

УДК 548.735.6

DOI: 10.22213/2410-9304-2023-1-23-32

## Сравнительное исследование методов представления результатов текстурного анализа поликристаллических материалов

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

*На всех этапах технологической обработки металлов и сплавов необходимо использовать различные методы текстурного анализа с целью выбора оптимальных параметров обработки материалов и получения необходимых свойств конечных изделий. В статье рассматриваются методы представления результатов текстурного анализа. Обычно текстура материала описывается несколькими преимущественными текстурными компонентами, способ представления которых зависит от поставленной задачи. Текстурные компоненты объединяют ориентации кристаллов, имеющих похожее расположение в объеме образца. Результаты текстурного анализа — это распределение ориентаций относительно базовой системы координат. Ориентация описывается четырьмя параметрами: тремя координатами в пространстве и интенсивностью, которая определяется как вероятность появления этой ориентации в образце. В статье приведены способы представления ориентации отдельного кристалла несколькими дескрипторами: углами Эйлера, индексами Миллера, векторами Родрига и т. д., каждый из которых описывает вращение системы координат кристалла относительно выбранной системы координат образца. Приведены формулы перехода от одного дескриптора к другим. От способа представления ориентаций зависят алгоритмы расчета текстуры. Некоторые представления удобнее использовать для расчетов, другие для визуализации и обработки данных. В частности, использование пространства Родрига позволяет не только визуализировать облако ориентаций, но и сформировать в нем текстурные компоненты с заданной точностью путем кластеризации. Варианты представления результатов анализа показаны на модельном примере. Текстурные компоненты, рассчитанные с высокой точностью, отображены в пространствах углов Эйлера и векторов Родрига. Распределения ориентаций показаны в виде гистограммы и полюсной фигуры семейства  $\{001\}$ .*

**Ключевые слова:** текстура материала, ориентация кристалла, углы Эйлера, матрица вращения, вектор Родрига, индексы Миллера, кватернион.

### Введение

При производстве изделий из поликристаллических материалов на разных этапах их обработки в материале формируется одно или несколько преимущественных ориентаций кристаллов (текстура) [1]. Текстурный анализ позволяет определить наличие текстуры в материале и вычислить ее характеристики. Результаты текстурного анализа должны как можно точнее описывать текстуру и быть понятны специалистам.

Текстуру принято описывать сильными текстурными компонентами, на которые приходится 60–75 % всех ориентаций [2]. Под текстурными компонентами понимаются основные преимущественные ориентации кристаллов в образце. Текстурная компонента объединяет близкие ориентации, т. е. имеющие между собой небольшой угол разориентации. Неярко выраженную (слабую) текстуру могут представлять несколько групп текстурных компонент, равномерно распределенных в объеме образца [3]. Каждая текстурная компонента характеризуется несколькими

параметрами, определяющими текстурную компоненту в целом: координатами средней ориентации в пространстве ориентаций в зависимости от способа представления текстурных компонент, рассеянием и долей текстурной компоненты.

Наиболее часто текстурные компоненты описываются индексами Миллера [4]. В этом случае приводят две-три основные преимущественные ориентации. Такое описание подходит для ярко выраженной (сильной) текстуры, но для слабой текстуры оно должно быть более подробным.

Также для представления текстуры часто используют графические методы: приводят ППФ (прямые полюсные фигуры)  $\{001\}$  [5], гистограммы распределения ориентаций [6] и сечения функции распределения ориентаций (пространство Эйлера), используемые для расчетов.

Известно, что графическое представление значительно облегчает визуальное восприятие информации. При формировании наглядного ориентационного пространства можно оценить,

насколько близко расположены текстурные компоненты в ориентационном пространстве, насколько большое у них рассеяние, нужно ли разделить облако ориентаций на более мелкие текстурные компоненты и т. д. Представление текстуры разными способами позволяет лучше воспринимать и оценивать результаты текстурного анализа. Определенные представления удобно использовать для расчетов, другие для визуализации.

Цель работы – описать возможности (преимущества и недостатки) выбора подходящего описания ориентаций для расчетов и способ представления распределения ориентаций, полученных в результате текстурного анализа.

### Используемые подходы, материалы и методы

Каждая текстурная компонента состоит из некоторого множества отдельных ориентаций, имеющих между собой небольшой угол разориентации. Ориентация определяется вращением кристалла в объеме, которое можно описать различными способами. Для описания ориентации кристалла, необходимо выбрать системы координат: базовую систему координат, привязанную к образцу  $C_S$ , и систему координат кристалла  $C_C$  (рис. 1). Базовая система координат обычно совпадает с важными осями образца. Например, для листа проката выбирают прокатное, поперечное и нормальное направления. Система координат кристалла совмещается с важными осями кристалла. Для кубических кристаллов это оси  $[100]$ ,  $[010]$  и  $[001]$ .

Обычно используется несколько представлений системы координат образца и системы координат кристалла. Образец может иметь одну или несколько плоскостей симметрии. Выбор системы координат кристалла зависит от его симметрии. Например, для кубических кристаллов существует 24 способа расположения системы координат кристалла – это так называемые кристаллографически связанные ориентации [7]. Среди всех этих ориентаций обычно выбирают ту, которая наиболее близка к базовой системе координат, т. е. имеет минимальную разориентацию [8].

Ориентация кристалла определяется как поворот системы координат кристалла относительно системы координат образца. В трехмерном пространстве ориентация описывается тремя независимыми переменными. Существуют разные, но эквивалентные способы представления ориентации (дескрипторы) [9] (рис. 2). Каждый из них может быть более подходящим в отдельных случаях. Но при этом возникает

проблема представления текстурных данных для наглядного восприятия и количественной оценки текстурных компонент. Например, для анализа текстуры в пространстве углов Эйлера необходимо предоставить множество сечений этого пространства [10]. Напрямую трехмерное изображение текстурных компонент индексами Миллера, матрицей вращения, кватернионами невозможно. Ниже приведены формулы для перевода дескриптора в другой либо напрямую, либо через промежуточный дескриптор.

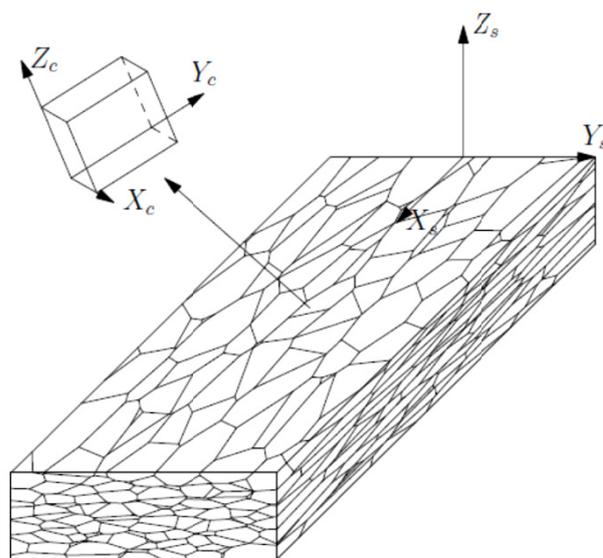


Рис. 1. Системы координат образца и кристалла

Fig. 1. Sample and crystal coordinate systems

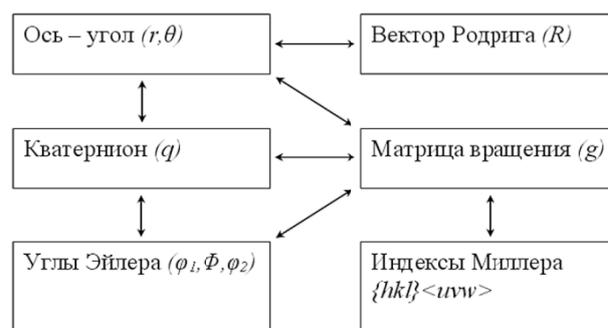


Рис. 2. Дескрипторы ориентации и их преобразования

Fig. 2. Orientation descriptors and their transformations

**Матрица вращения** кристалла  $g$  определяется следующим образом:

$$\begin{pmatrix} X_C \\ Y_C \\ Z_C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} & g_{13} \\ g_{21} & g_{22} & g_{23} \\ g_{31} & g_{32} & g_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_S \\ Y_S \\ Z_S \end{pmatrix}$$

Строки матрицы содержат координаты векторов системы координат кристалла в базовой системе координат, и аналогично столбцы содержат координаты векторов системы координат образца в системе координат кристалла. Поскольку базовая система координат и система координат кристалла ортонормированы, то матрица  $g$  тоже ортонормирована, и для ее определения фактически требуются только три параметра.

Основное преимущество этого дескриптора в том, что он относительно удобен для вычислений вращения (обратное вращение, комбинация вращений и т. д.); его главный недостаток в том, что он содержит девять параметров (элементы матрицы), для вычисления которых требуются только три угла Эйлера.

**Углы Эйлера** описывают ориентацию посредством трех последовательных поворотов вокруг разных осей. Углы определяются в следующих диапазонах:  $\varphi_1 \in [0, 360^\circ]$ ,  $\Phi \in [0, 180^\circ]$  и  $\varphi_2 \in [0, 360^\circ]$ .

Следует отметить, что если  $\Phi = 0$ , то первое и третье вращения совершаются вокруг одной и той же оси  $Z_s$  и, следовательно, угол вращения равен  $(\varphi_1 + \varphi_2)$ . Это так называемое вырождение пространства Эйлера. Точно так же, если  $\Phi = 180^\circ$ , вращение производится на угол  $(\varphi_1 - \varphi_2)$ . В этих случаях принимается  $\varphi_2 = 0^\circ$ .

Для вычисления матрицы вращения по углам Эйлера используются следующие формулы:

$$\begin{aligned} g_{11} &= \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 - \sin \varphi_1 \sin \varphi_2 \cos \varphi \\ g_{12} &= \sin \varphi_1 \cos \varphi_2 + \cos \varphi_1 \sin \varphi_2 \cos \varphi \\ g_{13} &= \sin \varphi_2 \sin \varphi \\ g_{21} &= -\cos \varphi_1 \sin \varphi_2 - \sin \varphi_1 \cos \varphi_2 \cos \varphi \\ g_{22} &= -\sin \varphi_1 \sin \varphi_2 + \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 \cos \varphi \\ g_{23} &= \cos \varphi_2 \sin \varphi \\ g_{31} &= \sin \varphi_1 \sin \varphi \\ g_{32} &= -\cos \varphi_1 \sin \varphi \\ g_{33} &= \cos \varphi \end{aligned}$$

В обратную сторону:

$$\varphi = \arccos(g_{33}),$$

$$\text{если } \begin{cases} \varphi \neq 0^\circ \\ \varphi \neq 180^\circ \end{cases}, \text{ то } \begin{cases} \varphi_1 = \arctan_2(g_{31}, -g_{32}) \\ \varphi_2 = \arctan_2(g_{13}, g_{23}) \end{cases}$$

$$\text{если } \begin{cases} \varphi = 0^\circ \\ \varphi = 180^\circ \end{cases}, \text{ то } \begin{cases} \varphi_1 = \arctan_2(g_{12}, g_{11}) \\ \varphi_2 = 0^\circ \end{cases}$$

Пространство углов Эйлера формирует трехмерное ориентационное пространство Эй-

лера, которое обычно используют для отображения ФРО (функция распределения ориентаций), представляет собой элементарный куб размерностью  $[0...90^\circ, 0...90^\circ, 0...90^\circ]$ . В данном кубе нет однозначного представления ориентации, поскольку одна ориентация в силу симметрии кубического кристалла может быть описана тремя различными наборами углов Эйлера. В литературе обычно приводят несколько сечений ФРО, поскольку ее сложно представить в 3D-пространстве.

В металловедении принято, что положение кристалла в пространстве определяется относительно системы координат образца и описывается двумя векторами [11, 12]. Принимается, что нормаль к плоскости прокатки – это ось  $Z$  кристаллита, а направление прокатки – ось  $X$  кристаллита. Вектора плоскостей отражения выражаются индексами Миллера  $\{hkl\} \langle uvw \rangle$ .

**Индексы Миллера** связаны с отрезками, которые кристаллографическая плоскость отсекает на осях координат (рис. 3). Однако выраженными индексами Миллера текстурные компоненты, полученные в результате анализа текстуры, сложно отобразить визуально.

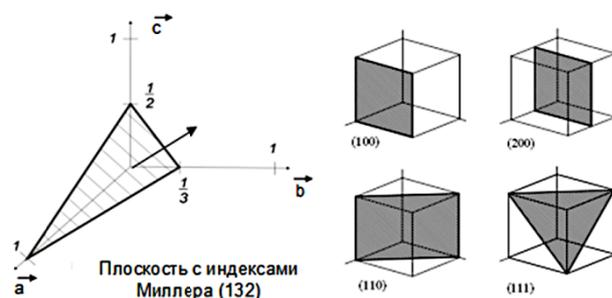


Рис. 3. Индексы Миллера и соответствующие им плоскости отражения

Fig. 3. Miller indices and their corresponding reflection planes

Вычисление матрицы вращения кристалла, для которого известны индексы Миллера, производится по следующей формуле:

$$g = \begin{pmatrix} u/n & (kw - lv)/mn & h/m \\ v/n & (lu - hw)/mn & k/m \\ w/n & (hv - ku)/mn & l/m \end{pmatrix},$$

$$\text{где } \begin{cases} m = \sqrt{h^2 + k^2 + l^2} \\ n = \sqrt{u^2 + v^2 + w^2} \end{cases}$$

Обратное преобразование матрицы вращения в индексы Миллера непросто. Индексы  $\{hkl\}$  и  $\langle uvw \rangle$  получаются из последнего и первого

столбцов матрицы  $g$  соответственно. Они вычисляются путем умножения столбца матрицы на подходящий коэффициент и последующего округления для получения целых чисел. Это приводит к нескольким вариантам выбора пар индексов Миллера  $\{hkl\} \langle uvw \rangle$ , которые, с одной стороны, должны быть как можно более низкими, а с другой стороны, должны описывать ориентацию, максимально приближенную к исходной ориентации. Более того, векторы  $\{hkl\}$  и  $\langle uvw \rangle$  должны быть ортогональными.

Чаще всего значения индексов Миллера выбираются ниже определенного заданного предела по абсолютной величине (обычно выбирается 9). Из всех подходящих наборов  $\{hkl\} \langle uvw \rangle$  выбирается такой, для которого значение выражения  $(1-a)(|h|+|k|+|l|+|u|+|v|+|w|)+a\theta$  –

$$\begin{aligned} g_{11} &= r_1 r_1 (1 - \cos \theta) + \cos \theta & g_{21} &= r_2 r_1 (1 - \cos \theta) - r_3 \sin \theta & g_{31} &= r_3 r_1 (1 - \cos \theta) + r_2 \sin \theta \\ g_{12} &= r_1 r_2 (1 - \cos \theta) + r_3 \sin \theta & g_{22} &= r_2 r_2 (1 - \cos \theta) + \cos \theta & g_{32} &= r_3 r_2 (1 - \cos \theta) - r_1 \sin \theta \\ g_{13} &= r_1 r_3 (1 - \cos \theta) - r_2 \sin \theta & g_{23} &= r_2 r_3 (1 - \cos \theta) + r_1 \sin \theta & g_{33} &= r_3 r_3 (1 - \cos \theta) + \cos \theta \end{aligned}$$

и

$$\theta = \arccos \frac{g_{11} + g_{22} + g_{33} - 1}{2},$$

$$\text{при } \begin{cases} \theta \neq 180^\circ \\ \theta \neq 0^\circ \end{cases} \begin{cases} r_1 = (g_{23} - g_{32}) / (2 \sin \theta) \\ r_2 = (g_{31} - g_{13}) / (2 \sin \theta) \\ r_3 = (g_{12} - g_{21}) / (2 \sin \theta) \end{cases}, \text{ при}$$

$$\theta = 180^\circ \begin{cases} r_1 = \pm \sqrt{(g_{11} + 1) / 2} \\ r_2 = \pm \sqrt{(g_{22} + 1) / 2} \\ r_3 = \pm \sqrt{(g_{33} + 1) / 2} \end{cases}, \text{ при } \theta = 0^\circ \begin{cases} r_1 = 1 \\ r_2 = 0 \\ r_3 = 0 \end{cases}.$$

Это представление позволяет наглядно отобразить пространство ориентаций, но чаще всего этот дескриптор используют для перехода к более удобному способу описания ориентаций – векторам Родрига.

**Вектор Родрига** вычисляется из представления ориентации ось-угол. Ось вращения задает направление вектора  $r$ , а тангенс угла поворота  $\theta$  – его длину [13].

Преобразование параметров ось-угол в вектор Родрига:  $R = r \tan(\theta/2)$ .

В обратную сторону:

$$\begin{aligned} \theta &= 2 \arctan |R| \text{ при } \theta \neq 0^\circ, \\ r &= R / \tan(\theta/2) \text{ при } \theta = 0^\circ \end{aligned} \begin{cases} r_1 = 1 \\ r_2 = 0 \\ r_3 = 0 \end{cases}.$$

минимальное, где  $a = 0,5$  по умолчанию,  $\theta$  – угол разориентации между реальной ориентацией и выбранными для нее индексами Миллера.

По индексам Миллера невозможно сформировать визуальное ориентационное пространство. Исследователь должен иметь определенный опыт, чтобы представить положение кристалла в объеме образца по индексам Миллера.

Из теоремы Эйлера [13] о конечных поворотах известно, что любое положение твердого тела с неподвижной точкой может быть получено из начального положения одним поворотом вокруг некоторой оси  $r$  на некоторый угол  $\theta$ . Угол определяется в интервале  $[0, 180^\circ]$ .

Вычисление матрицы вращения по параметрам ось-угол и наоборот:

Преобразование матрицы вращения в вектор Родрига и наоборот можно легко выполнить через параметры ось-угол.

Множество векторов Родрига формирует трехмерное ориентационное пространство Родрига, где каждая ориентация отображена одной точкой. Такое визуальное представление текстуры позволяет оценить необходимое количество текстурных компонент и провести кластерный анализ для формирования текстурных компонент.

Описание ориентации кватернионами строится из представления ось-угол. Кватернион  $q = (\rho, \lambda, \mu, \nu)$  состоит из скаляра  $\rho$  и вектора  $(\lambda, \mu, \nu)$ . Для описания вращения должно выполняться условие:  $|q| = \sqrt{\rho^2 + \lambda^2 + \mu^2 + \nu^2} = 1$ .

Преобразование параметров ось-угол в кватернион:

$$\begin{cases} \rho = \cos(\theta/2), \\ \lambda = r_1 \sin(\theta/2), \\ \mu = r_2 \sin(\theta/2), \\ \nu = r_3 \sin(\theta/2), \end{cases}$$

и наоборот:

$$\theta = 2 \arccos(\rho) \text{ при } \theta \neq 0^\circ$$

$$\begin{cases} r_1 = \lambda / \sin(\theta/2) \\ r_2 = \mu / \sin(\theta/2) \\ r_3 = \nu / \sin(\theta/2) \end{cases} \text{ при } \theta = 0^\circ \begin{cases} r_1 = 1 \\ r_2 = 0 \\ r_3 = 0 \end{cases}.$$

Преобразование кватерниона в матрицу вращения:

$$\begin{aligned} g_{11} &= \rho^2 + \lambda^2 - \mu^2 - \nu^2 & g_{21} &= 2(\lambda\mu - \rho\nu) & g_{31} &= 2(\lambda\nu + \rho\mu) \\ g_{12} &= 2(\lambda\mu + \rho\nu) & g_{22} &= \rho^2 - \lambda^2 + \mu^2 - \nu^2 & g_{32} &= 2(\mu\nu - \rho\lambda) \\ g_{13} &= 2(\lambda\nu - \rho\mu) & g_{23} &= 2(\mu\nu + \rho\lambda) & g_{33} &= \rho^2 - \lambda^2 - \mu^2 + \nu^2 \end{aligned}$$

и в обратную сторону:  $\rho = \frac{\sqrt{g_{11} + g_{22} + g_{33} + 1}}{2}$ ,

при  $\varphi = 0^\circ$   $\begin{cases} \varphi_1 = 2 \arccos(\rho) \\ \varphi_2 = 0^\circ \end{cases}$ ,

при  $\rho \neq 0$   $\begin{cases} \lambda = (g_{23} - g_{32}) / (4\rho) \\ \mu = (g_{31} - g_{13}) / (4\rho) \\ \nu = (g_{12} - g_{21}) / (4\rho) \end{cases}$ ,

при  $\varphi = 180^\circ$   $\begin{cases} \varphi_1 = 2 \arccos(\lambda) \\ \varphi_2 = 0^\circ \end{cases}$ .

при  $\rho = 0$   $\begin{cases} \lambda = \pm \sqrt{(g_{11} + 1) / 2} \\ \mu = \pm \sqrt{(g_{22} + 1) / 2} \\ \nu = \pm \sqrt{(g_{33} + 1) / 2} \end{cases}$ .

Преобразование кватерниона в углы Эйлера и наоборот:

$$\begin{cases} \rho = \cos(\varphi/2) \cos[(\varphi_1 + \varphi_2)/2] \\ \lambda = \sin(\varphi/2) \cos[(\varphi_2 - \varphi_1)/2] \\ \mu = \sin(\varphi/2) \sin[(\varphi_2 - \varphi_1)/2] \\ \nu = \cos(\varphi/2) \sin[(\varphi_1 + \varphi_2)/2] \end{cases}$$

обратно:

$$\varphi = 2 \arctan_2(\sqrt{\lambda^2 + \mu^2}, \sqrt{\rho^2 + \nu^2}),$$

при  $\begin{cases} \varphi \neq 0^\circ \\ \varphi \neq 180^\circ \end{cases}$   $\begin{cases} \varphi_1 = \arctan_2(\nu, \rho) + \arctan_2(\mu, \lambda) \\ \varphi_2 = \arctan_2(\nu, \rho) - \arctan_2(\mu, \lambda) \end{cases}$ ,

Можно заметить, что кватернионы  $q$  и  $-q$  описывают одну и ту же ориентацию. Обычно используются положительные кватернионы, т. е. такие, у которых первый ненулевой член положительный. Кватернионы удобны для расчетов вращений, значительно сокращают время вычисления. Но поскольку они являются четырехмерным вектором, то их отобразить в трехмерном пространстве невозможно.

Распределение всего множества ориентаций, представляющих текстуру, можно визуализировать в формате полюсной фигуры  $\{001\} \langle 100 \rangle$ , на которой отображаются полюса системы координат кристалла – стереографические проекции нормалей к плоскости прокатки и векторов направления прокатки. Такой переход от семейства анализируемой ППФ к семейству  $\{001\}$  позволяет наглядно показать распределение осей систем координат кристаллов относительно системы координат образца [14]. Таким образом, можно легко представить положение кристаллов в образце. На рис. 4 представлена исходная ППФ семейства  $\{111\}$  и ППФ семейства  $\{001\}$ , полученная в результате анализа текстуры.

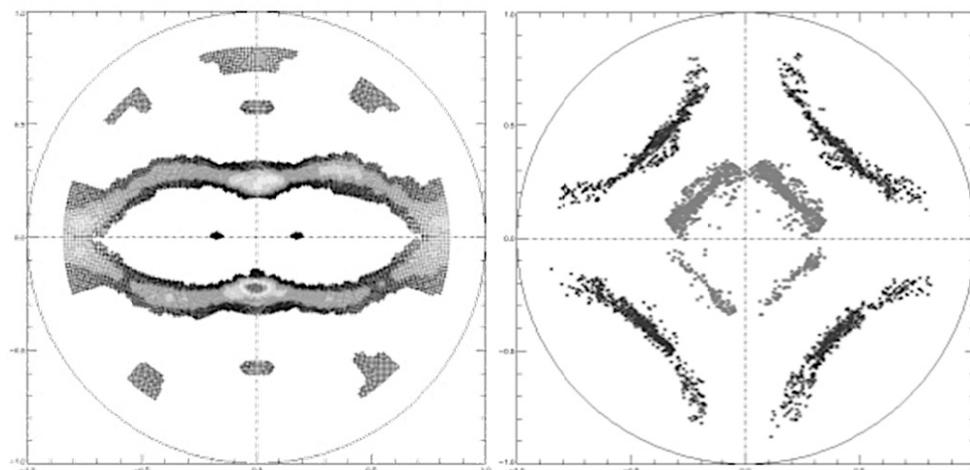


Рис. 4. Полюсные фигуры семейства: а –  $\{111\}$ ; б –  $\{001\}$

Fig. 4. Pole figures of a)  $\{111\}$ ; b)  $\{001\}$

Также для отображения результатов текстурного анализа может быть использован метод гистограмм, позволяющий строить распределение текстурных компонент в процентах относительно общего количества найденных ориентаций. В данном представлении не учитывается направление оси поворота кристалла в системе координат образца, а только минимальный угол разориентации  $\delta$  кристалла относительно системы координат образца, который на гистограмме откладывается по оси абсцисс. Под минимальным углом разориентации понимается минимальный поворот вокруг некоторой оси, позволяющий совместить кристалл, находящийся в положении  $\{001\}\langle 100\rangle$  с текущим пространственным положением кристалла. Такое представление результатов текстурного анализа удобно для однокомпонентных острых текстур с небольшим рассеянием. Но для слабой многокомпонентной текстуры метод гистограмм малоинформативен.

#### Анализ вариантов представления данных

Варианты представления данных, полученных в результате анализа текстуры, показаны на основе расчета модельного примера [15]. Текстурные компоненты заданы таким образом, чтобы их полюса частично перекрывались (рис. 5).

Текстурная компонента задается ориентацией в объеме образца, заданной углами Эйлера, рассеянием и интенсивностью. Доля вычисляется с учетом интенсивности и рассеяния текстурной компоненты. Параметры для формирования текстурных компонент приведены в таблице (колонки 1–3).

#### Исходные данные и результаты расчетов модельного примера

##### Initial data and results of calculations of a model example

№	Исходные параметры			Рассчитанные параметры					
	Углы Эйлера	Рассеяние	Доля, %	Углы Эйлера	Вектор Родрига	Кватернион	Индексы Миллера	Доля, %	Рассеяние
1	19,0 37,0 20,0	3,0°	21,7	19,02 36,45 20,43	0,139, 0,105, -0,297	0,95 0,13*i 0,1*j -0,28*k	1-3-9 3-2-1	21,08	4,19°
2	12,0 35,0 24,0	5,0°	47,1	12,05 34,00 24,95	0,083, 0,071, -0,278	0,96 0,08*i 0,07*j -0,27*k	1-2-9 8-5-2	46,86	6,36°
3	13,0 46,0 7,0	2,0°	11,4	12,89 45,35 7,73	0,107, 0,053, -0,334	0,94 0,10*i 0,05*j -0,31*k	0-1-5 7-5-1	12,45	3,84°
4	21,0 32,0 30,0	3,0°	19,8	21,08 31,37 30,50	0,137, 0,135, -0,251	0,95 0,13*i 0,13*j -0,24*k	1-2-6 6-3-2	19,61	3,97°

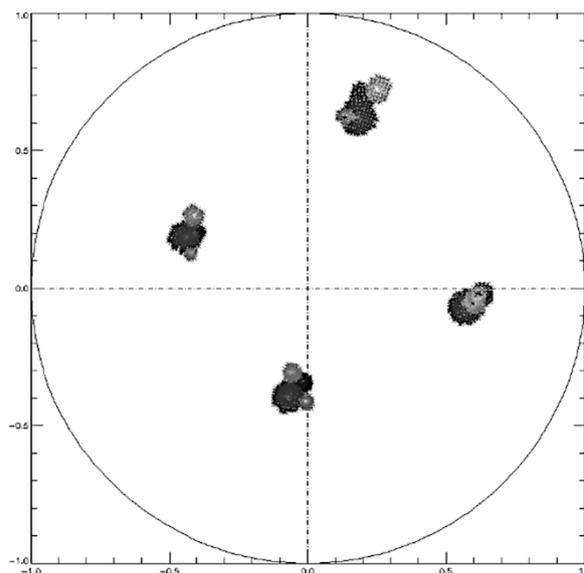


Рис. 5. Исходная ППФ  $\{111\}$  модельного примера

Fig. 5. The original PPF  $\{111\}$  of the model example

Углами Эйлера  $[\varphi_1, \Phi, \varphi_2]$  задается положение центральной ориентации текстурной компоненты с максимальной интенсивностью, относительно которой моделируется ее рассеяние по нормальному закону распределения.

По полюсной фигуре семейства  $\{111\}$ , построенной по данным модельного примера (рис. 5), был выполнен расчет, найдено 9188 ориентаций. После кластеризации в пространстве Родрига сформировано четыре текстурные компоненты, параметры которых приведены в таблице.

Положение вычисленных текстурных компонент в объеме образца представлено различными способами: углами Эйлера, векторами Родрига, кватернионами и индексами Миллера. Также указано рассеяние и доля в объеме образца.

На рис. 6 представлены ориентационные пространства Родрига и Эйлера. Видно, что в пространстве Эйлера явно выделены три группы ориентаций, которые, однако, не являются текстурными компонентами. Это связано

с тем, что для каждой ориентации в элементарном кубе пространства Эйлера существует три набора углов Эйлера, представляющих эту ориентацию. Также есть несколько ориентаций, расположенных отдельно от остальных, т. к. они попадают на граничную зону элементарного куба и отображаются на другой стороне куба. Используя такое представление облака ориентаций, сложно повести кластерный анализ и сформировать текстурные компоненты.

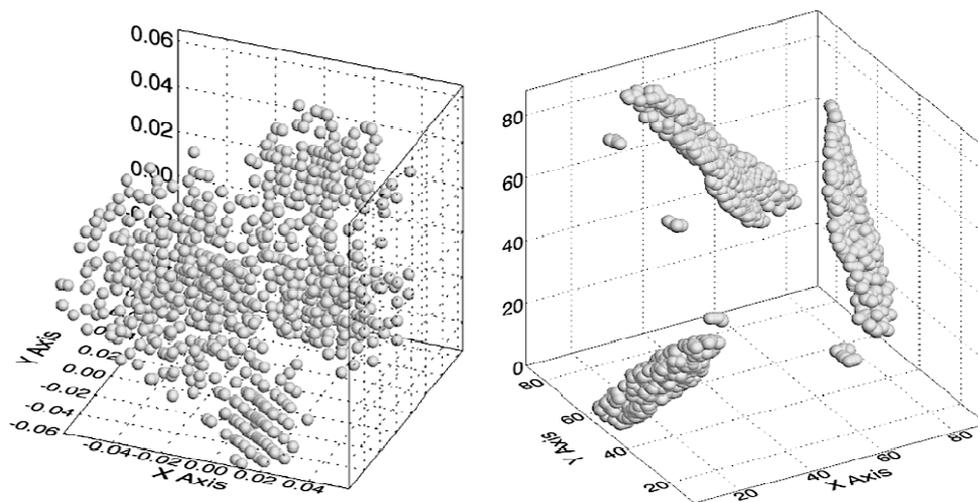


Рис. 6. Пространство: а – Родрига; б – Эйлера

Fig. 6. a) Rodrigues space; b) Euler space

В ориентационном пространстве Родрига каждая ориентация представлена одной точкой. Поскольку полюса текстурные компонент накладываются друг на друга, углы разориентации между ориентациями небольшие и облако ориентаций выглядит единым. Но при этом при проведении кластерного анализа текстурные

компоненты хорошо отделяются, формируя четыре компоненты.

На рис. 7, а приведена ППФ {001}, на которой показано положение осей кристаллов. По гистограмме на рис. 7, б можно видеть, что значительное количество ориентаций имеет угол разориентации, близкий к 60°.

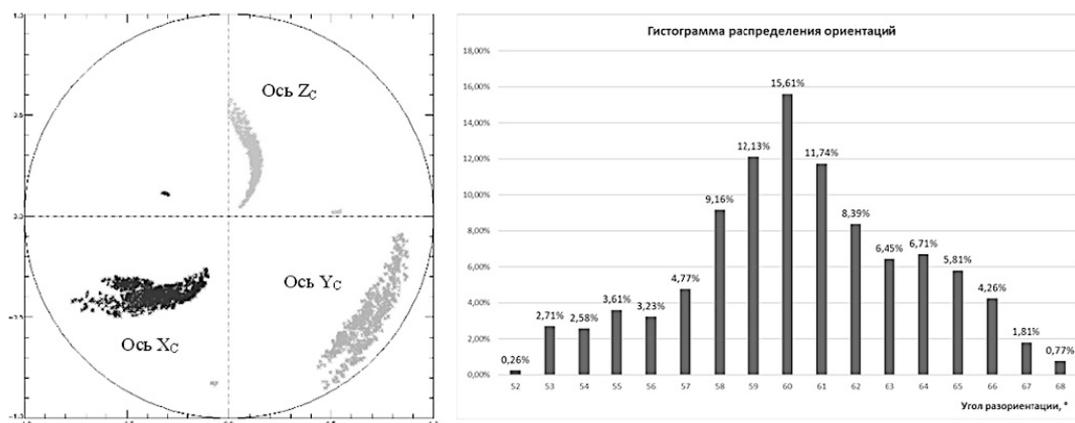


Рис. 7. а – ППФ {001}; б – гистограмма распределения ориентаций

Fig. 7. a) PPF {001}; b) histogram of distribution of orientations

## Выводы

В статье рассмотрены способы представления ориентаций различными способами (дескрипторами): матрицей вращения, углами Эйлера, кватернионами, индексами Миллера, параметрами ось-угол и векторам Родрига. Приведены формулы перехода от одного дескриптора к другому. Все эти способы позволяют описать положение кристалла в объеме как вращение относительно базовой системы координат образца. Выбор представления ориентации зависит от поставленной задачи.

Для проведения расчетов над ориентациями предпочтительнее использовать кватернионы или матрицы вращения, построенные по углам Эйлера. Данные дескрипторы увеличивают скорость и простоту вычислений, к недостаткам можно отнести невозможность отобразить результаты в трехмерном пространстве. Индексы Миллера используются преимущественно для отображения результатов. В различных исследованиях текстурные компоненты наиболее часто представлены именно индексами Миллера. Поскольку индексы Миллера являются целочисленными, они указывают лишь приближенное направление осей кристалла.

Также в статье рассмотрены следующие способы визуального представления распределения ориентаций: пространство Родрига, пространство Эйлера, гистограммы, ППФ  $\{001\}$ . ППФ  $\{001\}$  – двумерная стереографическая проекция нормалей плоскостей семейства  $\{001\}$ . Достоинствами такого представления является возможность наглядно увидеть, как расположены оси кристаллов в объеме образца. Гистограмма показывает распределение кристаллов относительно идеальной ориентации, позволяет выявить отклонение кристалла от идеального положения. Данный метод представления текстуры рекомендуется использовать для однокомпонентных острых текстур с небольшим рассеянием.

Возможность визуализировать результаты текстурного анализа облегчает восприятие информации о текстуре материала, позволяет заметить неочевидные особенности текстуры. Для визуализации текстуры в виде облака ориентаций подходит как пространство Эйлера, которое используется для отображения ФРО, так и пространство Родрига. Но представление текстуры в пространстве Родрига обладает рядом достоинств. В отличие от пространства Эйлера, в пространстве Родрига каждая ориентация уникальна, поэтому для дальнейших расчетов его использовать предпочтительнее.

## Библиографические ссылки

1. Бородкина М. М., Спектор Э. Н. Рентгенографический анализ текстуры в металлах и сплавах. М.: Металлургия, 1982. 272 с.
2. Сыпченко М. В., Савелова Т. И. Некоторые проблемы измерений ориентаций отдельных зерен и вычисление усредненных упругих свойств магния // Зав. лаб. 2010. Т. 76. № 6. С. 39–44.
3. Зорина М. А., Путинцева Е. Д. Особенности формирования текстуры рекристаллизации суперсплава системы Ni–Cr–Mo // Уральская школа молодых металлургов: сб. материалов XX Межд. науч.-техн. Уральской школы-семинара металлургов – мол. ученых. Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-в., 2020. С. 364–367. URL: <https://elar.urfu.ru/handle/10995/97189>.
4. Исследование кристаллографической текстуры трубной стали / Б. С. Ермаков, А. А. Альхименко, Н. О. Шапошников, А. С. Цветков, А. В. Широков // Письма о материалах. 2020. Т.10, № 1. С. 48–53. DOI: 10.22226/2410-3535-2020-1-48-53.
5. Isaenkova M. G., Perlovich Yu. A., Fesenko V. A. Modern methods of experimental construction of texture complete direct pole figures by using X-ray data // IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering. UK. 2016. Vol. 130. № 012055. (9 p). DOI: 10.1088/1757-899X/130/1/012055.
6. Исследование текстуры железоникелевых сплавов  $Fe_{64}Ni_{36}$  и  $Fe_{50}Ni_{50}$  методом дифракции обратно отраженных электронов / Д. П. Родионов, Ю. В. Хлебникова, Г. В. Козлов, И. В. Гервасьева, Т. Р. Суаридзе // Технические науки. Машиностроение и машиноведение. 2013. Т. 28, № 4. С. 165–179.
7. 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.
8. Humphreys F. J., Bate P. S., Hurley P. J. Orientation averaging of electron backscattered diffraction data // Journal of Microscopy. 2001. Vol. 201 (Pt 1). P. 50–58. DOI:10.1046/j.1365-2818.2001.00777.
9. 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.
10. 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. pp. 446–449. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2010.11.006.
11. 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.
12. 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.

13. Frank F. C. Orientation Mapping // Proc. of the ICOTOM-8 Conference. The Metallurg. Society. 1988. P. 403-408.

14. Мокрова С. М., Милич В. Н. Анализ текстуры сплавов никеля с палладием при создании лент-подложек сверхпроводников второго поколения // Приборостроение в XXI веке – 2018. Интеграция науки, образования и производства : сб. материалов XIV Междунар. науч.-техн. конф. Ижевск : Изд-во ИжГТУ имени М. Т. Калашникова, 2018. С. 268–274.

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.

### References

1. 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.).

2. Sypchenko M.V., Savelova T.I. [Some problems of measuring the orientations of individual grains and calculating the average elastic properties of magnesium]. *Zavodskaya laboratoriya*, 2010, vol. 76, no. 6, pp. 39-44. (in Russ.)

3. Zorina M.A., Putintseva E.D. *Osobennosti formirovaniya tekstury rekristallizacii supersplava sistemy Ni-Cr-Mo* [Features of the formation of the superalloy recrystallization texture of the Ni-Cr-Mo system]. *Ural'skaya shkola molodyx metalloedov: sb. materialov XX Mezhd. nauch.-texn. Ural'skoj shkoly-seminara metalloedov – mol. uchenyx* [XX Ural school-seminar for young metal scientists]. Yekaterinburg, 2020, pp. 364-367 (in Russ.).

4. Ermakov B.S., Al'ximenko A.A., Shaposhnikov N.O., Czvetkov A.S., Shirokov A.V. [Study of the crystallographic texture of pipe steel]. *Pis'ma o materialax*, 2020, Vol.10, no. 1, pp. 48-53 (in Russ.) DOI: 10.22226/2410-3535-2020-1-48-53.

5. Isaenkova M.G., Perlovich Yu.A., Fesenko V.A. Modern methods of experimental construction of texture complete direct pole figures by using X-ray data. In IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering. UK. 2016. Vol. 130, no. 012055. (9 p). DOI: 10.1088/1757-899X/130/1/012055.

6. Rodionov D.P., Xlebnikova Yu.V., Kozlov G.V., Gervas'eva I.V., Suaridze T.R. [Investigation of the texture of  $Fe_{64}Ni_{36}$  and  $Fe_{50}Ni_{50}$  iron-nickel alloys by back-

reflected electron diffraction] *Engineering Sciences. Machine science and building*, 2013. Vol. 28. no. 4. Pp. 165-179. (in Russ.).

7. Neumann P., Heinz A. Representation of orientation and disorientation data for cubic, hexagonal, tetragonal and orthorhombic crystals // *Acta Crystallogr. A*. USA. 1991. Vol. 47. Pp. 780-789. DOI: 10.1107/S0108767391006864.

8. 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.

9. 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, no. 2, pp. 238-245. DOI 10.23947/1992-5980-2018-18-2-238-245 (in Russ.).

10. 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. pp. 446–449. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2010.11.006.

11. 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, no. 1, pp. 83-89. doi: 10.1134/S0031918X06070118 (in Russ.)

12. 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, no. 3. pp. 73–81 (in Russ.).

13. Frank F.C. Orientation Mapping // Proc. of the ICOTOM-8 Conference. The Metallurg. Society. 1988. Pp. 403-408 (in Russ.).

14. Mokrova, S.M., Milich V.N. *Analiz tekstury splavov nikelya s palladiem pri sozdanii lent-podlozhek sverxprovodnikov vtorogo pokoleniya* [Analysis of the texture of nickel-palladium alloys in the creation of second-generation superconductor substrate tapes]. *Priporostroenie v XXI veke – 2018. Integraciya nauki, obrazovaniya i proizvodstva: sb. Materialov XIV mezhdunar. Nauch.-texn. Konf. [XIV international conference "instrumentation engineering in the xxi century. Integration of science, educaion and production"]*. Izhevsk, 2018, pp. 268–274 (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, no. 1, pp. 151–164 (in Russ.).

## Comparative Study of Methods to Present the Results of Texture Analysis of Polycrystalline Materials

S. M. Mokrova, Junior researcher, Udmurt Federal Research Center UB RAS, Izhevsk, Russia

V. N. Milich, Leading researcher, PhD in Engineering, Udmurt Federal Research Center UB RAS, Izhevsk, Russia

*It is necessary to use various methods of texture analysis at all stages of the technological processing of metals and alloys in order to select the optimal parameters for processing materials and obtain the necessary properties of final products. The article deals with the methods of presenting the results of texture analysis. Usually, the texture of a material is described by several preferred texture components, where the way of representation depends on the given task. The textural components combine the orientations of crystals having similar position in the sample volume. The results of texture analysis are the distribution of orientations relative to the base coordinate system. Orientation is described by four parameters: three coordinates in space and intensity, which is defined as the probability of occurrence of this orientation in the sample. Methods for representing the orientation of a single crystal by several descriptors: Euler angles, Miller indices, Rodrigues vectors, etc., each describing the rotation of the crystal coordinate system relative to the selected sample coordinate system, are given in the article. The formulae for the transition from one descriptor to another are given. The texture calculation algorithms depend on the way orientations are represented. Some representations are more convenient to use for calculations, others - for visualization and data processing. In particular, the use of the Rodrigue space allows not only to visualize the orientation cloud, but also to form textural components in it with a given accuracy by clustering. Variants of the analysis result presentation are shown in a model example. The textural components computed with high accuracy are displayed in the spaces of Euler angles and Rodrigues vectors. The orientation distributions are shown as a histogram and a pole figure {001}.*

**Keywords:** material texture, crystal orientation, Euler angles, rotation matrix, Rodrigues vector, Miller indices, quaternion.

Получено: 12.12.22

### Образец цитирования

Мокрова С. М., Милич В. Н. Сравнительное исследование методов представления результатов текстурного анализа поликристаллических материалов // Интеллектуальные системы в производстве. 2023. Т. 21, № 1. С. 23-32. DOI: 10.22213/2410-9304-2023-1-23-32.

### For Citation

Mokrova S.M., Milich V.N. [Comparative study of methods to present the results of texture analysis of polycrystalline materials]. *Intellektual'nye sistemy v proizvodstve*. 2023, vol. 21, no. 1, pp. 23-32 (in Russ.). DOI: 10.22213/2410-9304-2023-1-23-32.