

УДК 51–72

© С. М. Мокрова, Р. П. Петров, В. Н. Миллич

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ СТРУКТУРЫ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ С ПОМОЩЬЮ АЛГОРИТМА ОБЪЕКТНО-ВЕКТОРНОГО ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ПЛОСКОСТЕЙ ОТРАЖЕНИЯ И ВИЗУАЛИЗАЦИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ В ПРОСТРАНСТВЕ РОДРИГА

В статье рассматривается метод поиска и анализа текстурных компонент по прямым полюсным фигурам, с учетом симметрии кубического кристалла и образца. Алгоритм основан на представлении плоскостей отражения полярным комплексом векторов. Поиск ориентации происходит путем перемещения оси полярного комплекса по единичной полусфере, с последующим вращением полярного комплекса относительно этой оси. Далее определяется положение стереографических проекций векторов полярного комплекса на дискретной прямой полюсной фигуре. Ориентация считается найденной, если проекции по крайней мере трех векторов полярного комплекса попадают в область с ненулевой интенсивностью. Для каждой ориентации вычисляется вектор Родрига. Кроме того, определяются углы Эйлера и индексы Миллера. Текстурные компоненты выделяются в интерактивном режиме путем кластеризации данных в пространстве Родрига. С помощью ковариационной матрицы определяются собственные значения и векторы, характеризующие пространственное рассеяние текстурных компонент. В работе исследуются полюсные фигуры алюминиевой фольги после различных текстурных преобразований. Найденные текстурные компоненты представлены в пространстве Родрига.

*Ключевые слова:* текстура, прямая полюсная фигура, ориентация кристалла, текстурные компоненты, пространство Родрига, текстурные преобразования.

DOI: [10.20537/vm160304](https://doi.org/10.20537/vm160304)

### Введение

Известно, что анизотропия физико-механических свойств материалов связана с текстурой. Поэтому, для получения материалов с заданными свойствами актуальной является задача анализа текстуры. Например, в работе [1] исследуются изменения текстуры образцов алюминиевой фольги, полученных в процессе прокатки, с последующей термической обработкой – отжиг при различных температурах, временах выдержки и средах. При этом в процессе вторичной рекристаллизации в изделии происходят определенные текстурные превращения, которые характеризуются изменением пространственной ориентации и размеров зерен металла [2].

### § 1. Описание ориентаций с учетом симметрии образца и кристалла

Для описания текстуры необходимо определить ориентации кристаллитов (зерен) и их долю относительно общего объема образца. В практике текстурного анализа ориентации кристаллитов описываются с помощью индексов Миллера, матриц, углов Эйлера, векторов «ось–угол», а в последнее время — кватернионов и векторов Родрига [3]. 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. Напрямую представить трехмерное изображение текстурных компонент индексами Миллера, матрицей вращения, кватернионами невозможно. Поэтому для визуализации текстуры и выделения текстурных компонент наиболее удобным представлением является векторное изображение текстуры в трехмерном пространстве Родрига [4].

Под ориентацией кристалла понимается его пространственное положение относительно системы координат образца. Система координат образца обычно связана с основными направлениями обработки материала: для материалов прокатки это направление прокатки (RD), нормаль к плоскости прокатки (ND) и поперечное направление (TD). Выбор системы координат кристалла не так очевиден. В силу симметрии кубического кристалла существует 24 варианта (включая исходное положение кристалла) расстановки системы координат кристалла, т.е. каждая ориентация имеет 23 эквивалентные копии в ориентационном пространстве, которые физически неразличимы, хотя математически они различны [3].

Получить все варианты расстановок осей кристалла можно путем умножения матрицы вращения на операторы симметрии кристалла. Ниже представлены два генератора  $G_1$  и  $G_2$  точечной группы симметрии 432, с помощью которых могут быть определены все 24 оператора симметрии кристалла  $c_i, i = 1, \dots, 24$ :

$$G_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad G_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Симметрия образца определяется технологией изготовления изделий. Например, образцы листового проката металлов имеют орторомбическую симметрию. Операторы симметрии таких образцов  $s_j, j = 1, \dots, 4$ , описываются матрицами вращения относительно осей TD, ND, RD на  $180^\circ$ :

$$s_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad s_2 = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}, \quad s_3 = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad s_4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}.$$

При вычислении матрицы эквивалентной ориентации  $g' = c_i * g * s_j$  учитывается как симметрия образца, так и симметрия кристалла.

Из теоремы Эйлера о конечных поворотах следует, что совмещение одноименных осей координат образца и кристалла может быть выполнено за один поворот вокруг некоторого единичного вектора  $\vec{n}$ , который определяет положение оси вращения, на некоторый угол поворота  $\theta$  вокруг этой оси. Выбором из множества систем координат кристалла, описываемых матрицами  $g'$ , той, которая обеспечивает минимум угла разориентации с системой координат образца, однозначно определяется система координат кристалла. Тогда вектор Родрига, определяющий ориентацию, равен  $\vec{R} = \vec{n} * \tan(\theta/2)$ , где  $\vec{n}$  есть вектор направления оси вращения, а модуль вектора  $\vec{R}$  равен тангенсу половинного угла вращения  $\theta$ . Параметры вектора Родрига достаточно просто вычисляются из матрицы вращения [5]:

$$\cos(\theta) = 0.5 * (a_{11} + a_{22} + a_{33} - 1),$$

$$x_1 = \frac{a_{32} - a_{23}}{2 * \sin(\theta)}, \quad x_2 = \frac{a_{13} - a_{31}}{2 * \sin(\theta)}, \quad x_3 = \frac{a_{21} - a_{12}}{2 * \sin(\theta)}.$$

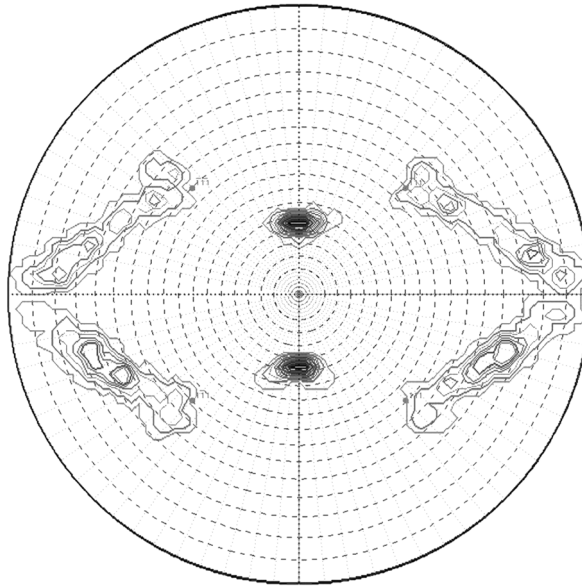
где  $a_{ij}$  — элементы матрицы вращения,  $(x_1, x_2, x_3)$  — координаты оси вращения.

Однозначное представление ориентации в пространстве Родрига из множества эквивалентных ориентаций достигается выбором минимального угла поворота, при этом ось вращения должна находиться в области пространства Родрига, определенной симметрией образца. При наличии текстуры материала в пространстве Родрига формируются кластеры текстурных компонент, что обеспечивает наглядность представления текстуры.

## § 2. Алгоритм поиска текстурных компонент

Для определения текстурных компонент в поликристаллических материалах по прямым полюсным фигурам (ППФ) использовался алгоритм [6], который в настоящей работе дополнен средствами, позволяющими исследовать и отображать полученные результаты в пространстве Родрига.

На рисунке 1 приведен пример ППФ с нанесенной на нее сеткой Болдырева с шагом  $5^\circ$ , где каждому узлу сетки приписано значение интенсивности отраженного рентгеновского сигнала от заданных кристаллографических плоскостей (для данной полюсной фигуры плоскости отражения  $\{111\}$ ).



**Рис. 1.** Прямая полюсная фигура образца алюминиевой фольги после прокатки для плоскостей отражения семейства  $\{111\}$  с подложенной сеткой Болдырева с шагом  $5^\circ$ .

Целью анализа полюсной фигуры является определение ориентаций зерен кристаллов по положению стереографических проекций их векторов отражения на ППФ. В программе, реализующей предложенный алгоритм, исходные данные ППФ представлены списком, где углам  $\alpha$  и  $\beta$ , изменяющимся с некоторым постоянным шагом, соответствуют значения интенсивности отраженного рентгеновского сигнала от плоскостей отражения. Углы  $\alpha$  и  $\beta$  соответствуют узлам сетки полюсной фигуры и изменяются в пределах  $[0, 90^\circ]$  и  $[0, 360^\circ]$  соответственно. Для более точного анализа исходные данные линейно интерполируются с шагом  $1^\circ$ . Интенсивность в узлах дискретизируется по формуле  $n_t = \text{round}(I_t/\Delta I)$ , где  $n_t$  — целочисленное значение уровней интенсивности,  $I_t$  — текущая интенсивность,  $\Delta I$  — шаг по интенсивности.

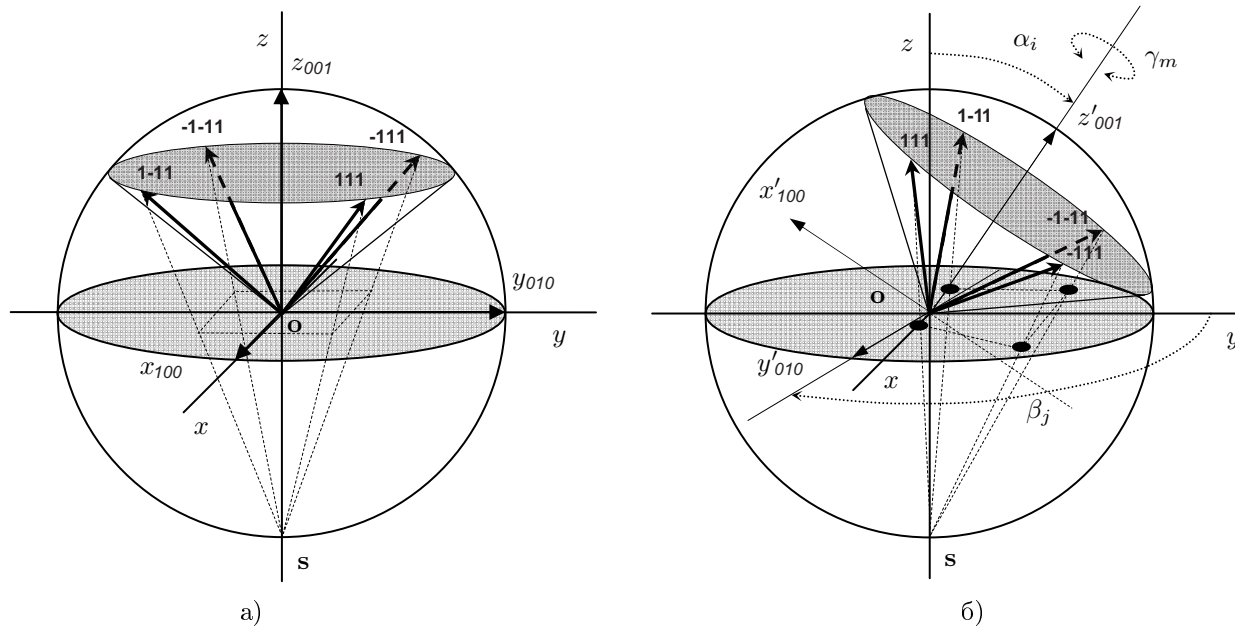
Далее, строится полярный комплекс — объект, состоящий из набора векторов, являющихся нормальными к плоскостям отражения для заданной полюсной фигуры при углах  $\alpha$  и  $\beta$ , равных 0 (см. рис. 2). В программе объект представляется в виде структуры с полями: количество полюсов для заданного семейства векторов отражения, координаты векторов. Также задается параметр, определяющий минимальное количество векторов с ненулевой интенсивностью для того, чтобы ориентация считалась найденной. Например, для плоскостей отражения  $\{111\}$  для определения ориентации необходимо 3 полюса, поскольку четвертый полюс неполной ППФ часто находится вне пределов области съемки полюсной фигуры.

На следующем этапе ось полярного комплекса наклоняется на углы  $\alpha_i$  и  $\beta_i$ ,  $\alpha_i \in [0, 90^\circ]$  и  $\beta_i \in [0, 360^\circ]$ . При фиксированных  $\alpha_i$  и  $\beta_i$  выполняется вращение полярного комплекса по углу  $\gamma_i \in [0, 90^\circ]$  вокруг оси комплекса. Формула для вычисления матрицы вращения приведена ниже:

$$A = \cos \gamma \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + (1 - \cos \gamma) \begin{pmatrix} r_x^2 & r_x r_y & r_x r_z \\ r_y r_x & r_y^2 & r_y r_z \\ r_z r_x & r_z r_y & r_z^2 \end{pmatrix} + \sin \gamma \begin{pmatrix} 0 & -r_z & r_y \\ r_z & 0 & -r_x \\ -r_y & r_x & 0 \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где  $r_x, r_y, r_z$  — координаты оси вращения.

С помощью матрицы (1) определяются новые местоположения векторов и их стереографические проекции, которые затем проверяются на совпадение с областями интенсивности на полюсной фигуре. Для каждой проекции вектора (полюса ориентации) на сетке полюсной фигуры выбирается ближайший к ней узел, интенсивность которого присваивается вектору и используется для расчетов. Если заданное количество векторов полярного комплекса имеет ненулевую интенсивность, ориентация считается найденной (см. рис. 2).



**Рис. 2.** Схема, иллюстрирующая алгоритм поиска ориентаций на примере объекта семейства {111}: а) исходное положение векторов {111}, т. е. углы  $\alpha = \beta = \gamma = 0$ ; б) ориентация векторов {111}, стереографически пересекающихся с ячейками на ППФ, имеющими отличное от 0 значение интенсивности при углах поворота  $\alpha_i, \beta_i$  и  $\gamma_i$ , которые обозначены на рисунке значком •

Далее, матрица вращения умножается на операторы симметрии, представленные единичными матрицами, и выбирается такое положение осей кристалла, при котором угол разориентации между системой координат образца и кристалла минимальный. Минимум угла разориентации достигается путем перебора положений системы координат кристалла и сравнения вычисленных углов разориентации для каждого положения осей кристалла.

Для выбранного положения осей кристалла вычисляется параметр  $P$ , который используется для определения наиболее достоверных ориентаций. Предполагается, что наиболее вероятная ориентация будет иметь наибольшие значения интенсивности в полюсах и минимальную дисперсию. Параметр  $P$  вычисляется по формуле:

$$P = \sum_{i=1}^n I_i/n + 1/\sigma^2$$

где  $I_i$  — уровень интенсивности  $i$ -го полюса,  $n$  — количество полюсов ориентации,  $\sigma^2$  — дисперсия. По параметру  $P$  производится сортировка найденных ориентаций. Параметр  $P$  характеризует достоверность ориентации. Ориентации с наибольшим параметром рассматриваются в первую очередь. В цикле, среди всех полюсов текущей ориентации, выбирается минимальное значение интенсивности, которое затем вычитается из интенсивности узлов полюсной фигуры, соответствующих данным полюсам текущей ориентации. Значение минимальной интенсивности полюсов ориентации сохраняется в параметрах текущей ориентации и будет в дальнейшем использоваться для расчетов как вес ориентации. Эта процедура повторяется, пока есть та-

кие ориентации, для полюсов полярного комплекса которых находятся узлы ППФ с ненулевой интенсивностью.

Результатом этого этапа будет массив ориентаций, представленных несколькими способами: индексами Миллера, матрицей вращения, вектором Родрига. При этом каждому вектору Родрига приписывается вес, который вычисляется во время поиска и сортировки ориентаций и равен минимальному уровню интенсивности полюсов ориентации. В пространстве Родрига образуется облако точек, каждая из которых соответствует одной ориентации.

Для выявления 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 был выбран метод минимаксного расстояния, поскольку этот алгоритм не зависит от выборки исходных центров кластеров и дает стабильные результаты [7]. В классическом варианте этот метод основан на выявлении кластеров при заданном пороговом ограничении на расстояние между точками множества. Алгоритм был модифицирован для того, чтобы получать заданное количество кластеров, изменяя параметр, связанный с расстоянием между центрами кластеров. В качестве меры расстояния в пространстве Родрига берется угол  $\theta$ , который выражается в градусах и вычисляется по формуле вычитания конечных поворотов [8]:

$$\theta = 2 * \arctan \left| \frac{1}{1 + 0.25 \vec{R}_1 \cdot \vec{R}_2} * (\vec{R}_2 - \vec{R}_1 + 0.5 \vec{R}_1 \times \vec{R}_2) \right| \quad (2)$$

где  $\vec{R}_1, \vec{R}_2$  — два вектора Родрига.

Для каждой текстурной компоненты (кластера) вычисляются координаты среднего вектора. Сложение векторов в пространстве Родрига осуществляется по формуле сложения конечных поворотов [8]. Для вычисления максимального и минимального углов рассеяния кластера  $\theta_{\max}$  и  $\theta_{\min}$  используется формула вычитания конечных поворотов (2), где  $\vec{R}_1$  соответствует среднему вектору Родрига кластера,  $\vec{R}_2$  — текущий вектор Родрига кластера. При этом если максимальный угол рассеяния кластеров превышает заданное значение, то производится повторная разбивка на большее число кластеров. Количество кластеров задается в интерактивном режиме, исходя из опыта исследователя, анализирующего данные в пространстве Родрига.

По полученным данным вычисляется матрица ковариации, с помощью которой для каждого кластера определяются его собственные вектора и собственные значения. По этим данным строится трехосный эллипсоид, показывающий направление рассеяния кластера текстурной компоненты.

Доля текстурной компоненты определяется как процентное соотношение количества ориентаций в кластере с учетом весов ориентаций относительно общего количества найденных ориентаций.

Таким образом, реализация предложенного алгоритма с учетом отображения ориентаций в пространстве Родрига, позволяет с заданной точностью определить все текстурные компоненты и вычислить их параметры.

### § 3. Исследование прямых полюсных фигур алюминиевой фольги

С помощью предложенного алгоритма были исследованы прямые полюсные фигуры для плоскостей отражения  $\{111\}$ , снятые с образцов алюминиевой фольги с различными параметрами отжига (см. рис. 3) [1]. В таблицах приведены следующие параметры текстурных компонент: индексы Миллера, координаты среднего вектора Родрига, рассеяние текстурной компоненты вдоль осей эллипсоида, угол разориентации системы координат ориентации, соответствующей среднему вектору Родрига, и системы координат образца; доля текстурной компоненты. Текстурные компоненты и построенные для них эллипсоиды рассеяния отображены в пространстве Родрига (см. рис. 4).

Первая полюсная фигура (см. рис. 3, а) получена с образца алюминиевой пленки после деформации. В пространстве Родрига, построенного по результатам анализа данной ППФ, выделяются 3 основные текстурные компоненты, которые однако имеют большое рассеяние относительно средних векторов кластеров,  $44^\circ$ ,  $25^\circ$  и  $20^\circ$  соответственно. Для уточнения текстуры предлагается разбить облако ориентаций на 9 кластеров (см. рис. 4, а). При этом рассеяние кластеров не будет превышать  $15^\circ$ . Основными текстурными компонентами стали 2 и 3 кластеры, составляющие 31.5 % от общего числа ориентаций. Параметры текстурных компонент приведены в таблице 1.

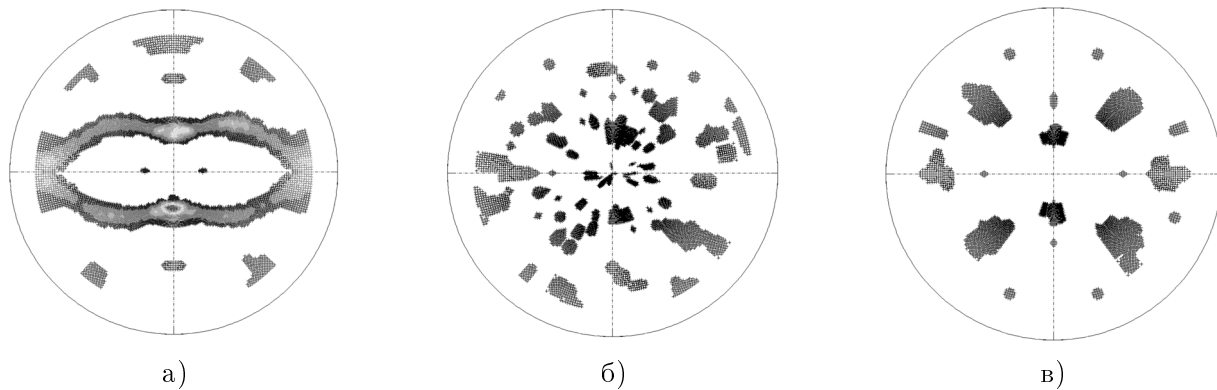


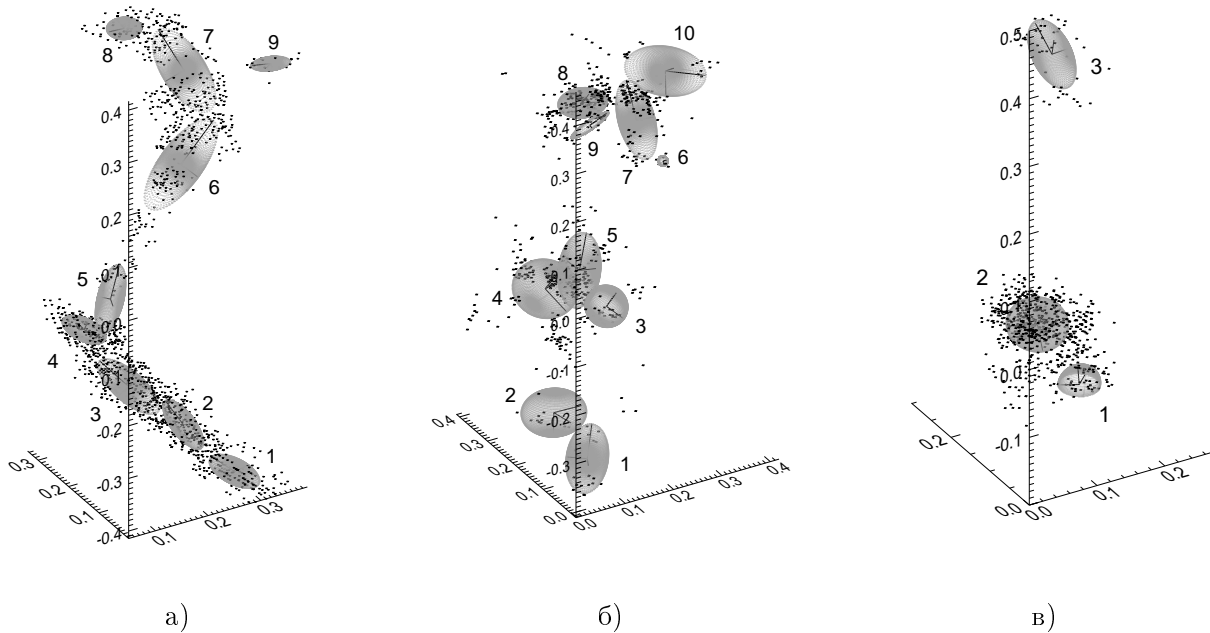
Рис. 3. а) ППФ образца после деформации; б) ППФ образца после отжига в течение 1 ч при температуре  $450^\circ$ ; в) ППФ образца после отжига в течение 1 ч при температуре  $450^\circ$  в вакууме

Таблица 1. Текстурные компоненты образца после деформации.

Текст. компонента	Индексы Миллера	Средний вектор Родрига	Макс. дисперсия вдоль осей эллипсоида	Угол разориентации	Доля
1	(0 -2 3) [4 -3 -2]	0.29, 0.08, -0.4	$9.5^\circ$ , $5.6^\circ$ , $3.8^\circ$	$53.03^\circ$	12.4 %
2	(1 -4 7) [8 -5 -4]	0.23, 0.15, -0.32	$14.0^\circ$ , $7.0^\circ$ , $4.5^\circ$	$45.73^\circ$	17.3 %
3	(1 -1 2) [4 -2 -3]	0.19, 0.25, -0.29	$12.5^\circ$ , $8.2^\circ$ , $6.3^\circ$	$46.53^\circ$	24.2 %
4	(3 -2 5) [3 -1 -2]	0.13, 0.28, -0.18	$9.1^\circ$ , $6.1^\circ$ , $3.8^\circ$	$39.68^\circ$	14.7 %
5	(1 -1 3) [8 -1 -3]	0.11, 0.17, -0.06	$13.0^\circ$ , $5.4^\circ$ , $2.8^\circ$	$23.74^\circ$	3.6 %
6	(2 -2 5) [9 4 -2]	0.22, 0.13, 0.19	$11.2^\circ$ , $7.5^\circ$ , $4.9^\circ$	$35.03^\circ$	7.7 %
7	(1 -1 2) [4 3 -1]	0.27, 0.19, 0.32	$12.4^\circ$ , $9.5^\circ$ , $4.5^\circ$	$49.26^\circ$	13.2 %
8	(3 -1 5) [5 5 -2]	0.18, 0.25, 0.39	$7.9^\circ$ , $5.2^\circ$ , $2.5^\circ$	$53.19^\circ$	5.5 %
9	(2 -5 8) [7 6 2]	0.33, 0.02, 0.4	$5.6^\circ$ , $2.4^\circ$ , $3.0^\circ$	$54.8^\circ$	1.5 %

Текстура на следующей ППФ (см. рис. 3, б) не выражена явно, однако в пространстве Родрига сформировались два кластера, имеющие рассеяние  $58^\circ$  и  $42^\circ$  соответственно. Для получения более мелких текстурных компонент облако ориентаций разбивается на 10 кластеров (см. рис. 4, б). При этом максимальное рассеяние текстурных компонент не превысит  $20^\circ$ . Преимущественными текстурными компонентами являются 4, 7 и 8 кластеры, составляющие примерно 69 % от общего числа ориентаций (см. таблицу 2).

В образце, полученном после отжига в вакууме (см. рис. 3, в) сформировались три текстурные компоненты, представленные в пространстве Родрига хорошо разделенными кластерами (см. рис. 4, в). Самая крупная текстурная компонента (1 -1 8) [9 1 -1] близка к идеальной ориентации и составляет примерно 76 %. Также присутствует еще одна сильная текстурная компонента (2 -3 5) [7 -2 -4], составляющая примерно 20 %.



**Рис. 4.** Текстурные компоненты в пространстве Родрига: а) образца после деформации; б) образца после отжига в течение 1 ч при температуре 450°; в) образца после отжига в течение 1 ч при температуре 450° в вакууме.

**Таблица 2.** Текстурные компоненты образца после отжига.

Текст. компонента	Индексы Миллера	Средний вектор Родрига	Макс. дисперсия вдоль осей эллипсоида	Угол разориентации	Доля
1	(1 -1 9) [5 -4 -1]	0.06, 0.05, -0.35	10.8°, 9.1°, 6.2°	39.24°	2.80 %
2	(1 -1 3) [5 -4 -3]	0.09, 0.22, -0.34	14.4°, 7.2°, 6.6°	45.31°	2.50 %
3	(3 -4 8) [4 -2 -1]	0.19, 0.20, -0.14	15.0°, 13.1°, 10.1°	34.76°	5.60 %
4	(5 -2 8) [5 -1 -3]	0.1, 0.27, -0.10	14.8°, 11.9°, 9.7°	34.52°	23.40 %
5	(1 -1 8) [9 1 -1]	0.05, 0.04, 0.04	19.9°, 11.7°, 3.8°	11.73°	13.80 %
6	(1 -1 1) [3 1 -2]	0.39, 0.34, 0.08	16.6°, 1.6°, 0.8°	54.65°	1.30 %
7	(2 -2 5) [5 3 -1]	0.23, 0.16, 0.26	13.7°, 8.4°, 9.1°	41.56°	22.90 %
8	(2 -1 4) [3 2 -1]	0.16, 0.24, 0.28	9.1°, 8.5°, 7.8°	43.36°	22.80 %
9	(1 -1 9) [1 1 0]	0.07, 0.05, 0.36	7.1°, 3.5°, 1.8°	40.12°	2.10 %
10	(2 -2 5) [1 1 0]	0.26, 0.11, 0.38	11.6°, 10.5°, 4.7°	50.6°	2.80 %

**Таблица 3.** Текстурные компоненты для образца после отжига в вакууме.

Текст. компонента	Индексы Миллера	Средний вектор Родрига	Макс. дисперсия вдоль осей эллипсоида	Угол разориентации	Доля
1	(2-3 5) [7-2-4]	0.21, 0.23, -0.12	8.6°, 7.4°, 5.3°	40.57°	18.9 %
2	(1-1 8) [9 1-1]	0.04, 0.05, 0.04	10.3°, 8.5°, 6.8°	6.85°	75.9 %
3	(2-1 4) [3 2-1]	0.18, 0.25, 0.29	8.8°, 7.4°, 7.4°	45.74°	5.2 %

## § 4. Выводы

Показано, что описание ориентаций векторами Родрига позволяет формировать кластерное описание текстурных компонент и наглядно отображать их в трехмерном пространстве Родрига, а также вычислять положение центров кластеров и характеристики их рассеяния — собственные вектора и собственные значения.

На основании разработанных алгоритмов анализа текстурных компонент поликристаллических материалов создано программное обеспечение, написанное на языке IDL, обеспечивающее выполнение текстурных исследований образцов металлов кубической системы по прямым полюсным фигурам. Тестирование работоспособности программного обеспечения выполнялось на модельных примерах и образцах монокристалла камасита.

По имеющимся прямым полюсным фигурам трех образцов из алюминиевой фольги, полученных методом холодной прокатки с высокой степенью обжатия, выполнены экспериментальные исследования. Полученные результаты согласуются с данными, приведенными в работе [1].

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Титоров Д.Б., Волков В.А., Лебедев В.П., Минеев Ф.В., Титорова Д.В. Текстурные преобразования при отжиге алюминиевых фольг. 1. Сильные текстурные компоненты // Физика металлов и металлургия. 2006. Т. 102. № 1. С. 91–97.
2. Уманский Я.С., Скаков Ю.А., Иванов А.Н., Расторгуев Л.Н. Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия. М.: Металлургия, 1982. 632 с.
3. Neumann P., Heinz A. Representation of orientation and disorientation data for cubic, hexagonal, tetragonal and orthorhombic crystals // Acta Crystallographica Section A. 1991. Vol. 47. Part 6. P. 780–789. DOI: [10.1107/S0108767391006864](https://doi.org/10.1107/S0108767391006864)
4. Frank F.C. Orientation mapping // Metallurgical Transactions A. 1988. Vol. 19. Issue 3. P. 403–408. DOI: [10.1007/BF02649253](https://doi.org/10.1007/BF02649253)
5. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике для научных работников и инженеров. М.: Наука, 1978. 832 с.
6. Мокрова С.М., Петров Р.П., Милич В.Н., Титоров Д.Б. Анализ текстурных компонент металлов по прямым полюсным фигурам на основе объектно-векторного представления плоскостей отражения // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2014. Т. 80. № 5. С. 30–34.
7. Ту Дж., Гонсалес Р. Принципы распознавания образов. М.: Мир, 1978. 412 с.
8. Лурье А.И. Аналитическая механика. М.: ГИФМЛ, 1961. 824 с.

Поступила в редакцию 23.05.2016

Мокрова Светлана Михайловна, младший научный сотрудник, отдел исследования и диагностики пространственной структуры, Физико-технический институт УрО РАН, 426000, Россия, г. Ижевск, ул. Кирова, 132.

E-mail: [svetlana@aroma.com](mailto:svetlana@aroma.com)

Петров Рудольф Павлович, ведущий математик, отдел исследования и диагностики пространственной структуры, Физико-технический институт УрО РАН, 426000, Россия, г. Ижевск, ул. Кирова, 132.

E-mail: [lssm@ftiudm.ru](mailto:lssm@ftiudm.ru)

Милич Владимир Николаевич, к. т. н., заведующий отделом, отдел исследования и диагностики пространственной структуры, Физико-технический институт УрО РАН, 426000, Россия, г. Ижевск, ул. Кирова, 132.

E-mail: [mili@ftiudm.ru](mailto:mili@ftiudm.ru)

*S. M. Mokrova, R. P. Petrov, V. N. Milich*

**Determination of the texture of polycrystalline materials using an algorithm of object-vector representation of reflection planes and visualization of the results in Rodrigues space**

**Citation:** *Vestnik Udmurtskogo Universiteta. Matematika. Mekhanika. Komp'yuternye Nauki*, 2016, vol. 26, no. 3, pp. 336–344 (in Russian).



*Keywords:* texture, direct pole figure, crystal orientation, textural components, Rodrigues space, textural transformations.

MSC2010: 65Z05

DOI: [10.20537/vm160304](https://doi.org/10.20537/vm160304)

The article deals with the method of search and analysis of textural components using direct polar figures with due account for the symmetry of a cubic crystal and a sample. The algorithm is based on the representation of reflection planes by a polar complex of vectors. Search of orientation is made by moving the axis of a polar complex over the unit hemisphere followed by the rotation of a polar complex relative to this axis. Then the position of stereographic projections of the polar complex vectors on a discrete direct pole figure is determined. Orientation is found when the projections of at least three polar complex vectors are located in the area with non-zero intensity. For each orientation a Rodrigues vector is calculated. In addition, Euler angles and Miller indices are determined. Textural components are allocated interactively by clustering the data in Rodrigues space. Using the covariance matrix the eigenvalues and eigenvectors are determined characterizing the spatial dispersion of textural components. Pole figures of an aluminum foil after various textural transformations are investigated in the article. Obtained textural components are displayed in Rodrigues space.

#### REFERENCES

1. Titorov D.B., Volkov V.A., Lebedev V.P., Mineev F.V., Titorova D.V. Texture transformations upon annealing of aluminum foils: I. Strong texture components, *The Physics of Metals and Metallography*, 2006, vol. 102, issue 1, pp. 83–89. DOI: [10.1134/S0031918X06070118](https://doi.org/10.1134/S0031918X06070118)
2. Umanskii Ya.S., Skakov Yu.A., Ivanov A.N., Rastorguev L.N. *Kristallografiya, rentgenografiya i elektronnaya mikroskopiya* (Crystallography, X-ray and electron microscopy), Moscow: Metallurgiya, 1982, 632 p.
3. Neumann P., Heinz A. Representation of orientation and disorientation data for cubic, hexagonal, tetragonal and orthorhombic crystals, *Acta Crystallographica Section A*, 1991, vol. 47, part 6, pp. 780–789. DOI: [10.1107/S0108767391006864](https://doi.org/10.1107/S0108767391006864)
4. Frank F.C. Orientation mapping, *Metallurgical Transactions A*, 1988, vol. 19, issue 3, pp. 403–408. DOI: [10.1007/BF02649253](https://doi.org/10.1007/BF02649253)
5. Korn G., Korn T. *Spravochnik po matematike dlya nauchnykh rabotnikov i inzhenerov* (Mathematical handbook for scientists and engineers), Moscow: Nauka, 1978, 832 p.
6. Mokrova S.M., Petrov R.P., Milich V.N., Titorov D.B. Analysis of the texture components of metal using the direct pole figures on the basis of the object-vector representation of the reflection planes, *Zavodskaya Laboratoriya. Diagnostika Materialov*, 2014, vol. 80, no. 5, pp. 30–34 (in Russian).
7. Tou J.T., Gonzalez R.C. *Pattern recognition principles*, MA: Addison-Wesley, 1974, 377 p. Translated under the title *Printsipy raspoznavaniya obrazov*, Moscow: Mir, 1978, 412 p.
8. Lur'e A.I. *Analiticheskaya mekhanika* (Analytical mechanics), Moscow: Gos. Izd. Fiz.-Mat. Lit., 1961, 824 p.

Received 23.05.2016

Mokrova Svetlana Mikhailovna, Junior Researcher, Physical Technical Institute, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, ul. Kirova, 132, Izhevsk, 426000, Russia.

E-mail: [svetlana@aroma.com](mailto:svetlana@aroma.com)

Petrov Rudol'f Pavlovich, Leading Mathematician, Physical Technical Institute, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, ul. Kirova, 132, Izhevsk, 426000, Russia.

E-mail: [lssm@ftiudm.ru](mailto:lssm@ftiudm.ru)

Milich Vladimir Nikolaevich, Candidate of Engineering, Head of Department, Physical Technical Institute, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, ul. Kirova, 132, Izhevsk, 426000, Russia.

E-mail: [mili@ftiudm.ru](mailto:mili@ftiudm.ru)