

ПРИБОРОСТРОЕНИЕ, МЕТРОЛОГИЯ И ИНФОРМАЦИОННО-ИЗМЕРИТЕЛЬНЫЕ ПРИБОРЫ И СИСТЕМЫ

УДК 548.735.6

DOI: 10.22213/2410-9304-2022-3-4-11

Выбор параметра рассеяния текстурных компонент поликристаллических материалов при кластеризации в пространстве Родрига

С. М. Мокрова, Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск, Россия
В. Н. Милич, кандидат технических наук, Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН,
Ижевск, Россия

В статье рассматривается задача выбора значения максимального рассеяния кластера при формировании текстурных компонент в пространстве Родрига для представления результатов текстурного анализа. Анализ текстуры выполняется по прямой полюсной фигуре. В пространстве Родрига формируется облако ориентаций путем вычисления для каждой найденной ориентации соответствующего вектора Родрига. Текстурные компоненты, описывающие текстуру, формируются путем кластеризации максиминным алгоритмом. Условием окончания работы алгоритма является достижение заданного значения максимального рассеяния в кластере. Если количество текстурных компонент известно, можно задать количество кластеров. В этом случае максимальное рассеяние в кластерах будет определено автоматически. Алгоритм дает возможность получить представление текстуры с нужной детальностью, необходимой для поставленной задачи. Использование пространства Родрига для формирования текстурных компонент позволяет визуализировать результаты анализа текстуры. В статье приведены основные выражения для операций над векторами Родрига. Представлено вычисление среднего вектора Родрига в кластере.

Приведен алгоритм, позволяющий сравнивать результаты анализа текстуры, полученные по двум полюсным фигурам, снятым для одного образца. Сопоставление производится вычислением расстояний между средними векторами Родрига кластеров двух полюсных фигур для разных значений параметра рассеяния. Выбирается такое представление текстуры, при котором достигается наилучшее совпадение текстурных компонент, полученных по двум полюсным фигурам.

Представлен пример анализа текстуры алюминиевой ленты. Показано, что при формировании восьми текстурных компонент с максимальным рассеянием кластеров $11,3^\circ$ по полюсной фигуре семейства $\{111\}$ и шести текстурных компонент с максимальным рассеянием кластеров $10,15^\circ$ по полюсной фигуре $\{200\}$ их совпадение составляет 85 %.

Ключевые слова: текстура материала, ориентация кристалла, вектор Родрига, пространство Родрига, текстурные компоненты, параметр рассеяния кластера.

Введение

В настоящее время при производстве различных изделий широкое распространение получили поликристаллические материалы. Свойства изделий, созданных из них, в значительной степени определяются анизотропией свойств материала. От анизотропии зависят многие физико-механические свойства материала, такие как электрическая проводимость, магнитная восприимчивость, теплопроводность и др. [1].

Величина и характер анизотропии зависят от наличия в поликристаллическом материале преимущественных кристаллографических ориентаций кристаллитов (текстуры) и кристаллических свойств самого материала. Под текстурой понимается закономерное распределение пре-

имущественных ориентаций кристаллитов (зерен) в материале относительно внешней системы координат, обычно связанной с основными направлениями обработки материала [2].

Металлы и их сплавы также имеют поликристаллическую структуру. Производство изделий из металла весьма трудоемкое и включает в себя несколько этапов обработки материала. Текстура в материале может быть сформирована при различных технологических процессах, таких как кристаллизация, деформация и отжиг [3]. На каждом этапе формируется новая текстура, которая может значительно отличаться от предыдущей [4].

Текстура кристаллизации (или роста) формируется при создании определенных условий при

отливке слитков. Для получения заданной текстуры во время кристаллизации производится направленный отвод тепла. Текстура деформации возникает в образце, когда образец подвергается механическому давлению [5]: прессованию, прокату, волочению и др. При этом происходит разворот хаотично расположенных зерен материала вдоль осей максимальной деформации. В результате, в образце появляются преимущественные ориентации кристаллитов и возникает более упорядоченная текстура. При этом в металле образуются области внутреннего напряжения, которые приводят к изменению свойств металлов [6]. Текстуры металлов, которые формируются при отжиге, зависят от текстуры деформации, температуры и продолжительности отжига, скорости нагрева металла. Часто текстура рекристаллизации, получаемая при отжиге, значительно отличается от текстуры деформации, что позволяет получать материал с сильной анизотропией [7, 8].

Таким образом, на каждом этапе технологической обработки металлов и сплавов важно располагать методами оперативного текстурного анализа для подбора параметров обработки материалов с целью получения необходимых свойств изделий. Поэтому задача анализа текстур имеет большое практическое значение. Причем описание текстуры материала должно быть представлено в подходящем формате и с необходимой детальностью. Цель настоящей работы – разработка метода формирования и детального описания текстурных компонент поликристаллических материалов в пространстве Родрига с наилучшим показателем максимального рассеяния кластеров.

Используемые подходы, материалы и методы

Ориентация кристалла может быть описана поворотом системы координат образца до совмещения с системой координат кристалла или обратным поворотом [9]. Таким образом, ориентация кристалла g может быть описана с помощью углов Эйлера, матриц вращения, векторов «ось-угол», кватернионов и векторов Родрига [10]. Нужно отметить, что при необходимости можно перевести представление ориентации из одного представления в другой. Также каждой ориентации приписана весовая функция – интенсивность, которая определяется объемом кристаллов в образце, ориентированных подобным образом.

В настоящей работе для описания текстуры было выбрано трехмерное пространство Родрига, т. к. в нем можно представить текстуру визу-

ально и провести необходимые расчеты для вычисления преимущественных ориентаций.

Облако ориентаций в пространстве Родрига формируется следующим образом. Каждой ориентации ставится в соответствие вектор Родрига [11]:

$$\vec{R} = \vec{n} * \tan\left(\frac{\theta}{2}\right), \quad (1)$$

где n – ось, вокруг которой на угол θ поворачивается система координат кристалла до совпадения с выбранной системой координат образца.

Вычисление вектора R_C , представляющего результирующее вращение после двух последовательных поворотов кристалла, обозначенных соответственно R_A , R_B , производится по формуле

$$R_C = (R_A; R_B) = \frac{R_A + R_B - R_A \times R_B}{1 - R_A \cdot R_B}. \quad (2)$$

Мерой расстояния в пространстве Родрига является угол между двумя векторами Родрига, который вычисляется с использованием формулы (2), где второй вектор берется с обратным знаком:

$$\theta = 2 \cdot \arctg\left(\left|\frac{R_A - R_B + R_A \times R_B}{1 + R_A \cdot R_B}\right|\right). \quad (3)$$

Стандартной формулой для определения средней ориентации g_{mean} множества ориентаций g_i , $i \in \{1, 2, \dots, n\}$, является выражение [12]:

$$g_{mean} = \frac{\sum_{i=1}^n g_i}{\left|\sum_{i=1}^n g_i\right|}. \quad (4)$$

Средняя ориентация кластера должна удовлетворять условию

$$\sum_{i=1}^n \theta_d(g_{mean}, g_i)^2 \rightarrow \min, \quad (5)$$

где $\theta_d(\bullet_1, \bullet_2)$ – угол разориентации между \bullet_1 и \bullet_2 , т. е. сумма квадратов расстояний между средней и всеми другими ориентациями в кластере должна быть минимальной. Для этой цели лучше всего подходит представление ориентации кватернионами [13, 14]:

$$q = \left[\cos\left(\frac{\theta}{2}\right), n_1 \cdot \sin\left(\frac{\theta}{2}\right), n_2 \cdot \sin\left(\frac{\theta}{2}\right), n_3 \cdot \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \right],$$

где n_1, n_2, n_3 – координаты оси.

Средний кватернион вычисляется с учетом весов (интенсивностей) ориентаций, затем он нормируется.

$$q_s = \frac{\sum q_i \cdot v_i}{\sum v_i}, \quad q_{mean} = \frac{q_s}{|q_s|}. \quad (6)$$

Из среднего кватерниона определяется средний вектор Родрига

$$\theta_{mean} = 2 \cdot \arccos\left(\frac{q_{mean}^0}{2}\right),$$

$$\bar{R}_{mean} = \left[\frac{q_{mean}^1}{\sin(\theta_{mean}/2)}, \frac{q_{mean}^2}{\sin(\theta_{mean}/2)}, \frac{q_{mean}^3}{\sin(\theta_{mean}/2)} \right]. \quad (7)$$

В работе [15] представлен алгоритм анализа текстуры, где исследование текстуры материала производится по одной прямой полюсной фигуре (ППФ). Анализ текстуры с использованием прямых полюсных фигур является наиболее распространенным способом. Прямая полюсная фигура (ППФ) – это гномостереографическая проекция определенной совокупности кристаллографических плоскостей $\{hkl\}$ на выбранную внешнюю плоскость для всех кристаллитов данного поликристалла. Индексы Миллера $\{hkl\}$ соответствуют отрезкам, которые отсекает выбранная плоскость на осях системы координат кристалла.

Обычно для одного образца на дифрактометре производится съемка 3–5 ППФ для разных плоскостей отражения $\{hkl\}$. Положение точек полюсной фигуры определяется углами α и β , где α изменяется от 0° до $60\text{--}80^\circ$, а β от 0° до 360° с шагом 5° . Каждая точка соответствует

значению интенсивности полюсов $\{hkl\}$. Прямая полюсная фигура дает наглядное представление об ориентациях кристаллитов в исследуемом материале.

В результате работы программы формируется облако ориентаций в пространстве Родрига. Для формирования текстурных компонент в пространстве Родрига необходимо произвести кластеризацию, т. е. все найденные ориентации подразделить на группы (кластеры), каждая из которых соответствует одной текстурной компоненте. Для кластеризации используется максимальный алгоритм, что позволяет выявить близкие ориентации и объединить их в текстурные компоненты [16].

Выбор параметров кластеризации

Обычно текстура материала описывается некоторым набором преимущественных текстурных компонент (зерен), составляющих значительную долю объема материала (рис. 1). Текстурные компоненты, формирующиеся путем кластеризации пространства Родрига, состоят из множества близких ориентаций с небольшим углом разориентации между ними и представлены тремя основными параметрами – средней ориентацией, долей текстурной компоненты в объеме образца и ее рассеянием. Под рассеянием текстурной компоненты понимается максимальное расстояние, выраженное в градусах, между средней ориентацией кластера и наиболее удаленной ориентацией.

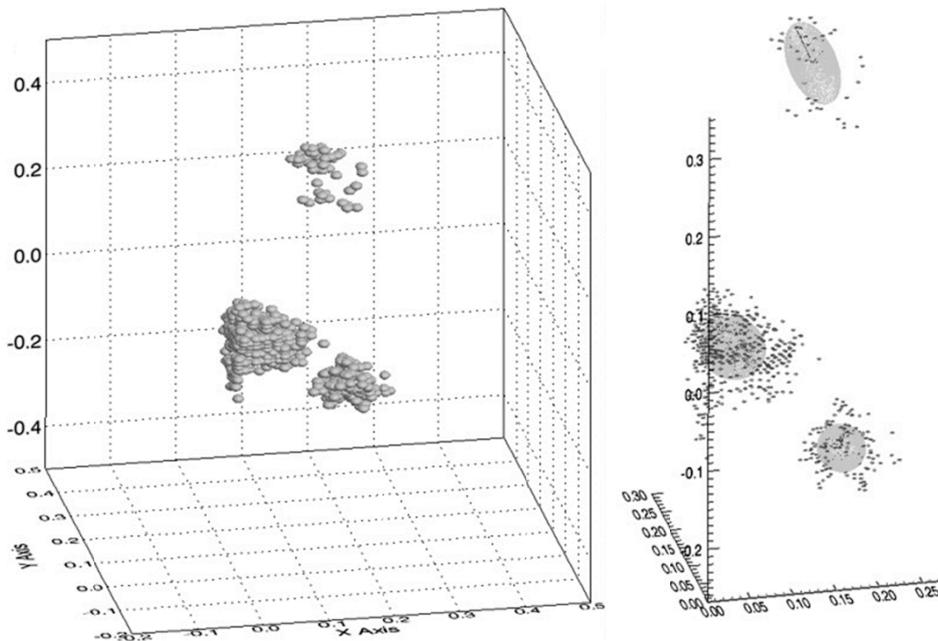


Рис. 1. Параметры кластеризации: а – облако ориентаций в пространстве Родрига; б – текстурные компоненты

Fig. 1. Clustering Options: a) a cloud of the orientations in the Rodrigues space; b) the textural components

Точность анализа текстуры определяется параметром, задающим максимальное рассеяние в кластере при процедуре кластеризации в пространстве Родрига. Понятно, что при больших значениях параметра облако ориентаций разделится на небольшое количество кластеров, а при маленьких значениях параметра сформируется много текстурных компонент. В случае когда число текстурных компонент в образце известно, задается необходимое количество кластеров, а максимальное значение рассеяния кластера вычисляется автоматически. Таким образом, анализировать текстуру можно с различной точностью, в зависимости от поставленной задачи.

Однако не всегда есть возможность точно выбрать значение параметра максимального рассеяния текстурной компоненты или оценить число текстурных компонент. Это зависит от общего объема облака ориентаций и его формы.

В случае острой текстуры текстурные компоненты в пространстве Родрига обособлены друг от друга. Под острой текстурой понимается наличие в материале небольшого количества непересекающихся преимущественных ориентаций с незначительной степенью рассеяния. Возможность отображать облако ориентаций в трехмерном пространстве Родрига позволяет визуально оценить остроту текстуры и задать количество кластеров, каждый из которых представляет текстурную компоненту.

В случае слабой текстуры, когда кластеры в пространстве Родрига явно не отделены, сложно определить правильное количество текстурных компонент. Но и в этом случае в нем можно выделить группы близких ориентаций, имеющие большие веса, которые сформируют преимущест-

венные текстурные компоненты в материале. Чтобы выбрать количество текстурных компонент, наиболее точно описывающих текстуру материала, рекомендуется несколько раз провести процедуру кластеризации пространства Родрига, задавая на каждой итерации значение максимального рассеяния в кластере с некоторым шагом.

В результате этого получится несколько вариантов разбивки облака ориентаций на кластеры, которые будут отличаться количеством кластеров, рассеянием и другими параметрами. Количество кластеров зависит от заданного значения максимального угла рассеяния кластера, выбор которого позволяет получить либо крупные основные текстурные компоненты, либо более детальное описание текстуры. Таким образом, изменяя значение параметра рассеяния кластера можно задавать точность анализа текстуры. Сопоставив заданное значение максимального рассеяния с полученным числом кластеров и оценив другие параметры кластеризации, можно выбрать наилучший вариант описания текстуры материала.

На рис. 2 показано, как заданное значение параметра рассеяния кластера влияет на полученное в результате количество текстурных компонент. Приведена ППФ $\{111\}$ с наложенными на нее четырехугольниками, схематически изображающими текстурные компоненты, углы которых показывают положение полюсов ориентации.

При заданном рассеянии $8,0^\circ$ получилось 18 мелких кластеров с максимальным рассеянием в одном из них $7,9^\circ$. При заданном значении рассеяния $13,0^\circ$ сформировано уже только 4 крупных кластера с максимальным рассеянием $12,875^\circ$.

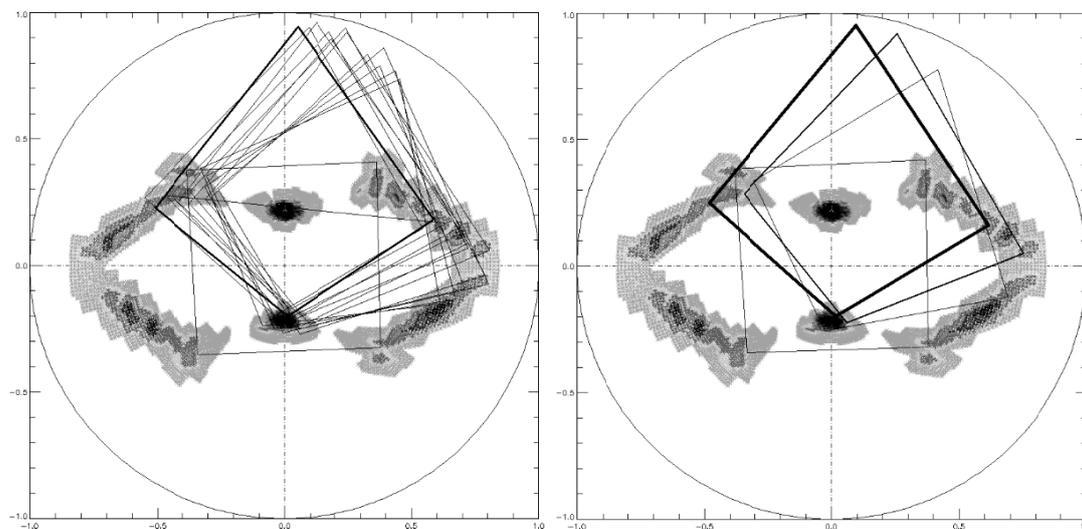


Рис. 2. Взаимосвязь выбранного параметра рассеяния с количеством кластеров

Fig. 2. The relationship between the chosen scattering parameter and the number of clusters

Предложенный алгоритм позволяет провести анализ текстуры по одной ППФ. Чаще всего используется ППФ семейства $\{111\}$, поскольку отраженные рентгеновские лучи во время съемки данной ППФ имеют наибольшую интенсивность. В результате работы алгоритма (для каждого заданного значения максимального рассеяния в кластере) формируется набор кластеров (текстурных компонент) с вычисленными для них параметрами. При наличии нескольких ППФ, снятых для одного образца, можно провести сравнительный анализ результатов расчета текстуры по двум ППФ, вычислив расстояния между соответствующими средними векторами текстурных компонент. Сравнивая попарно все варианты кластеризации для двух ППФ, можно найти вариант, когда сформированные текстурные компоненты близки.

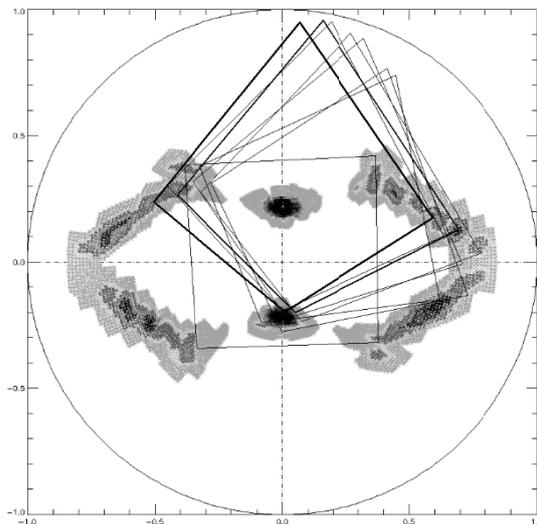


Рис. 3. ППФ $\{111\}$ и пространство Родрига с преимущественными текстурными компонентами

Fig. 3. PPF $\{111\}$ and the Rodrigues space with preferred textural components

Для результатов анализа ППФ 200 также получено несколько вариантов разбивки облака ориентаций на кластеры (рис. 4). При минимальном и максимальном значении рассеяния получилось 16 и 2 кластера соответственно.

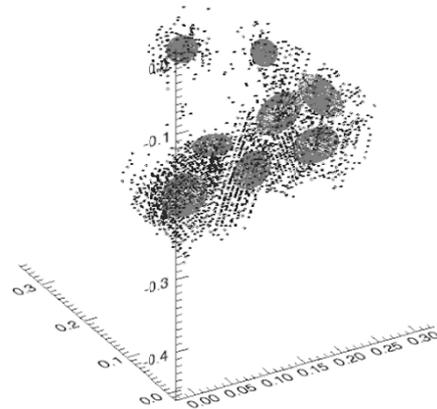
Сравнение производится между всеми наборами кластеров для каждого угла рассеяния по вычисленному среднему вектору Родрига в каждом кластере. Если угол между средними вектора Родрига кластерами составляет не более 4° , то такие текстурные компоненты считаются близкими.

Выявлено, что максимальное соответствие достигается при формировании 8 кластеров по результатам анализа ППФ $\{111\}$ и 6 кластеров

Анализ результатов

Для примера приведем анализ реальных данных по ППФ $\{111\}$ и ППФ $\{200\}$ для образца алюминиевой ленты, полученной из высокочистого алюминия холодной прокаткой с высокой степенью обжатия (рис. 3) [17].

По каждой ППФ был проведен анализ, определены ориентации, присутствующие в образце и отраженные на ППФ. По ним построены два пространства Родрига для формирования текстурных компонент путем проведения процедуры кластеризации. При процедуре кластеризации заданные значения максимального рассеяния в кластере изменялись от 8° до 20° с шагом $0,5^\circ$. Получено, что для плоскостей отражения $\{111\}$ при минимальном значении рассеяния определено 18 текстурных компонент, при минимальном значении – 3.



по ППФ $\{200\}$. В этом случае максимальное рассеяние в наибольшем кластере ППФ $\{111\}$ составляет $11,309^\circ$ при заданных значениях рассеяния $11,5^\circ$, 12° или $12,5^\circ$. Для ППФ $\{200\}$ максимальное рассеяние в кластере составит $10,146^\circ$ при заданном значении $10,5^\circ$. При таком разделении совпадение двух ППФ составляет примерно 85 %.

На рис. 3 и 4 показаны восемь преимущественных ориентаций для ППФ $\{111\}$ и шесть преимущественных ориентаций, определенных по данным ППФ $\{200\}$. В таблице приведены основные количественные характеристики текстурных компонент для исходных ППФ.

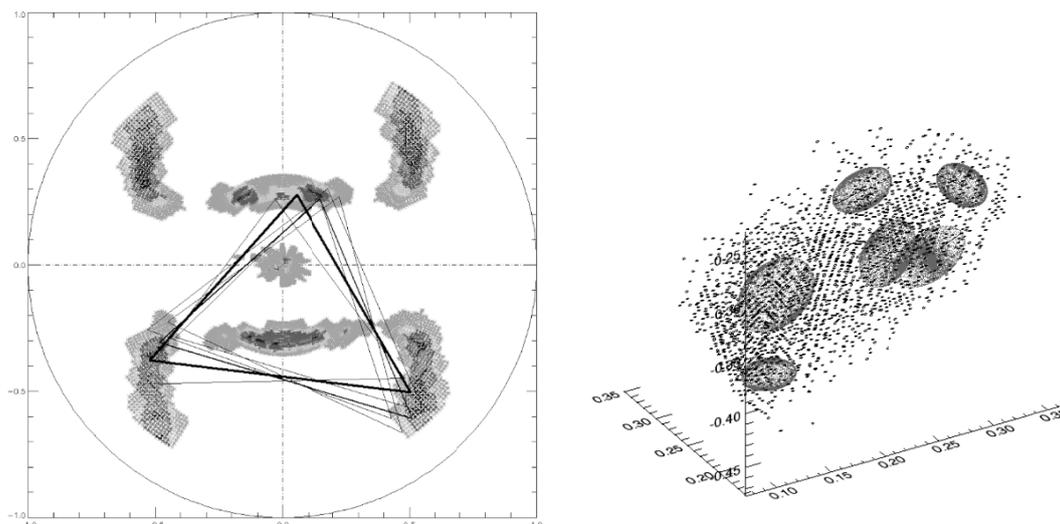


Рис. 4. ППФ {200} и пространство Родрига с преимущественными текстурными компонентами

Fig. 4. PPF {200} and the Rodrigues space with preferred textural components

Соответствующие текстурные компоненты ППФ {111} и ППФ {200}

Corresponding textural components of the DPF {111} and DPF {200}

ППФ {111}				ППФ {200}			
Доля, %	Вектор Родрига	Углы Эйлера	Индексы Миллера	Доля, %	Вектор Родрига	Углы Эйлера	Индексы Миллера
40,96	0,152	32,51	{348}	51,48	0,158	31,80	{348}
	0,273	8,17	<433>		0,259	11,18	<433>
	-0,383	309,92			-0,369	308,28	
9,15	0,238	33,34	{123}	6,48	0,221	34,18	{123}
	0,197	35,94	<523>		0,229	28,64	<634>
	-0,256	295,34			-0,274	300,72	
18,68	0,225	34,69	{247}	23,98	0,236	33,70	{258}
	0,243	23,49	<322>		0,215	29,41	<322>
	-0,352	297,76			-0,329	294,20	
12,82	0,279	35,39	{146}	6,36	0,302	38,86	{134}
	0,183	39,79	<211>		0,208	39,73	<734>
	-0,305	286,30			-0,280	288,90	

Выводы

Использование пространства Родрига позволяет визуально отобразить результаты текстурного анализа, формировать в нем текстурные компоненты с необходимой детальностью путем изменения значения параметра рассеяния кластера. Детальность представления характеризуется количеством текстурных компонент и такими их параметрами, как средняя ориентация кластера, доля текстурной компоненты в объеме образца и значение ее рассеяния.

Предлагаемый в статье метод формирования и детального описания текстурных компонент поликристаллических материалов основан на согласовании заданного значения максимального рассеяния кластеров с получаемым числом кластеров, что обусловлено требованиями к по-

лучаемому материалу. Например, описание текстуры позволяет подобрать такое значение рассеяния, чтобы выделились крупные текстурные компоненты и их суммарная доля составляла от 70 % объема образца. По результатам оценки этих характеристик и оценки других параметров кластеризации можно выбрать наилучший вариант описания текстуры материала для уточнения технологических режимов кристаллизации, деформации и отжига исследуемых материалов.

Прямые полюсные фигуры с другими индексами Миллера, снятые для одного образца, можно использовать не только для обоснования выбора количества текстурных компонент в пространстве Родрига, но и для дополнительного контроля полученных результатов текстурного анализа.

Библиографические ссылки

1. Адамеску Р. А., Гельд П. В., Митюшов Е. А. Анизотропия физических свойств металлов. М. : Металлургия, 1985. 136 с.
2. Бородинкина М. М., Спектор Э. Н. Рентгенографический анализ текстуры в металлах и сплавах. М. : Металлургия, 1982. 272 с.
3. Гречников Ф. В., Арышенский В. Ю., Ерисов Я. А. Проектирование оптимальной кристаллографии структуры конструкционных материалов // Известия Самарского научного центра РАН. 2018. Т. 20, № 4. С. 5–12.
4. Взаимосвязь текстур деформации и рекристаллизации в технически чистом алюминии / М. А. Зорина, С. В. Данилов, Г. М. Русаков, М. Л. Лобанов // Вестник ЮУрГУ. Серия «Металлургия». 2017. Т. 17, № 3. С. 73–81. DOI: 10.14529/met170309.
5. Мельников К. Е., Серебряный В. Н. Методика моделирования текстур деформации материалов с различными типами структур // Зав. лаб. 2007. Т. 73, № 3. С. 39–42.
6. Влияние горячей прокатки на анизотропию механических свойств алюминиевого сплава 6061 / С. В. Данилов, П. Л. Резник, М. Л. Лобанов и др. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Металлургия». 2017. Т. 17, № 1. С. 73–80. DOI: 10.14529/met170109.
7. Гервасьева И. В. Использование количественных характеристик текстуры для прогнозирования структурно-ориентационных преобразований при отжиге // Физика металлов и металловедение. 2004. Т. 98, № 3. С. 80–89.
8. Mondal C., Singh A.K., Mukhopadhyay A.K., Chattopadhyay K. Formation of a single, rotated-Brass {110}<556> texture by hot cross-rolling of an Al–Zn–Mg–Cu–Zr alloy // Scripta Materialia. 2011. Vol. 64. P. 446–449. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2010.11.006.
9. Lecomte J.-S., Bunge H.-J. Texture analysis in material science: Mathematical methods. Oxford: Butterworth-Heinemann, 2013, 595p.
10. Neumann P., Heinz A. Representation of orientation and disorientation data for cubic, hexagonal, tetragonal and orthorhombic crystals // Acta Crystallogr. A. USA. 1991. Vol. 47. P. 780–789. DOI: 10.1107/S0108767391006864.
11. Frank F. C. Orientation Mapping // Proc. of the ICOTOM-8 Conference. The Metallurg. Society. 1988. P. 403–408.
12. Humphreys F. J., Bate P. S., Hurley P. J. Orientation averaging of electron backscattered diffraction data Journal of Microscopy 201(Pt 1):50–8, February 2001 DOI:10.1046/j.1365-2818.2001.00777.x.
13. Morawiec, A., Pospiech, J. Some information on quaternions useful in texture calculations // Textures and Microstructure. 1989. Vol. 10, pp. 211–216. DOI:10.1155/TSM.10.211.
14. Алгоритм начальной инициализации кватерниона пространственной ориентации в параметрах Родрига-Гамильтона / М. А. Исаев, А. М. Исаев, Н. В. Кудинов, Р. С. Мироненко // Вестник Донского государственного технического университета. 2018. Т. 18, № 2. С. 238–245. DOI: 10.23947/1992-5980-2018-18-2-238-245.
15. Мокрова С. М., Милич В. Н. Метод расшифровки данных текстурного рентгенодифракционного анализа по одной прямой полюсной фигуре на основе оценки достоверности кристаллографических ориентаций // Химическая физика и мезоскопия. 2018. Т. 20, № 1. С. 151–164.
16. Ту Дж., Гонсалес Р. Принципы распознавания образов. М. : Мир, 1978. 412 с.
17. Текстурные преобразования при отжиге алюминиевых фольг. 1. Сильные текстурные компоненты / Д. Б. Титоров, В. А. Волков, В. П. Лебедев и др. // ФММ. 2006. Т. 102, № 1. С. 1–7. DOI: 10.1134/S0031918X06070118.

References

1. Adamesku R.A., Gel'd P.V., Mityushov E.A. Anizotropiya fizicheskikh svoystv metallov [Anisotropy of physical properties of metals]. Moscow, Metallurgy Publ., 1985, 136 p. (in Russ.).
2. Borodkina M.M., Spektor. E.N. Rentgenograficheskij analiz tekstury v metallah i splavah. [X-Ray Analysis of Texture in Metals and Alloys.] Moscow, Metallurgy Publ., 1982, 272 p. (in Russ.).
3. Grechnikov F.V., Aryshensky V.Yu., Erisov Ya.A. [Designing of optimal structure crystallography of engineering materials]. Proc. of the Samara Scientific Center of the RAS, 2018, Vol. 20. Issue 4. pp. 5–12. (in Russ.).
4. Zorina M.A., Danilov S.V., Rusakov G.M., Lobanov M.L. [Relationship between deformation and recrystallization textures in commercially pure aluminium]. Vestnik YuUrGU. Seriya «Metallurgiya», 2017, Vol. 17, № 3. pp. 73–81. (in Russ.).
5. Mel'nikov K.E., Serebryanyj V.N. [Methodology for modeling the deformation textures of materials with different types of structures]. Zavodskaya laboratoriya, 2007, vol. 73, № 3, pp. 39–42. (in Russ.).
6. Danilov S.V., Reznik P.L., Lobanov M.L. et al. [Influence of hot rolling on mechanical properties anisotropy of 6061 aluminum alloy]. Vestnik YuUrGU. Seriya «Metallurgiya», 2017, Vol. 17, № 1, pp. 73–80. DOI: 10.14529/met170109. (in Russ.).
7. Gervas'eva I.V. [Using quantitative texture characteristics to predict structural and orientation transformations during annealing]. The physics of metals and metallography, 2004, vol. 98, №3, pp. 80–89. (in Russ.).
8. Mondal C., Singh A.K., Mukhopadhyay A.K., Chattopadhyay K. Formation of a single, rotated-Brass {110}<556> texture by hot cross-rolling of an Al–Zn–Mg–Cu–Zr alloy // Scripta Materialia. 2011. Vol. 64. P.446–449. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2010.11.006.
9. Lecomte J.-S., Bunge H.-J. Texture analysis in material science: Mathematical methods. Oxford: Butterworth-Heinemann, 2013, 595p.
10. Neumann P., Heinz A. Representation of orientation and disorientation data for cubic, hexagonal, tetragonal and orthorhombic crystals // Acta Crystallogr. A. USA. 1991. Vol. 47. P. 780–789. DOI: 10.1107/S0108767391006864.

11. Frank F. C. Orientation Mapping // Proc. of the ICOTOM-8 Conference. The Metallurg. Society. 1988. P. 403-408.
12. Humphreys F. J., Bate P. S., Hurley P. J. Orientation averaging of electron backscattered diffraction data Journal of Microscopy 201(Pt 1):50-8, February 2001 DOI:10.1046/j.1365-2818.2001.00777.x.
13. Morawiec, A., Pospiech, J. Some information on quaternions useful in texture calculations // Textures and Microstructure. 1989. Vol. 10. pp. 211-216. DOI:10.1155/TSM.10.211.
14. Isaev M.A., Isaev A.M., Kudinov N.V., Mironenko R.S. [The algorithm of initial initialization of the spatial orientation quaternion in the Rodrigue-Hamilton parameters] // *Vestnik Donskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta*, 2018, vol. 18, № 2, pp. 238–245. DOI 10.23947/1992-5980-2018-18-2-238-245 (in Russ.).
15. Mokrova S. M., Milich V. N. [The method for decoding textural x-ray diffraction data using one direct polar figure based on an estimate of the crystallographic orientation reliability]. *Himicheskaya fizika i mezoskopiya*, 2018, Vol. 20, №. 1, pp. 151–164. (in Russ.).
16. Tu. D. Gonzalez R. *Principy raspoznavaniya obrazov* [Principles of pattern recognition]. Moscow, Mir Publ., 1978, 412 p. (in Russ.).
17. Titorov D. B., Volkov V. A., Titorova D. V. et al. [Texture transformations upon annealing of aluminum foils: 1. Strong texture components]. *The physics of metals and metallography*, 2006, Vol. 102, №. 1, pp. 83-89. doi: 10.1134/S0031918X06070118 (in Russ.).

Texture Components Scattering Parameter Selection for Polycrystalline Materials when Clustering Rodrigues Space

S. M. Mokrova, Udmurt Federal Research Center of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Izhevsk, Russia

V. N. Milich, PhD in Engineering, Associate Professor, Udmurt Federal Research Center of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Izhevsk, Russia

The article considers the problem of maximum scattering cluster value selection at texture components formation within Rodrigues space for texture analysis representation. Texture analysis is carried out in terms of direct pole figure. Orientation cloud is being formed within Rodrigues space by calculating Rodrigues vectors for each found orientation. Texture components describing the texture are being formed by maximin algorithm clustering. The algorithm is considered finished when a predetermined value of maximum scattering in a cluster is reached. In this case, maximum scattering in clusters will be determined automatically. The algorithm enables texture presentation with required detail level corresponding to the posed problem. Implementation of Rodrigues space to form texture components enables texture analysis results visualization. The article gives principal expressions for Rodrigues-vector operations. The calculation of mean Rodrigues vector in a cluster is shown.

The algorithm that allows comparison of texture analysis results obtained by two pole figures, taken for one sample. Comparison is carried out by calculation of distances between mean Rodrigues vectors of two pole figure clusters for different scattering parameter values. Texture representation is chosen as the best correspondence of texture components obtained by two pole figures.

An example of aluminum tape texture analysis is presented. It is shown that formation of eight texture components with maximum cluster scattering 11.3° by pole figure of family $\{111\}$ and of six texture components with maximum cluster scattering 10.15° by pole figure $\{200\}$ their correspondence is 85 %.

Keywords: material texture, crystal orientation, Rodrigues vector, Rodrigues space, texture components, cluster scattering parameters.

Получено: 14.06.22