

Marcin Świątek, Jerzy Jura

Analiza funkcji rozkładu orientacji krystalitów.

Opracowanie programu komputerowego

Tekstura krystalograficzna

Funkcja rozkładu orientacji (FRO) krystalitów nazywana jest również funkcją tekstury. Przez pojęcie tekstury można rozumieć kierunkowe ustawienie się krystalitów wchodzących w skład agregatu polikrystalicznego. Z definicji tekstura, utożsamiana z rozkładem orientacji krystalitów w materiale polikrystalicznym [1, 2], jest cechą materiału krystalicznego mówiącą o jego anizotropii – to znaczy wykazywaniu odmiennych właściwości mechanicznych, fizycznych, zależnie od kierunku badania danego materiału. Typowymi własnościami anizotropowymi są własności mechaniczne, takie jak: moduł sprężystości, granica plastyczności, twardość oraz własności fizyczne: chemiczne, cieplne, elektryczne, magnetyczne, optyczne [3, 4]. Jeśli ziarna w materiale ułożone są całkowicie chaotycznie, to polikryształ nie wykazuje własności anizotropowych. Własności tych ciał nie zależą od kierunku badania – są izotropowe. Wykształcenie tekstury w materiale prowadzi do powstania własności anizotropowych. Ma to ogromne znaczenie w zastosowaniu takiego materiału w technice.

Funkcja rozkładu orientacji

Funkcja rozkładu orientacji (FRO) stanowi podstawę do śledzenia zmian w teksturze globalnej, jak również w teksturze lokalnej (mikrostrukturze) materiału [1, 2]. Dla określenia funkcji rozkładu orientacji konieczne są metody rachunkowe, które na podstawie zmierzonych figur biegunowych lub zbiorów pojedynczych orientacji pozwalają na aproksymację jej wartości. Aproksymacja wartości trójwymiarowej FRO z dwuwymiarowych figur biegunowych jest skomplikowanym problemem numerycznym. Spowodowane jest to przez związek łączący obie funkcje, określane jako tzw. równanie podstawowe [5].

$$P_h(y) = \frac{1}{4 \cdot \pi} \int_0^{2\pi} [f(H(h, \gamma)^{-1}Y(y, 0)) + f(H(-h, \gamma)^{-1}Y(y, 0))] d\gamma,$$

gdzie $P_h(y)$ – zmierzona figura biegunowa,

H, Y – macierze obrotu określające linię całkowania w przestrzeni orientacji,

h, y – wektory określające punkt pomiaru wartości figury biegunowej.

Istnieje kilka metod rozwiązywania równania podstawowego. Można je sklasyfikować następująco [1]:

- metody korzystające z rozwinięcia szeregowego FRO,
- metody polegające na zastąpieniu całki sumą iteracyjną, co prowadzi do układu równań liniowych,
- metody stosujące operator iteracyjny.

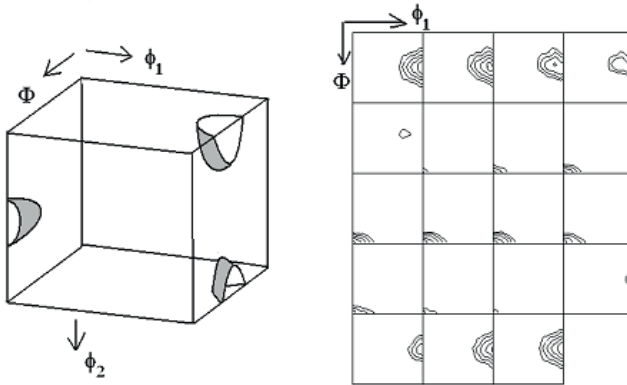
Każda z tych metod aproksymuje wartość FRO z figur biegunowych.

Funkcja rozkładu orientacji jest funkcją trójwymiarową określaną w postaci:

$$f(g) = f(\varphi_1, \Phi, \varphi_2)$$

gdzie g – określa orientację reprezentowaną przez trzy kąty Eulera $\varphi_1, \Phi, \varphi_2$. Przy obliczaniu funkcji rozkładu $f(g)$ najczęstszym typem danych doświadczalnych są figury biegunowe. Obliczenie trójwymiarowej funkcji rozkładu z dwuwymiarowych figur biegunowych nie jest problemem trywialnym. To tak jakby próbować odtwarzać trójwymiarowy kształt przedmiotu na podstawie określonej liczby jego rzutów.

Funkcja rozkładu orientacji przedstawiana jest graficznie jako izolinie przechodzące przez punkty g , w których FRO ma stałą wartość (rys. 1).



Rys. 1. Model ilustrujący prezentację funkcji rozkładu orientacji krystalitów [5]

Program komputerowy „FRO” do analizy funkcji rozkładu orientacji

Program „FRO” służy do wizualizacji danych funkcji rozkładu orientacji (FRO) krystalitów reprezentowanych w przestrzeni kątów Eulera $\varphi_1, \Phi, \varphi_2$ w granicach $\varphi_2 : 0^\circ \div 90^\circ$ oraz $\varphi_1 : 0^\circ \div 360^\circ$. Program został opracowany w środowisku Matlab R2007b. Następnie, za pomocą kompilatora Visual C++ 2005, został skompilowany do pliku wykonywalnego exe.

Program posiada następujące możliwości:

- tworzy 19 interaktywnych wykresów funkcji rozkładu orientacji dla zmieniającego się co 5° kąta φ_2 w granicach $0^\circ \div 90^\circ$ lub $0^\circ \div 120^\circ$. Każdy z wykresów przedstawia wartości funkcji rozkładu orientacji dla kątów φ_1 oraz φ . Wykresy przedstawiają FRO w postaci izolinii. Po wprowadzeniu kursora na wykres i naciśnięciu przycisku myszy zostaje wyświetlona pozycja zaznaczonego punktu w przestrzeni kątów $\varphi_1, \Phi, \varphi_2$ oraz wartość FRO w tym punkcie. Podana jest również, na podstawie danych kątów Eulera, reprezentacja orientacji dla tego punktu za pomocą wskaźników Millera,
- tworzy jeden duży, interaktywny wykres FRO dla ustalonego kąta φ_2 . Wykres ten posiada takie same własności jak wykresy z poprzedniego podpunktu,
- tworzy wykres reprezentujący rozkład FRO dla jednego z kątów Eulera po podaniu wartości dwóch pozostałych kątów,
- tworzy trójwymiarowy wykres reprezentujący na jednej osi wartość FRO, a na dwóch pozostałych osiach wartości wybranych dwóch kątów Eulera,
- tworzy trójwymiarową wizualizację rozkładu FRO w przestrzeni trzech kątów Eulera.

Po wczytaniu danych (wartości FRO) program umożliwia pięć wyżej wymienionych wariantów ich wizualizacji. Wszystkie te warianty dostępne są z rozwijalnego okna, gdzie do wyboru są pozycje: wykres 1, wykres 2, wykres 3, wykres 4, wykres 5. Każdy z nich pozwala na wizualizację funkcji rozkładu orientacji w pogłębiony sposób. Dodatkowa opcja wykresów to interaktywność. Program po wczytaniu danych znajduje i wyświetla wartość minimalną oraz maksymalną funkcji rozkładu orientacji. Dodatkowo automatycznie wyznacza wartości siedmiu izolinii, które są obliczane w proporcjonalnych częściach zgodnie ze wzorem

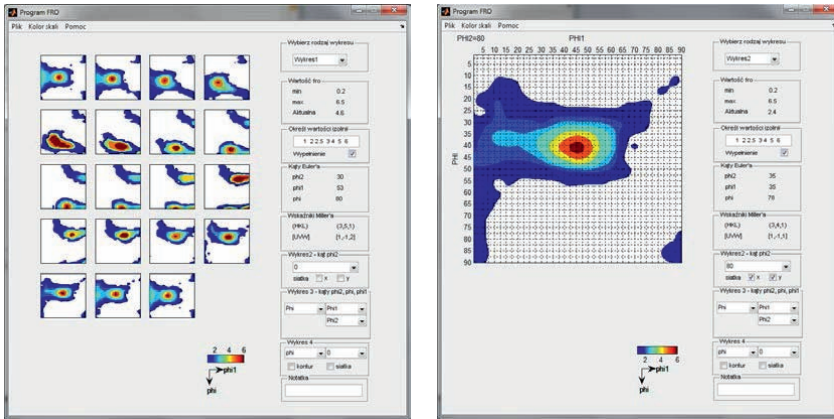
$$n_{\text{izolinia}} = \frac{\text{wartosc_maksymalna}}{7} \cdot n$$

gdzie: $n \in (0,7) \wedge n \in C$.

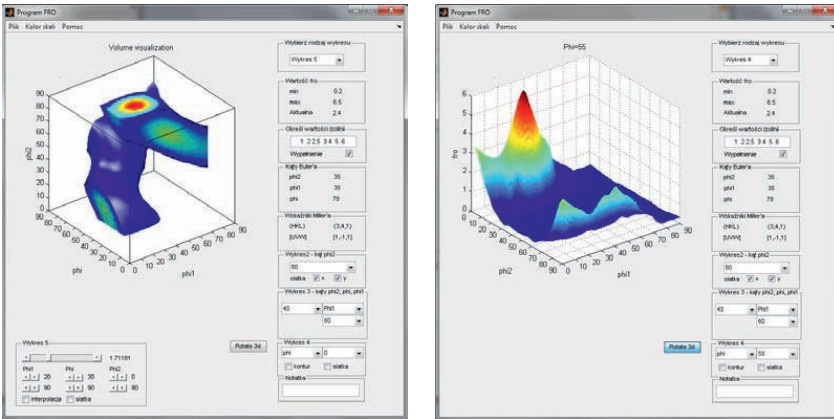
Kąty Eulera wyznaczone są z macierzy obrotu. Program wczytuje dane z pliku jako jeden zbiór o wymiarach $sz \times w - 20 \times 380$ lub 20×500 . Następnie jest on konwertowany na 19 macierzy dla zmieniającego się co 5° kąta φ_2 . Wszystkie macierze mają również wymiar 19×19 i przedstawiają rozmieszczenie wartości funkcji rozkładu dla zmieniających się co 5° kątów $\varphi_1 \times \varphi$ w zakresie $(0^\circ \div 0^\circ)$.

Konwersja kątów Eulera na wskaźniki Millera przeprowadzona została zgodnie z zależnościami opracowanymi przez A.D. Rollett, P. Kalu [4].

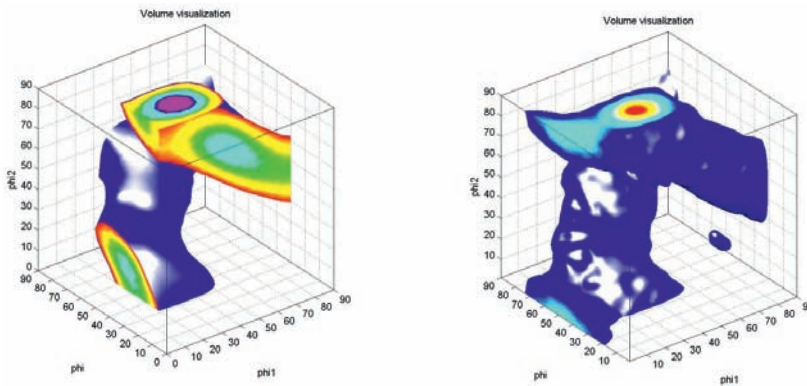
Przykłady wizualizacji funkcji rozkładu orientacji wykonanych przez program „FRO” przedstawiono na rysunkach 2, 3 i 4.



Rys. 2. Wyniki programu „FRO” – wizualizacja funkcji rozkładu orientacji dla opcji wykres 1 oraz wykres 2



Rys. 3. Wynik programu „FRO” – wizualizacja funkcji rozkładu orientacji dla opcji wykres 5 oraz wykres 4



Rys. 4. Wyniki programu „FRO” dla opcji wykres 5. Wartość FRO w trójwymiarowej przestrzeni kątów Eulera reprezentowana jest za pomocą kolorów

Charakterystyka programu Matlab

Matlab jest programem komputerowym przeznaczonym do wykonywania obliczeń naukowych i inżynierskich oraz do tworzenia symulacji komputerowych. Umożliwia przeprowadzenie obliczeń matematycznych, analizy numerycznej, wizualizacji otrzymanych wyników oraz tworzenie algorytmów i programów. Posiada wbudowany interpreter skryptowy. Podstawową strukturą danych w Matlabie jest macierz.

Zastosowana wersja Matlabu – R2007b dostępna jest na różnych platformach sprzętowych oraz systemowych: Linux (x86, x86_64), Mac (PPC, Intel), Sun SPARC Solaris i Windows (2000, XP, Vista, 7).

Główne funkcje Matlabu [6]:

- obliczenia numeryczne do szybkiego generowania wyników,
- grafika do wizualizacji i analizy danych,
- interaktywny język i środowisko programistyczne,
- narzędzia do budowy własnego GUI,
- integracja z zewnętrznymi aplikacjami składającymi się z komponentów C, C++, Fortran, Java, COM, Excel,
- import danych z plików i urządzeń zewnętrznych (dodatkowo dostęp do baz danych i kolejnych urządzeń),
- konwersja aplikacji MATLAB-a na C i C++ przy użyciu kompilatora.

Nazwa programu Matlab powstała z połączenia początkowych liter angielskich słów matrix laboratory, ponieważ początkowo program ten był używany wyłącznie do numerycznych obliczeń macierzowych. Obecnie program cechuje duża liczba funkcji bibliotecznych oraz duże możliwości rozbudowy przez użytkownika za pomocą pisania własnych funkcji. Matlab posiada własny język programowania. Pozwala to na pisanie w pełni funkcjonalnych programów działających w środowisku Matlabu. Matlab umożliwia rysowanie dwu- i trójwymiarowych wykresów funkcji. Umożliwia również pobieranie danych z zewnętrznych urządzeń przez porty w celu ich dalszej obróbki.

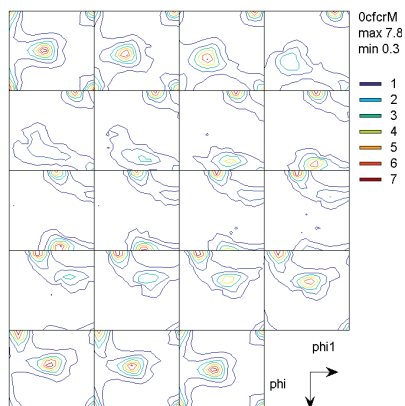
Przykład analizy funkcji rozkładu orientacji krystalitów walcowanego na zimno austenitu – przy zastosowaniu programu „FRO”

Do analizy tekstury austenitu wykorzystano znane [7] wartości funkcji rozkładu orientacji krystalitów wyznaczonych dla różnego stopnia zgniotu. Wartości izolinii zostały przypisane indywidualnie, tak aby najlepiej odwzorować na rysunku analizowaną funkcję rozkładu orientacji. Funkcja rozkładu orientacji przedstawiana jest na każdym z rysunków w 19 przekrojach dla zmieniającego się w zakresie ($0^\circ \div 90^\circ$) kąta φ_2 .

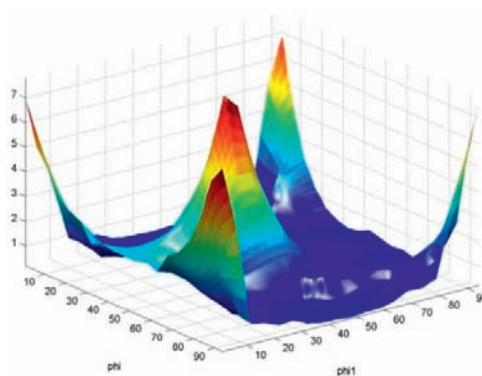
Austenit niepoddany zgniotowi

Na rysunku 8 widać, iż maksymalna wartość funkcji rozkładu orientacji (FRO) krystalitów dla austenitu dla 0% stopnia zgniotu wynosi 7,8. Do zobrazowania FRO posłużono się 7 izoliniami o wartościach: 1, 2, 3, 4, 5, 6 oraz 7.

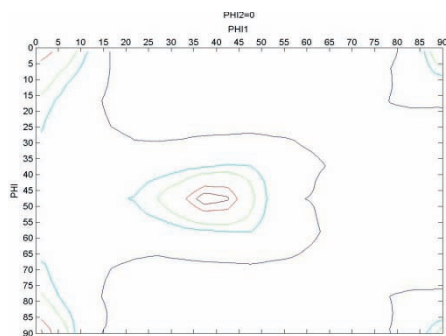
Dla początkowych oraz końcowych wartości kąta φ_2 można stwierdzić centryczne ułożenie (w stosunku do kątów φ_1 raz φ) wysokich wartości FRO. Natomiast dla kąta φ_2 zawartego w przedziale $150 \div 700$ można stwierdzić, że na kolejnych przekrojach maksymalne wartości FRO występują dla zerowej wartości kąta φ (rys. 5, 6, 7).



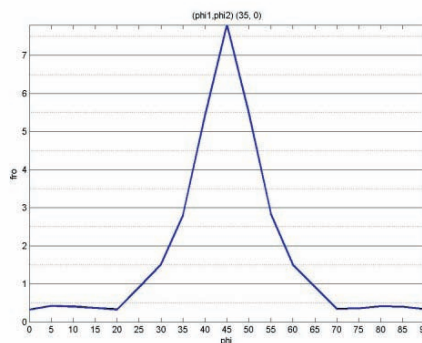
Rys. 5. Przedstawienie FRO krystalitów dla austenitu dla 0% stopnia zgniotu



Rys. 6. Rozkład FRO dla austenitu niepoddanego zgniotowi. Rozkład dla $\varphi_2=0^\circ$. Opcja wykres 4



Rys. 7. Rozkład FRO dla austenitu niepoddanego zgniotowi. Rozkład dla $\varphi_2=0^\circ$. Opcja wykres 2 – contour



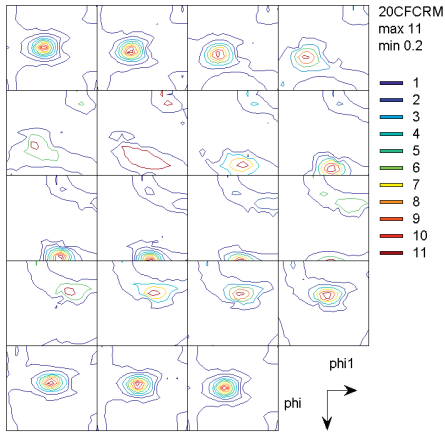
Rys. 8. Rozkład FRO dla austenitu niepoddanego zgniotowi. Rozkład dla (φ_1, φ_2) (35,0). Opcja wykres 3 – plot

Wartość maksymalna FRO dla badanego austenitu występuje dla $\varphi_1, \Phi, \varphi_2$: 35, 0, 45 (rys. 8) i wynosi 7.8. Oznacza to, że preferowana jest orientacja $(0 \ 1 \ 1)$ $[2 \ 1 \ 1]$.

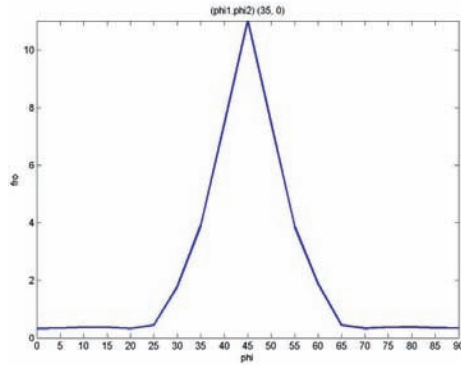
Austenit poddany 20% zgniotowi

Maksymalna wartość FRO przy zgnioście 20% (rys. 9 i 10) wynosi 11.0. Aby zobrazować FRO, posłużono się 11 izoliniami. FRO dla początkowych wartości kąta

φ_2 posiada dwie wartości gęstości orientacji. Dla kątów φ_2 w zakresie: $45 \div 75$ FRO austenitu posiada duże wartości, dochodzące do 7.0.



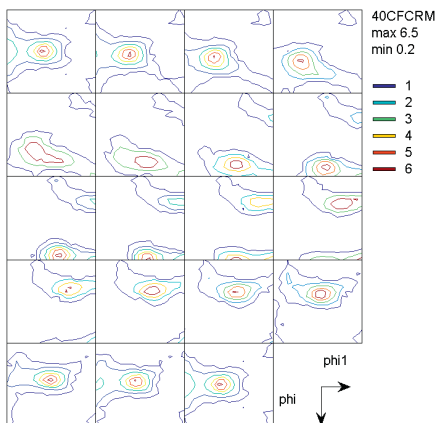
Rys. 9. Przedstawienie funkcji rozkładu orientacji krystalitów dla austenitu dla 20% stopnia zgniotu [8]



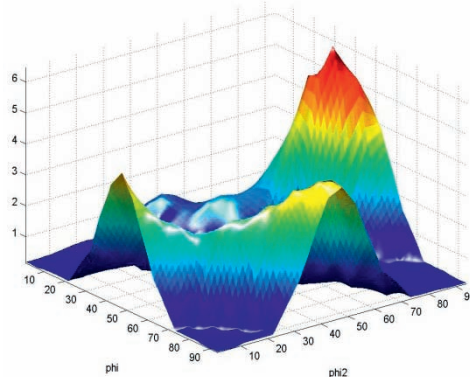
Rys. 10. Rozkład FRO dla austenitu poddanego 20% zgniotowi. Rozkład dla (ϕ_1, ϕ_2) (35,0). Opcja wykres 3 – plot

Austenit poddany 40% zgniotowi

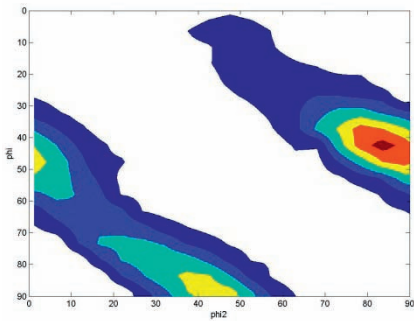
Do zobrazowania FRO (rys. 11, 12, 13 oraz 14) badanego materiału wybrano 6 izolinii o wartościach 1, 2, 3, 4, 5, 6. Duże zagęszczenie wysokich wartości FRO występuje dla początkowych i końcowych wartości kąta φ_2 : $0^0, 5^0, 85^0, 90^0$. Wartość maksymalna FRO wynosi 6.5 i występuje dla $\varphi_2 = 0^0$.



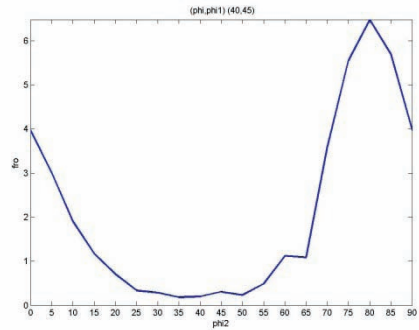
Rys. 11. Rozkład FRO dla austenitu poddanego 40% zgniotowi [8]



Rys. 12. Rozkład FRO dla austenitu poddanego 40% zgniotowi. Rozkład dla $\phi_1=45^0$. Opcja wykres 4.



Rys. 13. Rozkład FRO dla austenitu poddanego 40% zgniotowi. Rozkład FRO dla $\phi_1=45^\circ$. Opcja wykres 2 – contour



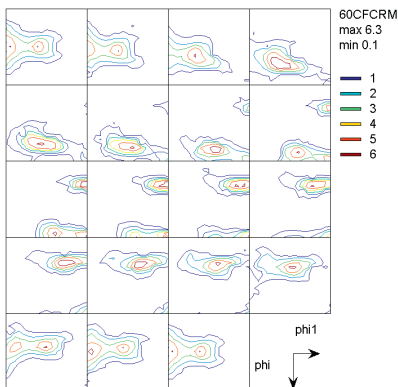
Rys. 14. Rozkład FRO dla austenitu poddanego 40% zgniotowi. Rozkład dla $(\phi, \phi_1)(40^\circ, 45^\circ)$. Opcja wykres 3 – plot

Wartość maksymalna FRO dla badanego austenitu występuje dla ϕ_1, Φ, ϕ_2 : 35, 45, 0 (rys.14) i wynosi 6.4. Odpowiada to orientacji $(0\ 1\ 1) [2\ 1\ 1]$.

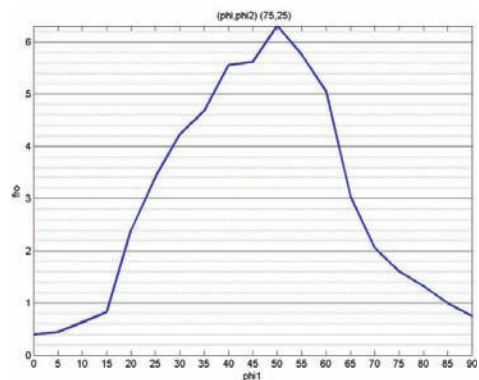
Po analizie siatki wykresów wyraźnie widać „rozmycie” wokół orientacji $(1\ 1\ 0) [1\ 1\ 2]$ charakterystycznej dla walcowanego na zimno austenitu.

Austenit poddany 60% zgniotowi

Do zobrazowania FRO (rys. 15 i 16) badanego materiału wybrano 6 izolinii o wartościach 1, 2, 3, 4, 5, 6. Duże zagęszczenie wysokich wartości FRO występuje dla początkowych i końcowych wartości kąta ϕ_2 ($0^\circ, 5^\circ, 85^\circ, 90^\circ$). Wartość maksymalna FRO wynosi 6.3 i występuje dla $\phi_2 = 25^\circ$.



Rys. 15. Rozkład FRO dla austenitu poddanego 60% zgniotowi [8]. Opcja wykres 1

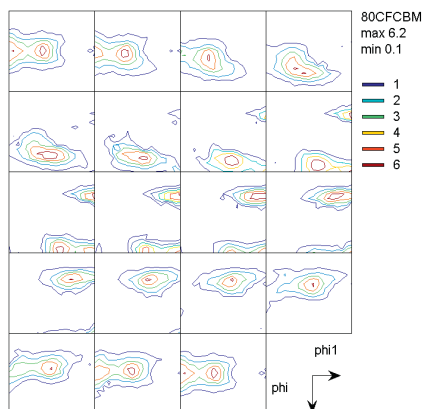


Rys. 16. Rozkład FRO dla (ϕ, ϕ_2) ($75^\circ, 25^\circ$). Opcja wykres 3 – plot

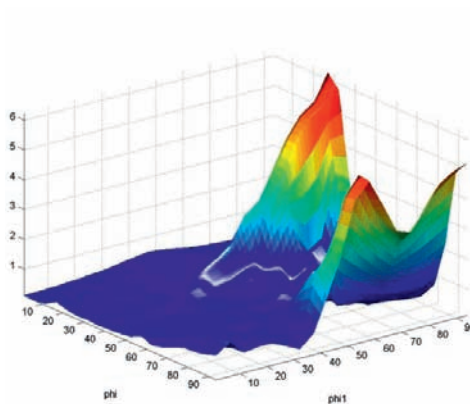
Maksymalna wartość FRO równa 6.3 wystąpiła dla $\phi_2 = 25^\circ$. Po analizie siatki wykresów FRO dla zmieniającego się co 5° kąta ϕ_2 można stwierdzić, iż występuje duże „rozmycie” FRO wokół orientacji $\begin{pmatrix} 2 & 3 & 1 \\ \bar{1} & 1 & \bar{2} \end{pmatrix}$.

Austenit poddany 80% zgniotowi

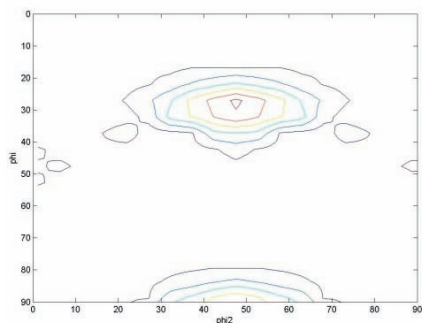
Do zobrazowania FRO (rys. 17, 18, 19 oraz 20) badanego materiału wybrano 6 izolinii o wartości 1, 2, 3, 4, 5, 6. Duże zagęszczenie wysokich wartości FRO występuje dla początkowych i końcowych wartości kąta φ_2 : 0° , 5° , 85° , 90° . Wartość maksymalna FRO wynosi 6.2 i występuje dla $\varphi_2 = 25^\circ$.



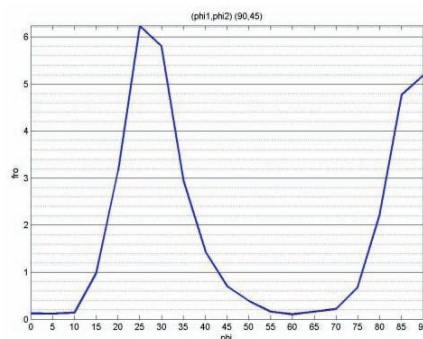
Rys. 17. Rozkład FRO dla austenitu poddanego 80% zgniotowi [8].



Rys. 18. Rozkład FRO zawierający maksymalną wartość dla kąta $\phi_2 = 45^\circ$.



Rys. 19. Rozkład FRO [8] zawierający maksymalną wartość dla kąta $\phi_1 = 90^\circ$. Opcja wykres 2 – contour



Rys. 20. Rozkład FRO zawierający maksimum rozpatrywane w funkcji kąta ϕ dla kątów (ϕ_1, ϕ_2) $(90^\circ, 45^\circ)$. Opcja wykres 3 – plot

Podsumowanie

Przedstawiono przykładowe wyniki analizy tekstury krystalograficznej na podstawie wizualizacji funkcji rozkładu orientacji krystalitów przy zastosowaniu opracowanego programu komputerowego „FRO”.

Wykorzystano funkcje wyznaczone dla próbek walcowanych na zimno (zgniot: 20%, 40%, 60%, 80%) blach stali ferrytyczno-austenitycznej o strukturze duplex (UR45N). Analizie poddano funkcje rozkładu orientacji w fazie austenitycznej.

Zastosowanie programu „FRO” umożliwiło wykonanie szeregu wykresów, na podstawie których określono charakterystyczne cechy analizowanej tekstury, co potwierdza przydatność programu.

Literatura

- [1] Bunge H.J., *Texture Analysis in Materials Sciences*, Butterworths, London 1982.
- [2] Jura J., *Metalurgia i odlewnictwo – Zastosowanie funkcji modelowych w ilościowej analizie tekstur metali o sieci regularnej*, 1994.
- [3] Przybyłowicz K., *Metaloznawstwo*, 1992.
- [4] Głowacka M. (red.), *Metaloznawstwo*, Politechnika Gdańska 1996.
- [5] <http://www.ftj.agh.edu.pl/~wierzbanowski/Tekstura.pdf>
- [6] Matthies S., *On the Reproducibility of the Orientation Distribution Function of the Texture Samples from Pole Figures (Ghost Phenomena)*, 1979
- [7] www.kdm.wcss.wroc.pl/wiki/index.php/Matlab
- [8] Jura J., *Modelowe przedstawienia i analiza rozkładów orientacji oraz różnic orientacji w materiale jedno- i dwufazowym*, PAN 2008.

Analysis of the orientation distribution function of crystallites

Abstract

An example of the texture analysis based on the graphical representations of the orientation distribution function has been presented in the paper.

Key words: Crystallite texture analysis, orientation distribution visualization, Matlab

Marcin Świątek, Jerzy Jura
UP – Kraków
Instytut Techniki