \leq \theta \leq \pi, \quad (5)$$

где α – параметр ядра сглаживания (выступающий параметром регуляризации), P^l – полиномы

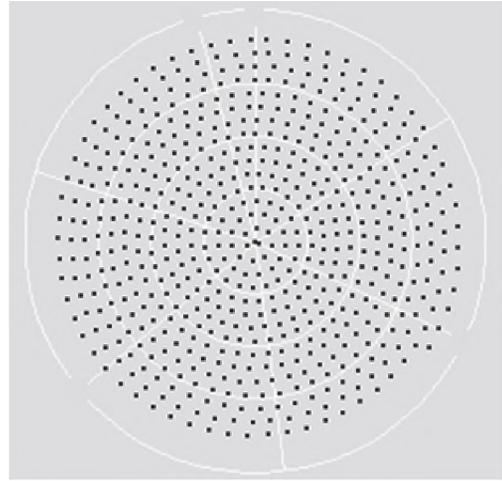


Рис. 3. Стереографическая проекция точек спирали, $n = 600$.

Лежандра, $g_y^{-1} g_i^{-1} g_h(3,3)$ – элемент с индексом 3×3 матрицы вращения $g_y^{-1} g_i^{-1} g_h$, $g_y = \{\mathbf{y}, 0\}$, $g_h = \{\mathbf{h}, 0\}$, $C_i = \frac{1}{N} > 0$, $i = 1, \dots, N$ – веса, одинаковые для всех зерен. Суммирование ведется только по четным l .

Как видно из выражения (5), ПФ является функцией двух переменных $\{\eta, \chi\}$, описывающих точку на единичной сфере. Между тем, критерий Колмогорова–Смирнова применим для распределений, являющихся функциями одной переменной.

Для представления ПФ в виде функции одного переменного ее значения вычислялись в точках спирали на сфере. При этом точки спирали формировали на поверхности сферы разбиение Вороного, являясь при этом центрами ячеек разбиения. Таким образом, точки спирали делят единичную сферу на равные по площади части (рис. 3). Методика построения спирали описана в [23]. Таким образом, формировалась выборка из значений ПФ в точках спирали: $\{P_h(t_i)\}_{i=1..n}$, где t_i , $i = 1, \dots, n$ – точки спирали.

Для сравнения двух ПФ: $\{P_h^1(t_i)\}_{i=1..n}$, $\{P_h^2(t_i)\}_{i=1..n}$ с точки зрения близости функций распределения, которыми они порождаются, вычислялось значение статистики критерия Колмогорова–Смирнова [24]:

$$D_{obs} = \sup_t |F_1(t) - F_2(t)|,$$

$$F_k(t) = \frac{1}{C} \sum_{i=1}^n P_h^k(t_i < t), \quad C = \sum_{i=1}^n P_h^k(t_i), \quad (6)$$

где $F_1(t)$, $F_2(t)$ – эмпирические функции распределения.

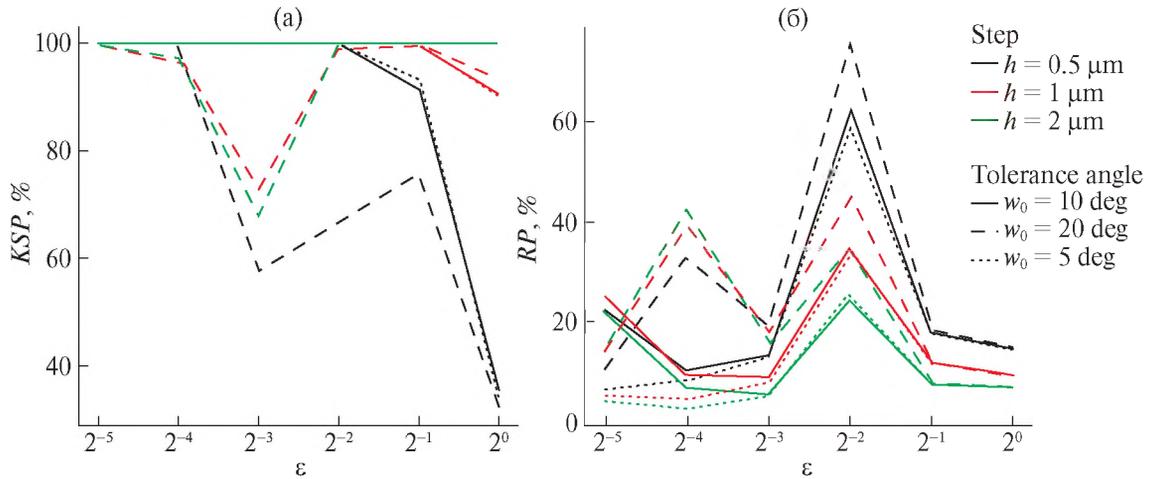


Рис. 4. Зависимость метрик близости ПФ образца и модельных измерений при выбранном наборе параметров EBSD эксперимента: (а) *KSP*, (б) *RP*-фактор, — от параметра остроты текстуры ϵ в исследуемом модельном образце.

Вероятность, что $\{P_h^1(t_i)\}_{i=1..n}$, $\{P_h^2(t_i)\}_{i=1..n}$ относятся к одному и тому же распределению, вычисляется по формуле

$$KSP = \Phi \left[\left(n^{1/2} + 0.12 + \frac{0.11}{n^{1/2}} \right) D_{obs} \right]. \quad (7)$$

Для численной реализации вычисления значений *KSP* был использован алгоритм, описанный в [25]. Если значение, полученное по формуле (7), оказывается меньше уровня значимости, то нулевая гипотеза о совпадении $\{P_h^1(t_i)\}_{i=1..n}$, $\{P_h^2(t_i)\}_{i=1..n}$ отвергается.

В данном исследовании $\{P_h^1(t_i)\}_{i=1..n}$ соответствует ПФ модельного образца, $\{P_h^2(t_i)\}_{i=1..n}$ — ПФ, восстановленная по EBSD измерениям модельного образца. Обозначим их $\{P_h^{spec}(t_i)\}_{i=1..n}$ и $\{P_h^{meas}(t_i)\}_{i=1..n}$ соответственно.

Для сравнения также был выполнен расчет *RP*-фактора [14], вычисляемого по формуле:

$$RP(\Delta) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n'} \frac{|P_h^{spec}(t_i) - P_h^{meas}(t_i)|}{P_h^{spec}(t_i)} \times 100\%, \quad (8)$$

где суммирование ведется по всем точкам спирали $\{t_i\}$, $i = 1, \dots, n'$ на сфере S^2 , в которых выполнено условие $P_h^{spec}(t_i) > \Delta > 0$, n' — общее количество таких точек. Введение параметра обусловлено обрезанием значений полюсной плотности ниже заданного уровня, так как наибольшие погрешности возникают именно для малых значений полюсной плотности вследствие недостаточной статистики зерен.

РЕЗУЛЬТАТЫ

С помощью метрики *KSP* оценено влияние остроты текстуры исследуемого модельного образца на восстановление ПФ{001} по EBSD измерениям при варьировании параметров эксперимента. Результаты представлены в виде графиков зависимостей значений *KSP* от параметра остроты текстуры ϵ (рис. 4а). Для сравнения приведена также аналогичная зависимость *RP*-фактора от параметра остроты текстуры образца.

Начнем обсуждение с графика *RP*-фактора, т.к. данная метрика наиболее распространена при сравнении ПФ. Но прежде заметим, что ω_0 особенно значим для сильнотекстурированных образцов, для которых данный параметр следует задавать не более 10°, и чем сильнее текстура, тем меньшее ω_0 следует выбирать [8]. Это обусловлено тем, что чем сильнее текстура, тем меньше углы разориентации между соседними зернами, т.к. зерна имеют преимущественную ориентацию. Следовательно, меньший пороговый угол разориентации позволяет точнее разделять точки сканирования на поверхности образца на зерна и определять границы зерен для построения карты поверхности образца, пример которой представлен на рис. 1. При ослаблении остроты текстуры в образце углы разориентации на границах зерен увеличиваются и становятся различимы в EBSD эксперименте даже с большим значением ω_0 , например 20°. Данные рассуждения согласуются с полученным графиком *RP*-фактора (рис. 4б): при острых текстурах, $\epsilon < 2^{-4}$, наиболее низкая погрешность вычисления ПФ по EBSD измерениям получается при $\omega_0 = 5^\circ$. В интервале текстур $2^{-4} \leq \epsilon \leq 2^{-1}$ значения $\omega_0 = 5^\circ, 10^\circ$ приводят к близким результатам. Это значит, что при $2^{-4} \leq \epsilon$ текстура стала менее острой, и допускает использование в

качестве порогового угла разориентации $\omega_0 = 10^\circ$. В интервале текстур $2^{-1} \leq \epsilon$ образец является слабо текстурированным, и использование $\omega_0 = 20^\circ$ становится приемлемо, на что указывают близкие значения RP -фактора при все трех рассматриваемых значениях ω_0 .

По графику RP -фактора видно, что чем меньше шаг сканирования, тем больше погрешность вычисления ПФ по EBSD измерениям (при подходящем выборе ω_0 , описанном выше). Неустойчивость вычисления ПФ от шага сканирования упоминалась также в работе [8]. Подобное наблюдение, полученное с помощью моделирования EBSD измерений, согласуется с экспериментальными результатами, представленными в работах [25, 26]. В работе [26], чем меньше шаг, тем вероятнее попадание узла сетки сканирования вблизи границы и искажение величины напряжения. В [27] авторы делают вывод, что сравнение результатов рентгеновского и EBSD методов показало, что малый шаг измерения не нужен для получения компонент макротекстуры.

Мера близости ПФ KSP дает дополнительную информацию при сравнении ПФ образца и результатов эксперимента. Полученный график KSP (рис. 4а) показывает, что вероятность сохранения вида распределения, порождающего ПФ образца, в ходе EBSD измерений снижается, если выбирать большой пороговый угол разориентации $\omega_0 = 20^\circ$. При этом данное наблюдение при всех рассматриваемых значениях шага имеет место при $\epsilon = 2^{-3}$. Однако в отличие от RP -фактора, KSP указывает на то, что для образцов очень сильной текстурой $\epsilon \leq 2^{-4}$, выбор параметров существенно не влияет на вид распределения, т.е. распределение, порождающее ПФ образца, устойчиво к выбору параметров эксперимента при восстановлении ПФ по EBSD измерениям. Кроме этого, для слабых текстур KSP -метрика также предоставляет дополнительную информацию о вычисленной по измерениям ПФ в дополнении в той, что получена с помощью RP -фактора. При ослаблении текстуры образца ($2^{-2} < \epsilon$) на сохранение вида порождающего распределения начинает оказывать шаг сканирования:

– если шаг сканирования равен среднему размеру зерна или половине от него, то независимо от выбора значения порогового угла разориентации вероятность совпадения порождающих распределений ПФ образца и ПФ измерений близка к 100%;

– выбор шага равным $h = 0.5$ мкм приводит к существенному снижению вероятности того, что ПФ образца и измерений принадлежат одному распределению, т.е. измерения существенно искажают картину текстуры. Самое сильное иска-

жение результатов измерений происходит, если при этом выбрать $\omega_0 = 20^\circ$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе проведено исследование влияния остроты текстуры поликристаллического образца на результат EBSD эксперимента. В качестве результата эксперимента были рассчитаны ПФ{001} с помощью статистической ядерной оценки по набору зерен. Благодаря моделированию исследуемой поверхности поликристаллического образца и дальнейших EBSD измерений ориентаций на данной поверхности, было выполнено сравнение ПФ, вычисленных по результатам модельного эксперимента, проведенного с различными значениями параметров измерений, с истинной ПФ исследуемого образца. В качестве метрик сравнения ПФ были использованы RP -фактор и KSP -метрика, как характеристики близости ПФ, дополняющие друг друга.

Было получено, что обе метрики показали преобладающую важность шага сканирования при EBSD исследовании слаботекстурированных образцов, и порогового угла разориентации для образцов сильных текстур. Однако поведение метрик от выбранных параметров носит несколько разный характер. KSP -метрика позволила заметить, что независимо от текстуры, если задавать шаг сканирования, не менее половины среднего размера зерна, и пороговый угол разориентации не больше 10° , то это позволяет сохранить вид порождающего ПФ распределения при восстановлении ПФ по EBSD измерениям. RP -фактор, оценивающий различие двух конкретных ПФ, оказался более чувствителен к выбору параметров эксперимента при различной остроте текстуры образца, особенно к пороговому углу разориентации. Совместное использование обеих метрик предоставляет более полную картину влияния параметров эксперимента на результат восстановления ПФ как с точки зрения точности вычисления ПФ, так и со стороны сохранения вида порождающего распределения.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-31-00036.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Wright S.I., Field D.P. Scalar of Texture Heterogeneity. Materials Science Forum. 2005. V. 495–7. P. 207.
2. Wright S.I. A Parametric Study of Electron Backscatter Diffraction based Grain Size Measurements. Practical Metallography, 2010. V. 47. № 1. P. 16.
3. Миронов С.Ю., Даниленко В.Н., Мышляев М.М., Корнева А.В. Анализ пространственного распределения ориентировок элементов структуры поликристаллов, получаемого методами просвечивающей

- электронной микроскопии и обратно рассеянного пучка электронов в сканирующем электронном микроскопе. ФТТ. 2005. Т. 47. № 7. С. 1217.
4. *Tonga V., Jianga J., Wilkinsonb A.J., Brittona T.B.* The effect of pattern overlap on the accuracy of high resolution electron backscatter diffraction measurements. *Ultramicroscopy*. 2015. V. 155. P. 62.
 5. *Randle V.* Introduction to texture analysis: macrotexture, microtexture and orientation mapping: 2nd ed. Boca Raton: CRC Press, 2010. P. 488.
 6. *Humphreys F.J.* Grain and subgrain characterisation by electron backscatter diffraction, *Journal of materials science*. 2001. V. 36. P. 3833.
 7. *Антонова А.О., Савелова Т.И.* Оценка погрешностей вычисления характеристик текстуры поликристаллов путем изменения параметров измерений методами электронной микроскопии. *Журн. вычислит. матем. и матем. физ.* 2015. Т. 55. № 2. С. 322.
 8. *Антонова А.О., Савелова Т.И.* Исследование методами электронной микроскопии влияния параметров эксперимента на вычисление полюсных фигур поликристаллических материалов. *Кристаллография*. 2016. Т. 61. № 3. С. 495.
 9. *Ovchinnikova A.O., Savyolova T.I.* A novel approach of the grain structure modelling in the framework of polycrystalline specimen and EBSD experiment simulation. *IOP Conf. Series: Journal of Physics: Conf. Series*. 2019. V. 1205. P. 012043.
 10. *Виглин А.С.* Количественная мера текстуры поликристаллического материала. *Текстурная функция*. ФТТ. 1960. Т. 2. № 10. С. 2463.
 11. *Bunge H.J.* Experimental Techniques of Texture Analysis. *Experimental Techniques of Texture Analysis*: ed. by Bunge H.J. DGM Informationsgesellschaft mbH. 1986. P. 1.
 12. *Welch P.I.* Neutron Diffraction Texture Analysis. *Experimental Techniques of Texture Analysis*: ed. by Bunge H.J. DGM Informationsgesellschaft mbH. 1986. P. 183.
 13. *Bunge H.J., Grossterlinden R., Haase A., Ortega R., Szpunar J.A., Van Houtte P.* Advanced Experimental Techniques in X-ray Texture Analysis. *Materials Science Forum*. 1994. V. 157. P. 71.
 14. *Matthies S., Wenk H.-R., Vinel G.W.* Some Basic Concepts of Texture Analysis and Comparison of Three Methods to Calculate Orientation Distributions from Pole Figures. *Journal of Applied Crystallography*. 1988. V. 21. P. 285.
 15. *Lychagina T., Nikolayev D.* Quantitative comparison of measured crystallographic texture *Journal of Applied Crystallography*. 2016. V. 49. P. 1290.
 16. *Kolmogoroff A.N.* Sulla determinazione empirica di una legge di distribuzione. *G. Inst. Ital. Attuari*. 1933. V. 4. P. 83.
 17. *Smirnov N.V.* On the estimation of the discrepancy between empirical curves of distributions for two independent samples. *Moscow State Univ. Bull.* 1939. V. 2. P. 3.
 18. HKL CHANNEL 5 Software [<https://www.oxinst.com/>].
 19. *Савелова Т.И., Иванова Т.М., Сыпченко М.В.* Методы решения некорректных задач текстурного анализа и их приложения. Москва: НИЯУ МИФИ, 2012. С. 268.
 20. *Borovkov M., Savelova T.* The computational approaches to calculate normal distributions on the rotation group. *Mag. Appl. Cristallogr.* 2007. V. 40. P. 449.
 21. *Bunge H.J.* Texture Analysis in Material Sciences. *Mathematical Methods*. Butterworths Publ. London, 1982. P. 593.
 22. *Рогинский К.Н., Савелова Т.И.* Вычисление полюсных фигур ядерным методом по набору отдельных ориентаций зерен на группе SO(3). *Журн. вычислит. матем. и матем. физ.* 2010. Т. 50. № 5. С. 949.
 23. *Coay C.G.* A simple scheme for generating nearly uniform distribution of antipodally symmetric points on the unit sphere. *J. Comput. Sci.* 2011. V. 2. P. 88.
 24. *Айвазян С.А.* Прикладная статистика и основы эконометрики. М.: ЮНИТИ-ДАТА, 2001. С. 656.
 25. *Press W.H., Teukolsky S.A., Vetterling W.T., Flannery B.P.* Numerical Recipes: the Art of Scientific Computing 3rd Edition. Cambridge University Press, 2007. P. 1235.
 26. *Tonga V., Jianga J., Wilkinsonb A.J., Brittona T.B.* The effect of pattern overlap on the accuracy of high resolution electron backscatter diffraction measurements. *Ultramicroscopy*. 2015. V. 155. P. 62.
 27. *Lin H.P., Ng T.S., Chen C.L., Kuo J.C., Ding S.X.* Comparison of deformation texture in FePd alloy via X-ray diffraction and electron backscatter diffraction techniques. *Micron*. 2013. V. 44. P. 433.

Vestnik Natsional'nogo issledovatel'skogo yadernogo universiteta "MIFI", 2020, vol. 9, no. 1, pp. 58–65

Verification of the Reconstruction of Pole Figures from Electron Backscatter Diffraction Measurements Performed under Variation of Experimental Parameters

A. O. Ovchinnikova^{a,#} and T. I. Savyolova^a

^a National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, 115409 Russia

[#]e-mail: aoantonova@mail.ru

Received November 16, 2019; revised December 10, 2019; accepted December 18, 2019

Abstract—The adequacy of the reconstruction of pole figures (PFs) from the results of the electron backscatter diffraction (EBSD) experiment has been verified using a new technique for estimating the similarity of two PFs. This method is based on an analog of the Kolmogorov–Smirnov criterion on the S_2 sphere and takes into account the probabilistic nature of PFs. This method also proposes a quantitative similarity measure for the compared PFs. In this study, this method is utilized to quantitatively compare the PF reconstructed from the results of the EBSD experiment to the PF of a polycrystalline sample in order to estimate the effect of the selected values of the EBSD experiment parameters on the underlying distribution. Such a comparison becomes possible by mathematical modeling of a polycrystalline sample and a subsequent EBSD experiment. A new similarity measure between the sample PF and the PF obtained from the result of model EBSD measurements under the variation of the experimental parameters, namely, the scanning step and tolerance angle, has been calculated. The results have been compared to similar results for the *RP* factor widely used to estimate the differences between two PFs. Both metrics are utilized to study the effect of the texture sharpness parameter of the polycrystalline sample on the results of the EBSD experiment with various scanning steps and tolerance angles.

Keywords: EBSD, scanning step, tolerance angle, polycrystall, mathematical modelling, pole figures, *RP*-factor, Kolmogorov–Smirnov test, quantitative texture analysis

DOI: 10.1134/S2304487X2001006X

REFERENCES

1. Wright S.I., Field D.P. Scalar of Texture Heterogeneity. *Materials Science Forum*, 2005, vol. 495–7, pp. 207–212.
2. Wright S.I. A Parametric Study of Electron Backscatter Diffraction based Grain Size Measurements. *Practical Metallography*, 2010, vol. 47, no. 1, pp. 16–33.
3. Mironov S.Yu., Danilenko V.N., Myshlyaev M.M., Korneva A.V. Analysis of the Spatial Orientation Distribution of Building Blocks in Polycrystals as Determined Using Transmission Electron Microscopy and a Backscattered Electron Beam in a Scanning Electron Microscope, 2005, *Physics of the Solid State*, vol. 47, №7, pp. 1258–1266.
4. Tonga V., Jianga J., Wilkinson A.J., Britton T.B. The effect of pattern overlap on the accuracy of high resolution electron backscatter diffraction measurements. *Ultramicroscopy*, 2015, vol. 155, pp. 62–73.
5. Randle V. Introduction to texture analysis: macrotexture, microtexture and orientation mapping: 2nd ed. Boca Raton: CRC Press, 2010. 488 p.
6. Humphreys F.J. Grain and subgrain characterisation by electron backscatter diffraction, *Journal of materials science*, 2001, vol. 36, pp. 3833–54.
7. Antonova A.O., Savyolova T.I. Error Estimation for Computed Polycrystalline Texture Characteristics by Varying Measurement Parameters in Electron Microscopy Methods. *Comput. Math. Math. Phys.*, 2015, vol. 55, № 2, pp. 317–329.
8. Antonova A.O., Savyolova T.I. Study of the Influence of the Parameters of an Experiment on the Simulation of Pole Figures of Polycrystalline Materials Using Electron Microscopy. *Crystallogr. Rep.*, 2016, vol. 61, № 3, pp. 523–531.
9. Ovchinnikova A.O., Savyolova T.I. A novel approach of the grain structure modelling in the framework of polycrystalline specimen and EBSD experiment simulation. *IOP Conf. Series: Journal of Physics: Conf. Series*, 2019, vol. 1205, no. 012043.
10. Viglin S.A. Kolichestvennaya mera tekstury polikristallicheskogo materiala. Teksturnaya funkciya [A quantitative measure of the texture of a polycrystalline material. Texture function]. *Fizika tvjordogo tela*, 1960, vol. 2, № 10, pp. 2463–2476.
11. Bunge H.J. Experimental Techniques of Texture Analysis. Experimental Techniques of Texture Analysis: ed. by Bunge H.J. *DGM Informationsgesellschaft mbH*, 1986, pp. 1–28.
12. Welch P.I. Neutron Diffraction Texture Analysis. Experimental Techniques of Texture Analysis: ed. by Bunge H.J. *DGM Informationsgesellschaft mbH*, 1986, pp. 183–207.
13. Bunge H.J., Grossterlinden R., Haase A., Ortega R., Szpunar J.A., Van Houtte P. Advanced Experimental Techniques in X-ray Texture Analysis. *Materials Science Forum*, 1994, vol. 157, pp. 71–96.
14. Matthies S., Wenk H.-R., Vinel G.W. Some Basic Concepts of Texture Analysis and Comparison of Three Methods to Calculate Orientation Distributions from Pole Figures. *Journal of Applied Crystallography*, 1988, vol. 21, pp. 285–304.
15. Lychagina T., Nikolayev D. Quantitative comparison of measured crystallographic texture *Journal of Applied Crystallography*, 2016, vol. 49, pp. 1290–1309.
16. Kolmogoroff A.N. Sulla determinazione empirica di una legge di distribuzione. *G. Inst. Ital. Attuari.*, 1933, vol. 4, pp. 83.
17. Smirnov N.V. On the estimation of the discrepancy between empirical curves of distributions for two independent samples. *Moscow State Univ. Bull.*, 1939, vol. 2, pp. 3–14.
18. HKL CHANNEL 5 Software. Available at: [<https://www.oxinst.com/>].
19. Savyolova T.I., Ivanova T.M. and Sypchenko M.V. *Metody resheniya nekorrektnykh zadach teksturnogo analiza i ih prilozheniya* [Methods for Solving Ill-Posed Problems in Texture Analysis and Their Applications]. Moscow, NRNU MEPhI, 2012. 268 p.

20. Borovkov M., Savelova T. The computational approaches to calculate normal distributions on the rotation group, *Mag. Appl. Crystallogr.*, 2007, vol. 40, pp. 449–455.
21. Bunge H.J. *Texture Analysis in Material Sciences. Mathematical Methods.* London, Butterworths Publ., 1982. 593 p.
22. Roginskii K.N., Savyolova T.I. Polar figure computation by a kernel method from a set of individual grain orientations on SO(3). *Comput. Math. and Math. Phys.*, 2010, vol. 50, pp. 949.
23. Koay C.G. A simple scheme for generating nearly uniform distribution of antipodally symmetric points on the unit sphere. *J. Comput. Sci.*, 2011, vol. 2, pp. 88–91.
24. Aivazyan S.A., Mhitaryan V.S. *Prikladnaya statistika. Osnovy ekonometriki. Tom 1: Teoriya veroyatnosti i prikladnaya statistika* [Applied statistics. Fundamentals of Econometrics, Vol. 1: Probability theory and applied statistics]. Moscow, Unity Data, 2001. 656 p.
25. Press W.H., Teukolsky S.A., Vetterling W.T., Flannery B.P. *Numerical Recipes: the Art of Scientific Computing* 3rd Edition. Cambridge University Press, 2007. 1235 p.
26. Tonga V., Jianga J., Wilkinsonb A.J., Brittona T.B. The effect of pattern overlap on the accuracy of high resolution electron backscatter diffraction measurements. *Ultramicroscopy*, 2015, vol. 155, pp. 62–73.
27. Lin H.P., Ng T.S., Chen C.L., Kuo J.C., Ding S.X. Comparison of deformation texture in FePd alloy via X-ray diffraction and electron backscatter diffraction techniques. *Micron*, 2013, vol. 44, pp. 433–441.