

DOI: [10.7242/1999-6691/2019.12.1.7](https://doi.org/10.7242/1999-6691/2019.12.1.7)

УДК 51-72

ИССЛЕДОВАНИЕ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИХ ТЕКСТУР ПРИ МНОГОУРОВНЕВОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ДЕФОРМИРОВАНИЯ ПОЛИКРИСТАЛЛОВ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДОВ КЛАСТЕРНОГО АНАЛИЗА

К.В. Остапович, П.В. Трусов

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Российская Федерация

Рассмотрена возможность применения аппарата кластерного анализа для описания и исследования кристаллографических текстур по результатам расчетов ориентаций решеток кристаллитов (зерен, субзерен), полученным с использованием многоуровневых упруговязкопластических моделей поликристаллических материалов. Поставлена задача кластеризации текстуры, состоящая в разбиении заданной выборки ориентаций кристаллической решетки на непересекающиеся подмножества с элементами, в некотором смысле близкими между собой. Для формализации указанного понятия близости в пространстве ориентаций введено специальное псевдометрическое расстояние, учитывающее поворотную симметрию решетки. Данное расстояние индуцируется естественной римановой метрикой и определяет наименьший угол поворота, связывающего симметрически эквивалентные ориентации аргументов. Сформулирован эвристический алгоритм решения поставленной задачи, основанный на итерировании некоторых распространенных методов кластеризации. Для поликристаллического агрегата предложенный подход позволяет установить области пространства ориентаций с повышенной плотностью элементов, а также вычислить для таких областей некоторые эффективные характеристики. Разработанная процедура включает в себя следующие стадии: разделение выборки ориентаций на слои; кластеризацию по достижимости (в смысле транзитивного замыкания принятого критерия близости ориентаций); так называемую медоидную кластеризацию; расщепление слабо локализованных кластеров. Приложение созданной методики кластеризации продемонстрировано на примерах текстур простого сдвига и одноосного сжатия, полученных при моделировании неупругого деформирования представительного объема поликристаллической меди. Найденные локальные однопараметрические аппроксимации заданного вида для плотностей распределения углов между ориентациями и медоидами (условными центрами) соответствующих им кластеров, а также оценены их статистические значимости на равновероятностных интервалах.

Ключевые слова: кристаллографическая текстура, упруго-вязко-пластическая модель, кластерный анализ, алгоритм, простой сдвиг, одноосное сжатие, поликристаллическая медь

INVESTIGATION OF CRYSTALLOGRAPHIC TEXTURES IN MULTI-LEVEL MODELS FOR POLYCRYSTALLINE DEFORMATION USING CLUSTERING TECHNIQUES

K.V. Ostapovich and P.V. Trusov

Perm National Research Polytechnic University, Perm, Russian Federation

The feasibility of applying clustering techniques to describe and investigate crystallographic textures by using numerical results simulated for crystallite (grain, subgrain) lattice orientations with the help of multi-level crystal elasto-visco-plasticity models is considered. The texture clustering problem is stated as partitioning a given sample of crystal lattice orientations into disjoint subsets of elements which are close to each other in a certain sense. To formalize this concept of closeness, a special pseudo-metric distance taking into account rotational lattice symmetry is introduced in the space of orientations. This distance being induced by the natural Riemann metrics determines the minimal rotation angle between the symmetrically equivalent orientations of the arguments. A heuristic algorithm based on alternating well-known clustering methods is formulated to solve the stated problem. The proposed approach allows identifying, for a polycrystalline aggregate, the regions in the space of orientations with the higher density of elements, as well as evaluating some of their effective characteristics for such regions. The developed procedure includes the following stages: dividing a sample of orientations into layers; clustering by reachability (in the sense of the transitive closure of the closeness criterion being adopted for orientations); the so-called medoid-based clustering; splitting weakly localized clusters. The application of the presented clustering technique is demonstrated by considering simple shear and axial compression textures obtained through modeling the inelastic deformation of a representative volume element for polycrystalline copper. In the examined cases, local one-parameter approximations of a given form are found for the density of distribution of the angles between orientations and medoids (conditional centers) of the related clusters. Also, the statistical significance of these approximations is tested using equiprobable intervals.

Keywords: crystallographic texture, crystal elasto-visco-plastic model, clustering, algorithm, simple shear, one-axial compression, polycrystalline copper

1. Введение

Поликристаллические металлы и сплавы состоят из анизотропных элементов с решеточной структурой — кристаллитов, от распределения ориентаций которых в значительной мере зависят макроскопические свойства таких материалов. При интенсивном неупругом деформировании кристаллиты могут испытывать повороты, приводящие к неоднородности в распределении ориентаций, то есть появлению той или иной кристаллографической текстуры. Анализ данной текстуры играет важную роль в задачах материаловедения, связанных с описанием взаимосвязи между эволюцией микроструктуры и изменением макроскопических свойств поликристаллов.

Важную роль играет возможность выделения относительно небольшого набора характеристик распределения, дающих как можно более полное представление об исследуемой текстуре. Актуальные проблемы, связанные с проектированием функциональных поликристаллических материалов, предполагают решение обратных краевых задач с использованием моделей, учитывающих строение этих материалов на различных масштабных уровнях. В общем случае данные вопросы приводят к необходимости многократного интегрирования уравнений, описывающих эволюцию внутренней структуры при термомеханических воздействиях в различных технологических процессах. В связи с тем, что подобные задачи, как правило, оказываются весьма ресурсоемкими, возникает потребность в создании как моделей, так и соответствующих алгоритмических реализаций, обладающих физической адекватностью в сочетании с повышенной вычислительной эффективностью. Возможным подходом к их построению является редуцирование («упаковка») информации о состоянии субструктуры мезоуровня, в том числе о распределении ориентаций. Предлагаемая статья посвящена формулировке алгоритма, позволяющего представлять произвольную текстуру в виде совокупности локализованных скоплений ориентаций с оцененными эффективными характеристиками (такими как, например, размеры и интенсивности). Отметим, что подобное уменьшение размерности данных вызывает отдельный интерес при анализе взаимосвязи между текстурой поликристалла и его свойствами на макроуровне.

Количественное описание текстуры чаще всего опирается на методы многоуровневого моделирования [1–6] и использует явное или неявное рассмотрение плотности (функции) распределения ориентаций в представительном объеме поликристалла или его статистической модели — поликристаллическом агрегате. Указанная плотность (или, в более общем случае, соответствующая ей мера) определяет объемные доли кристаллитов в заданных ориентационных конфигурациях. Для ее численного воспроизведения в различных задачах так или иначе прибегают к редуцирующим приемам. Наиболее распространенные из них включают в себя: разложение Фурье по обобщенным сферическим гармоникам [7, 8], собственное ортогональное разложение [9] и его упрощенный аналог — метод кадров [10], метод текстурных компонент [11–18], а также всевозможные способы, основанные на явной дискретизации ориентационного пространства [19–21]. Многие из отмеченных подходов и модификаций нашли широкое приложение в текстурном анализе при вычислении плотности распределения ориентаций путем обращения полюсных фигур, получаемых дифракционными методами. Для цели редуцированного описания текстуры данные приемы в том или ином виде использовались в работах [22–29], связанных с моделированием текстурообразования и эволюции текстурозависимых свойств.

Подход, развиваемый в настоящей статье, состоит в привлечении аппарата кластерного анализа [30] для идентификации областей ориентационного пространства, характеризующихся повышенной плотностью распределения [31, 32]. В рамках такого подхода описание текстуры предлагается осуществлять в терминах параметров локализованных скоплений ориентаций. Формулируемый алгоритм кластеризации оперирует выборкой ориентаций кристаллитов, входящих в поликристаллический агрегат, и разбивает ее на непересекающиеся подмножества — кластеры, элементы которых являются близкими между собой (в математически формализуемом смысле). В явном виде указанная выборка может быть построена, например, с помощью многоуровневых моделей поликристаллов [33–35], на совместное применение с которыми и ориентируется разрабатываемая процедура. В качестве примеров приведены результаты кластеризации текстур простого сдвига и одноосного сжатия, полученных в численных экспериментах с использованием указанных моделей.

2. Кластеризация кристаллографической текстуры

Следует заметить, что практически любая кластеризация опирается на понятие близости различных элементов данных. В обсуждаемом случае в роли сравниваемых объектов выступают ориентации кристаллической решетки, геометрическая симметрия которой должна быть принята во внимание. С этой целью на ориентационном пространстве вводится специальное псевдометрическое расстояние, инвариантное к преобразованиям поворотной симметрии решетки (напомним, что, в отличие от метрического, подобное расстояние не предполагает невырожденности на паре несопадающих аргументов).

Будем рассматривать однофазный поликристаллический агрегат, состоящий из M кристаллитов одинакового объема с заданным типом решетки и известными ориентациями. Задачей является осуществление кластеризации обозначенного множества ориентаций с учетом геометрической симметрии их решетки.

2.1. Матрица разориентации

Пространство всевозможных ориентаций изоморфно группе O^+ вращений трехмерного евклидова пространства над полем действительных чисел. Пусть $S^+ \subset O^+$ — поворотная группа симметрии заданного типа решетки. Тогда произвольная ориентация $o \in O^+$ геометрически неотличима от ориентаций so ,

$s \in S^+$ (другими словами, симметрически эквивалентна им). Для представления элементов указанных групп в свою очередь могут использоваться единичные кватернионы. Через $\text{Re } o$ и $\text{Im } o$ обозначим действительную и векторную (мнимую) части кватерниона, соответствующего ориентации $o \in O^+$. Тогда псевдометрическое расстояние между заданными ориентациями $o_1, o_2 \in O^+$, определяющее меру их взаимной близости, может быть выражено как

$$d[o_1, o_2] = 2 \min_{s \in S^+} \arccos \left| \text{Re } s (\text{Re } o_1 \text{Re } o_2 + \text{Im } o_1 \cdot \text{Im } o_2) - \text{Im } s \cdot (\text{Re } o_1 \text{Im } o_2 - \text{Re } o_2 \text{Im } o_1 + \text{Im } o_1 \times \text{Im } o_2) \right|. \quad (1)$$

Введенное расстояние порождается естественной римановой метрикой и по своему геометрическому смыслу есть наименьший из углов всех поворотов, переводящих ориентацию o_1 в ориентацию, симметрически эквивалентную o_2 . Таким образом, равенство $d[o_1, o_2] = 0$ имеет место тогда и только тогда, когда o_1 и o_2 симметрически эквивалентны.

В связи с топологической сложностью рассматриваемого пространства весьма продуктивным видится применение разновидности кластеризации, основанной на рассмотрении и сравнении между собой ориентаций исключительно заданного поликристаллического агрегата. Обозначим такие ориентации как $o^{(m)}$, $m \in \overline{1; M}$, ассоциируя индекс m с порядковым номером соответствующего кристаллита. В рамках принимаемого подхода удобно определить так называемую матрицу D разориентации (с размерностью $M \times M$):

$$D_{mm} = d[o^{(m)}, o^{(n)}].$$

Введенная матрица является симметричной и имеет нулевую главную диагональ. Следует отметить, что данный объект содержит в себе практически всю информацию, необходимую для применения абстрактных методов кластеризации достаточно широкого класса. При этом для построения такой матрицы может использоваться псевдометрическое расстояние, отличное от задаваемого формулой (1).

2.2. Алгоритм кластеризации

В общем случае кристаллографических текстур априори количество кластеров неизвестно, а возможность их выделения носит весьма условный характер. Для получения адекватного разбиения необходимо связать положения кластеров с областями повышенной плотности распределения ориентаций. Подходящие под эту задачу алгоритмы основываются на группировке достаточно близких между собой ориентаций или их окрестностей в отдельные подмножества. Недостаток подобных приемов — чувствительность к «шуму», создаваемому разреженными ориентациями. Для его преодоления предлагается последовательно исключать из выборки ориентаций слои, представленные объединениями ориентационных псевдометрических окрестностей с наиболее высокой плотностью распределения. В дальнейшем кластеризуется каждый получаемый таким образом слой. Отметим, что на различных слоях данные операции являются независимыми и, следовательно, могут выполняться параллельно.

Пусть $M_{l\varepsilon}^{(m)}$ — число ориентаций, принадлежащих выборке после исключения $(l-1)$ -го слоя и находящихся в псевдометрической ε -окрестности ориентации $o^{(m)}$. В рамках описываемого подхода формирование l -го слоя осуществляется путем задания некоторой нижней границы $\underline{M}_{l\varepsilon}$ и объединения содержимого окрестностей тех ориентаций, для которых $M_{l\varepsilon}^{(m)} \geq \underline{M}_{l\varepsilon}$. Заметим, что в общем случае такой слой состоит из ориентаций, как удовлетворяющих, так и не удовлетворяющих записанному неравенству; отвечающие им множества будем называть ядром и периферией. Все ориентации полученного слоя далее рассматриваются как вершины графа связности. Под связностью при этом понимается близость ориентаций или их окрестностей. В простейшем случае ориентации $o^{(m)}$ и $o^{(n)}$ считаются образующими ребро, если $D_{mn} \leq \varepsilon$. Максимальные связные компоненты данного графа трактуются как кластеры начального приближения.

Выбор конкретных значений $\underline{M}_{l\varepsilon}$ ограничен диапазонами изменения плотностей распределения внутри окрестностей ориентаций слоев и зависит от исследуемой кристаллографической текстуры. Для их определения может быть привлечен анализ гистограмм распределений величин $M_{l\varepsilon}^{(m)}$ на различных слоях по ориентациям соответствующих выборок. Используемый при этом радиус ε псевдометрических окрестностей представляется целесообразным назначать таким образом, чтобы число ориентаций в них было статистически приемлемым для введения локальной плотности распределения (за исключением,

по крайней мере, небольшой части окрестностей с сильно разреженными ориентациями). В частном случае равномерного распределения доля ориентаций, попадающих в ε -окрестность, при условии отсутствия в ней симметрически эквивалентных элементов (что всегда достижимо при выборе не слишком больших значений ε), определяется с помощью равенства:

$$\mu_0 = \frac{S}{\pi}(\varepsilon - \sin \varepsilon),$$

где S — мощность группы S^+ .

Заметим, что предложенный алгоритм не предполагает удовлетворения ограничений на форму и размеры получаемых кластеров, а также не позволяет эффективно контролировать их количество. Вместе с тем для цели редуцированного описания текстуры является важным выделение достаточно локализованных кластеров с явно выраженными центрами. В связи с этим требуется выполнение дополнительной процедуры, позволяющей идентифицировать внутри кластеров точки сосредоточения ориентаций и, при необходимости, перестраивающей разбиение вокруг них. Для решения данного вопроса в настоящей работе на каждом слое проводится так называемая медоидная кластеризация.

Под медоидом множества понимается такой его элемент, среднее расстояние от которого до других элементов этого же множества является минимальным. Процесс медоидной кластеризации ориентаций на некотором l -м слое при фиксированном числе K_l выделяемых кластеров можно трактовать как реализацию эвристической стратегии дискретной оптимизации, состоящей в поиске номеров m_k , $k \in \overline{1; K_l}$ ориентаций-медоидов и дискретного отображения $c_l[\cdot]$, ставящего номеру ориентации в соответствие номер ее кластера, которые минимизируют значение критерия:

$$J_l^{K_l} [m_{1}, \dots, m_{K_l}, c_l[\cdot]] = \sum_{k=1}^{K_l} \sum_{m \in c_l^{-1}[k]} D_{mm_k}. \quad (2)$$

Минимизация при этом осуществляется итеративно, путем установления медоидов текущих кластеров и последующего переотнесения ориентаций рассматриваемого слоя к кластерам с ближайшими полученными медоидами. Хотя в общем случае такой способ приводит только к субоптимальному (неулучшаемому при дальнейших итерациях) решению, выбор начального приближения с помощью алгоритма, описанного ранее, на практике показывает удовлетворительные результаты. Следует отметить, что в литературе встречаются и другие приемы, основанные на уменьшении величины критерия (2), в частности, альтернативная стратегия [36] или комбинаторный метод [37] глобальной минимизации. С целью получения разбиения, в котором каждый кластер характеризуется необходимой степенью локализации распределения, определяемой (например) критическим средним псевдометрическим отклонением $\bar{\delta}^{\text{avg}}$ ориентаций от медоида, изложенная процедура итерируется с предварительной заменой на каждом шаге медоида наименее локализованного кластера на пару его наиболее удаленных друг от друга ориентаций.

Сформулированный алгоритм кластеризации позволяет свести статистическое описание неоднородного распределения ориентаций к указанию медоидов его кластеров и назначению им различных эффективных характеристик (таких как мощности соответствующих кластеров, средние псевдометрические отклонения, и других, в зависимости от требуемой степени детализации). Поскольку в случае выраженных текстур удается выделить, как правило, относительно небольшое (по сравнению с числом наблюдаемых ориентаций) количество кластеров, подобное редуцирование может оказаться весьма эффективным.

3. Некоторые примеры

Для проверки возможностей сформулированного алгоритма кластеризации были проанализированы кристаллографические текстуры [38], полученные в результате расчетов с использованием двухуровневых моделей неупругого деформирования поликристаллов [32–34]. Примеры входных, выходных и промежуточных данных реализованной аналитической процедуры приводятся далее.

Рассматривались кинематические нагружения простым сдвигом и одноосным сжатием представительных объемов поликристаллической меди, обладающей гранецентрированной кубической решеткой. Расчеты проводились на поликристаллическом агрегате, состоящем из $M = 1000$ кристаллитов одинакового объема с ориентациями, изначально распределенными по равномерному случайному закону.

Кластеризация осуществлялась при $\varepsilon = \bar{\delta}^{\text{avg}} = 0,158$ ($\mu_0 = 0,005$). В обнаруженных кластерах были найдены локальные аппроксимации плотностей распределения углов между ориентациями и соответствующими медоидами, а также оценены их статистические значимости.

Для k -го кластера l -го слоя аппроксимирующая функция распределения задавалась в виде:

$$d_{lk}[\delta] = \begin{cases} a[\alpha_{lk}] e^{-\alpha_{lk}\delta} (1 - \cos \delta), & \delta \in [0; \pi]; \\ 0, & \delta \notin [0; \pi]. \end{cases} \quad (3)$$

Здесь: $a[\alpha_{lk}] = \left(\int_0^\pi e^{-\alpha_{lk}\delta} (1 - \cos \delta) d\delta \right)^{-1}$ — нормирующий коэффициент; $\alpha_{lk} \geq 0$ — параметр,

характеризующий рассеяние ориентаций кластера относительно междоиды. Отметим, что приведенному соотношению, в частности, удовлетворяет распределение ориентаций в кластере, плотность которого пропорциональна обратной экспоненциальной зависимости от угла поворота до междоиды, а все направления соответствующих осей являются равновероятными.

Для вычисления параметра α_{lk} применялся метод максимального правдоподобия, реализация которого сводилась к решению алгебраического уравнения:

$$\frac{\pi - 4\alpha_{lk} + 2\pi\alpha_{lk}^2}{1 + 2\alpha_{lk}^2 - e^{\pi\alpha_{lk}}} + \frac{1 + 3\alpha_{lk}^2}{\alpha_{lk} + \alpha_{lk}^3} = \delta_{lk}^{\text{avg}},$$

где δ_{lk}^{avg} — выборочное среднее псевдометрических отклонений в обозначенном кластере (в данном случае без ограничения общности можно считать, что при включении ориентации в кластер выбирается

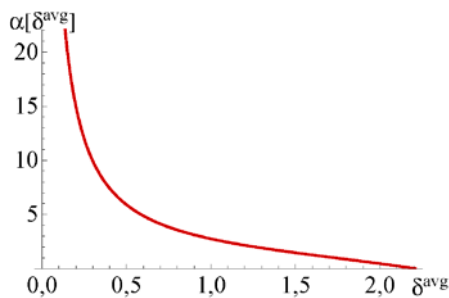


Рис. 1. К оценке параметра распределения углов между ориентациями и междоиды кластера методом максимального правдоподобия

симметрически эквивалентная ей, образующая с соответствующим междоидом наименьший угол). Записанное уравнение имеет единственное решение и определяет зависимость $\alpha_{lk} = \alpha[\delta_{lk}^{\text{avg}}]$, графическое изображение которой показано на рисунке 1.

Проверка статистической значимости аппроксимированных плотностей осуществлялась с помощью критерия «хи-квадрат» при заданном уровне 0,01 [39]. Область ненулевых значений функций разбивалась на 8 равновероятных интервалов; для оценки достигнутой значимости использовалась квантиль указанного распределения с 6 степенями свободы.

В следующих подразделах входные и выходные данные процедуры кластеризации изображаются на прямых и редуцированных (характеризующих мощности кластеров) полюсных фигурах. Заметим, что в данной статье такие фигуры служат только средством визуализации, так как сформулированный алгоритм применяется непосредственно к ориентациям решетки, а не стереографическим проекциям ее направлений. Для указания характерных осей нагружения вводится условно-неподвижная лабораторная система координат с нормированными попарно ортогональными базисными векторами $\mathbf{I}_i, i \in \overline{1,3}$.

3.1. Простой сдвиг

При моделировании простого сдвига макроскопический градиент места задавался в виде:

$$\mathbf{F} = \mathbf{I}_1\mathbf{I}_1 + \mathbf{I}_2\mathbf{I}_2 + \mathbf{I}_3\mathbf{I}_3 + \lambda\mathbf{I}_2\mathbf{I}_3,$$

где λ — параметр, характеризующий скорость деформирования, t — время. Нагружение производилось до момента времени $t = 1600 \text{ c}$ при постоянном значении $\lambda = 0,001 \text{ c}^{-1}$. Прямая полюсная фигура, соответствующая полученной в результате выборке ориентаций, изображена на рисунке 2а. Здесь и далее в подразделе проектирование на полюсных фигурах осуществляется с конца вектора \mathbf{I}_3 (на плоскость сдвига) для плоскостей семейств $\{100\}$. На редуцированной полюсной фигуре 2б отмечены междоиды кластеров нескольких первых (наиболее плотных) слоев, найденные с помощью разработанной процедуры.

Промежуточные стадии проведенной кластеризации отображены на рисунке 3. Гистограммы на рисунке 3а характеризуют распределение псевдометрических окрестностей по числу содержащихся в них ориентаций для различных выборок, полученных при последовательных исключениях слоев

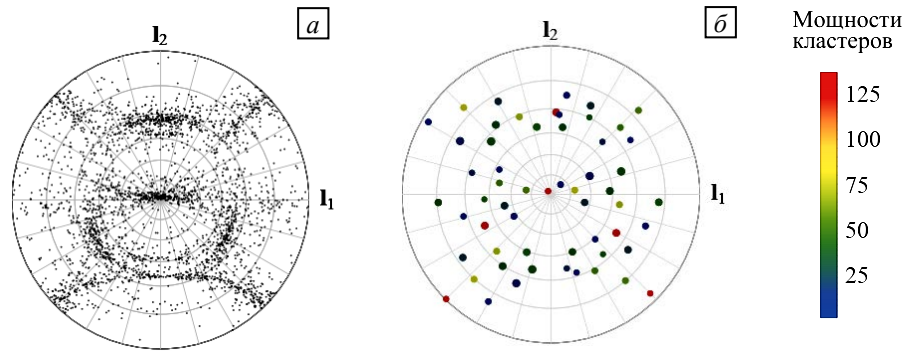


Рис. 2. Полусные фигуры для текстуры простого сдвига: прямая полусная фигура для ориентаций исходной выборки (а); редуцированная полусная фигура для медоидов идентифицированных кластеров (б)

(гистограмма для первого слоя соответствует исходной выборке). С их помощью в каждой выборке были определены ориентации, обладающие наиболее плотными окрестностями. Такие ориентации составляли ядро извлекаемого из выборки слоя. Полный слой формировался путем присоединения всех элементов, располагающихся внутри окрестностей ориентаций данного ядра. На прямых полусных фигурах рисунка 3б цветом отмечены направления для ориентаций, принадлежащих выделенным слоям. В ходе кластеризации указанных слоев получены наборы медоидов, изображенные на редуцированных полусных фигурах рисунка 3в.

В результатах рассматриваются только 6 первых слоев исходной выборки ориентаций. Остальные ориентации (13,6% от общего числа в указанной выборке) характеризуются высокой разреженностью, обуславливающей обнаружение для них алгоритмом большого числа вырожденных кластеров, состоящих из одиночных элементов. Анализ их совокупности здесь опущен. Для проверки адекватности воспроизведения агрегирующих свойств медоидами и эффективными параметрами приведенных слоев была оценена сверху разность откликов в анизотропном законе Гука при использовании для осреднения тензора упругих констант всей выборки ориентаций и ее редуцированного (медоидного) представления. Величина полученного отклонения составила менее 10%.

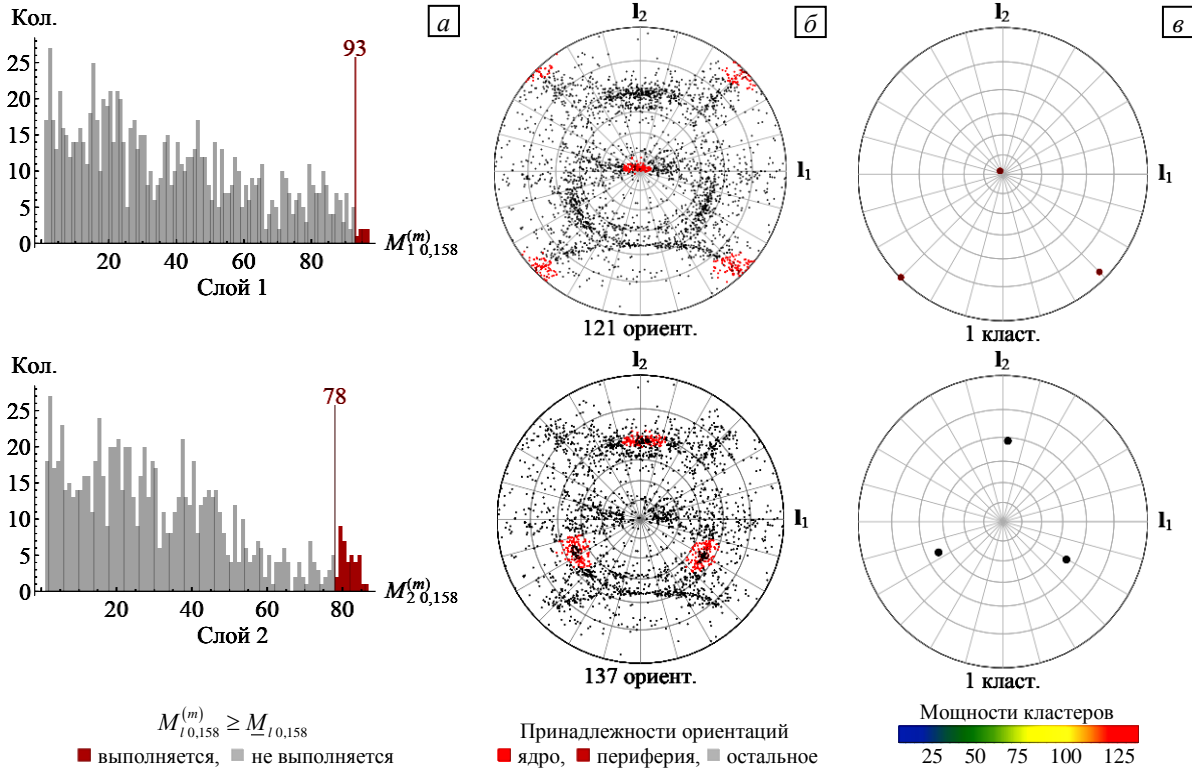


Рис. 3. Кластеризация текстуры простого сдвига на шести различных слоях ($l \in \overline{1;6}$): гистограммы распределения количества $M_{l,\epsilon}^{(m)}$, $m \in \overline{1;M}$ ориентаций в псевдометрических ϵ -окрестностях ($\epsilon = 0,158$) промежуточных выборок (а); прямые полусные фигуры для ориентаций выделенных слоев (б); редуцированные полусные фигуры для медоидов кластеров, идентифицированных в выделенных слоях (в)

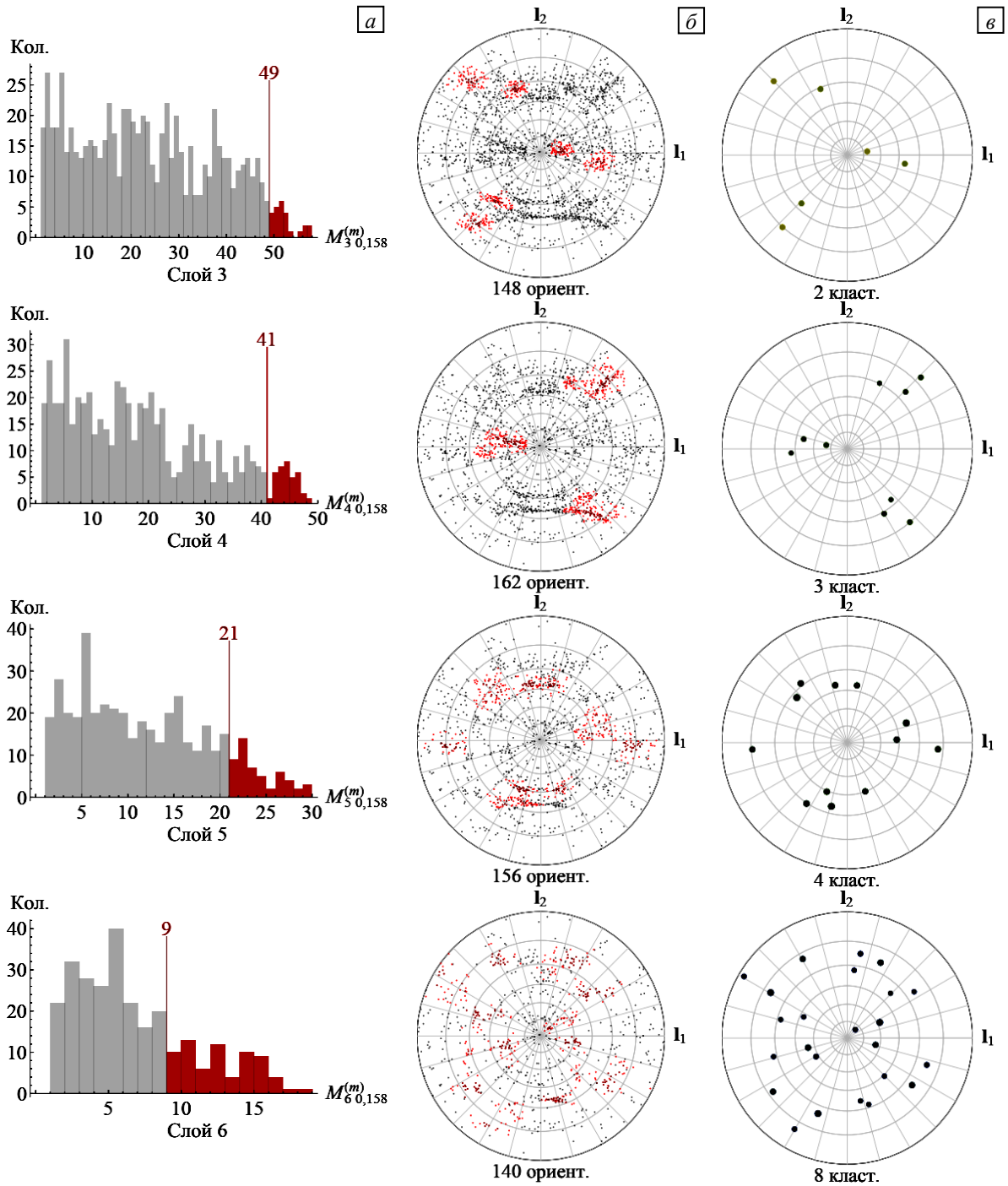


Рис. 3. Продолжение

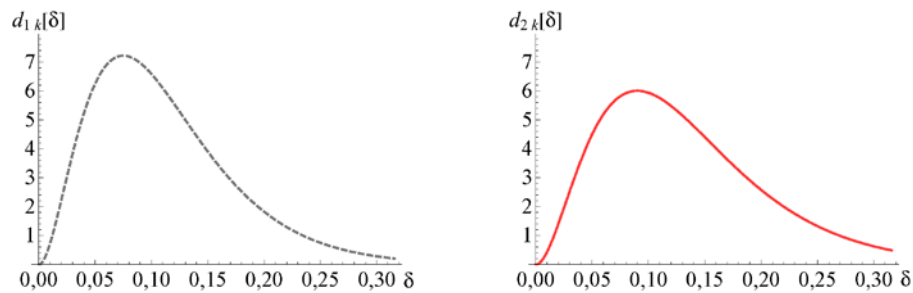


Рис. 4. К оценке плотности $d_{ik} = d_{ik}[\delta]$, $k \in \overline{1; K_l}$ распределения углов δ между ориентациями, входящими в кластер, и соответствующими меанодами на шести различных слоях ($l \in \overline{1; 6}$) для текстуры простого сдвига: подтвержденные (—) и неподтвержденные (---) статистические значимости

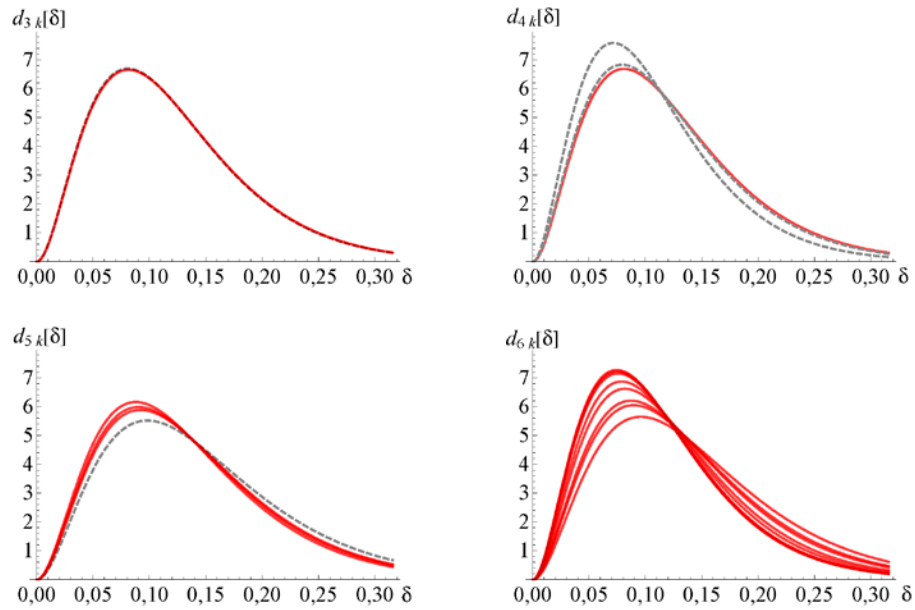


Рис. 4. Продолжение

Аппроксимирующие плотности распределения углов между ориентациями, входящими в кластеры, и отвечающими им меаноиды показаны на рисунке 4. По результатам видно, что большая часть вычисленных плотностей удовлетворяет закону в форме (3).

3.2. Одноосное сжатие

Одноосное сжатие моделировалось с использованием макроскопического градиента места, записанного в виде:

$$\mathbf{F} = e^{0.5\lambda t} (\mathbf{I}_1 \mathbf{I}_1 + \mathbf{I}_2 \mathbf{I}_2) + e^{-\lambda t} \mathbf{I}_3 \mathbf{I}_3.$$

Деформирование производилось до момента времени $t = 1600 \text{ c}$ при постоянном значении $\lambda = 0,001 \text{ c}^{-1}$. Прямая полюсная фигура, соответствующая полученной выборке ориентаций, изображена на рисунке 5а. В текущем подразделе проецирование осуществляется с конца вектора \mathbf{I}_3 (вдоль направления сжатия) для плоскостей семейств $\{100\}$. Результаты кластеризации представлены на редуцированной полюсной фигуре 5б. Детализация данных результатов на различных слоях приведена на рисунке 6.

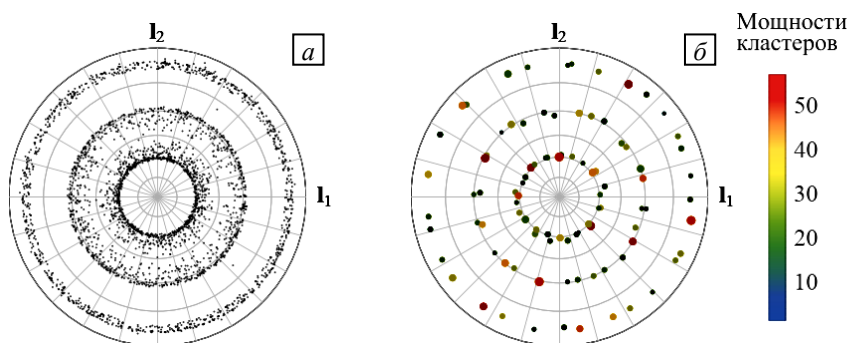


Рис. 5. Полюсные фигуры для текстуры одноосного сжатия: прямая полюсная фигура для ориентаций исходной выборки (а); редуцированная полюсная фигура для меаноидов идентифицированных кластеров (б)

Как видно из гистограммы для всей выборки (Рис. 6а, слой 1), здесь значения плотности распределения ориентаций локализованы в более узком по сравнению с предыдущим случаем диапазоне, что говорит о большей степени выраженности анализируемой текстуры. Для ее кластеризации было выделено 5 слоев. Оставшаяся часть ориентаций (8,1% от общего числа в выборке) из рассмотрения исключалась. В этом случае относительная погрешность, возникающая в макроскопическом анизотропном законе Гука при редуцировании распределения ориентаций меаноидным аналогом, оказалась менее 5%.

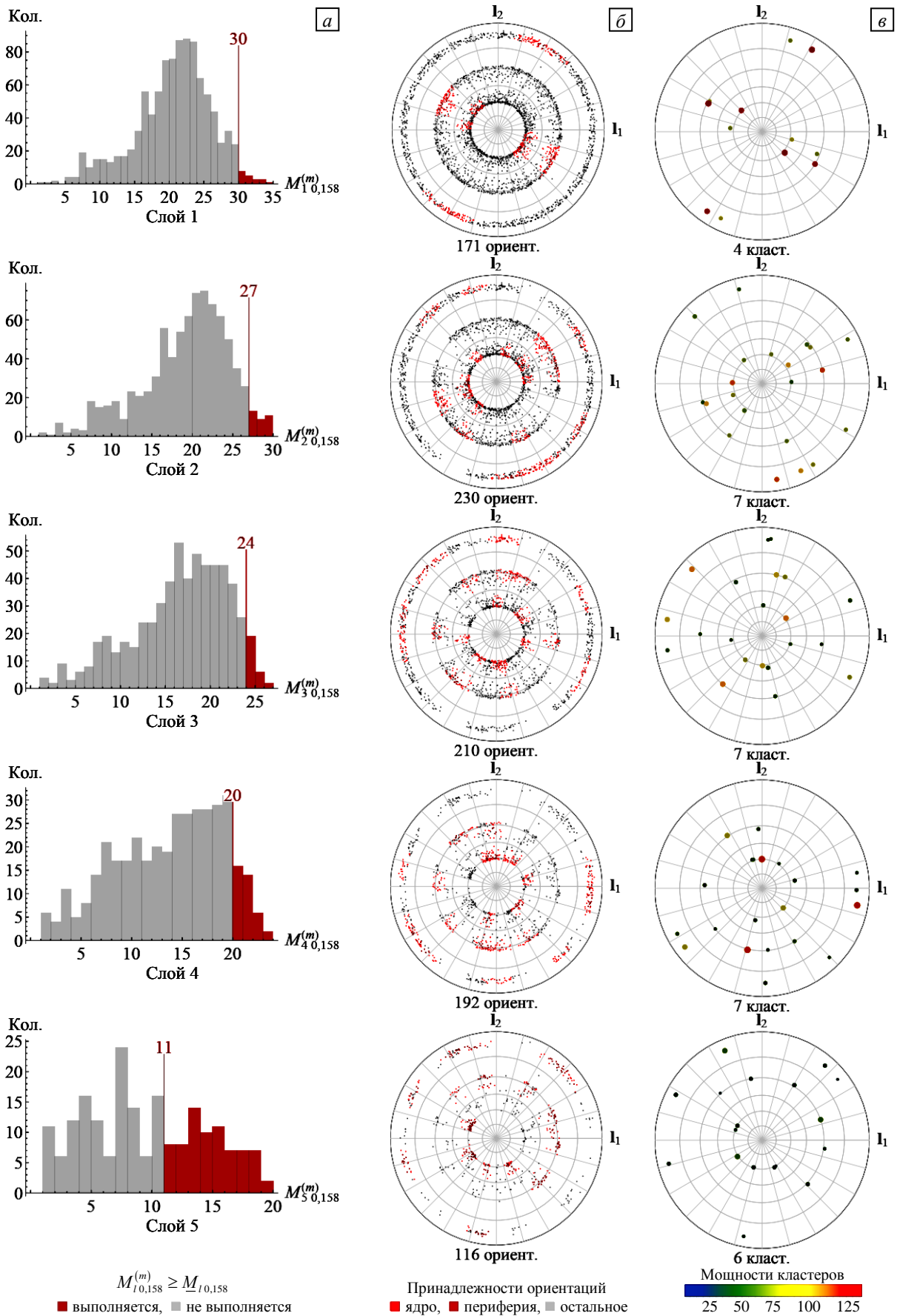


Рис. 6. Кластеризация текстуры одноосного сжатия на пяти различных слоях ($l \in \overline{1;5}$): гистограммы распределения количеств $M_{l,\varepsilon}^{(m)}$, $m \in \overline{1;M}$ ориентаций в псевдометрических ε -окрестностях ($\varepsilon = 0,158$) промежуточных выборок (а); прямые полюсные фигуры для ориентаций выделенных слоев (б); редуцированные полюсные фигуры для медоидов кластеров, идентифицированных в выделенных слоях (в)

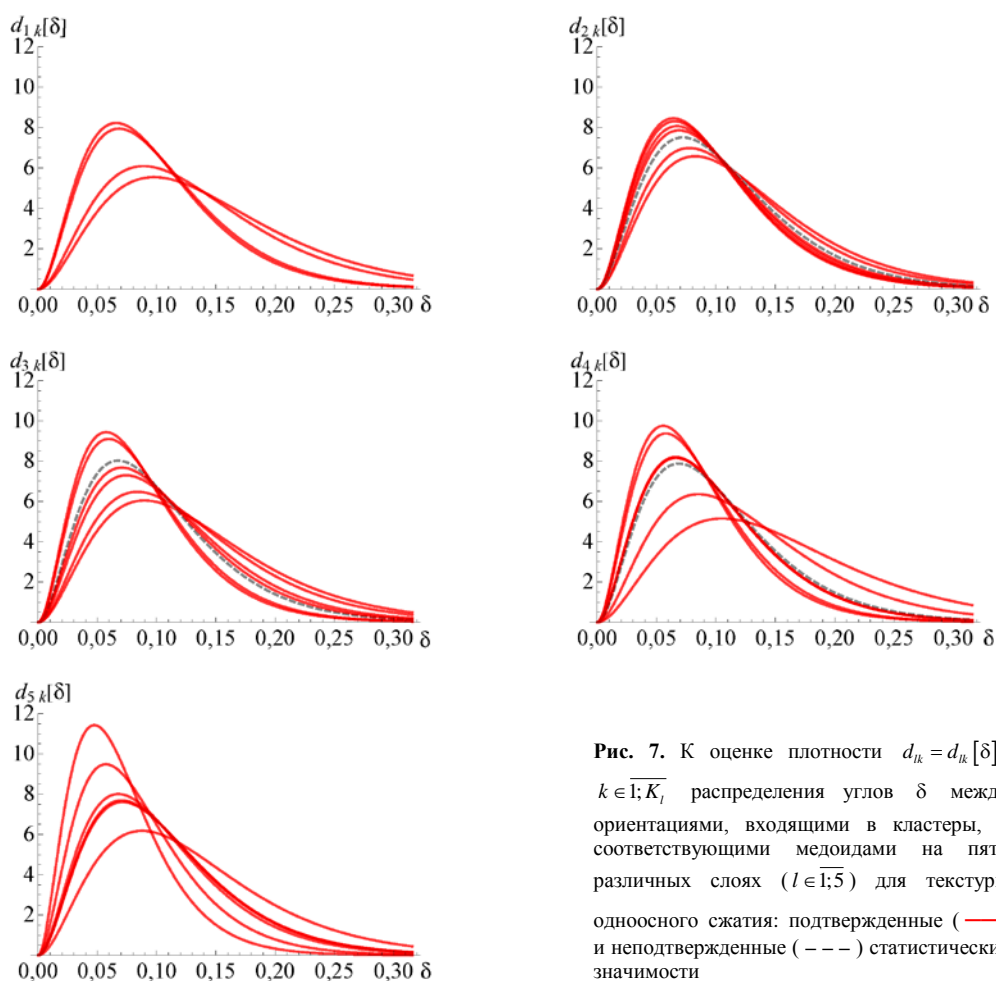


Рис. 7. К оценке плотности $d_k = d_k[\delta]$, $k \in \overline{1; K_l}$ распределения углов δ между ориентациями, входящими в кластеры, и соответствующими меоидами на пяти различных слоях ($l \in \overline{1; 5}$) для текстуры одноосного сжатия: подтвержденные (—) и неподтвержденные (---) статистические значимости

На рисунке 7 показаны оцененные аппроксимации плотностей распределения углов между ориентациями, входящими в кластеры, и отвечающими им меоидами. Полученные результаты позволяют говорить о соответствии (за небольшим исключением) данных аппроксимаций закону в форме (3).

4. Заключение

В статье исследована возможность привлечения аппарата кластеризации для анализа кристаллографических текстур с использованием многоуровневых моделей поликристаллов. Сформулирована задача кластеризации текстуры; предложен и обоснован многостадийный итеративный алгоритм ее решения, опирающийся на понятие близости ориентаций кристаллической решетки, учитывающее ее геометрическую симметрию. Рассмотрено приложение созданного алгоритма к идентификации характерных текстурных компонент в численных экспериментах по неупругому деформированию представительного объема поликристаллической меди посредством простого сдвига и одноосного сжатия.

Разработанная методика позволяет редуцировать описание произвольной текстуры на основе меоидов и эффективных характеристик соответствующих им кластеров ориентаций. Предварительные оценки, установленные для приведенных в статье примеров, демонстрируют возможность адекватного воспроизведения агрегирующих свойств в рамках подобного подхода.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 17-41-590694-р_а, 17-01-00379-а).

Литература

1. *Busso E.P.* Multiscale approaches: From the nanomechanics to the micromechanics // Computational and experimental mechanics of advanced materials / Ed. V.V. Silberschmidt. Springer: Vienna, 2010. P. 141-165. [DOI](#)
2. *Luscher D.J., McDowell D.L.* An extended multiscale principle of virtual velocities approach for evolving microstructure // Procedia Eng. 2009. Vol. 1. P. 117-121. [DOI](#)
3. *Luscher D.J., McDowell D.L., Bronkhorst C.A.* A second gradient theoretical framework for hierarchical multiscale

- modeling of materials // Int. J. Plast. 2010. Vol. 26. P. 1248-1275. [DOI](#)
4. Трусов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые модели моно- и поликристаллов. Статистические модели // Физ. мезомех. 2011. Т. 14, № 4. С. 17-28. [DOI](#)
 5. Трусов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые модели моно- и поликристаллов. Прямые модели // Физ. мезомех., 2011. Т. 14, № 5. С. 5-30. [DOI](#)
 6. Trusov P.V., Shveykin A.I., Kondratev N.S. Multilevel metal models: formulation for large displacements gradients // Nanomechanics Science and Technology: An International Journal. 2017. Vol. 8. P. 133-166. [DOI](#)
 7. Bunge H.-J. Texture analysis in materials science. Mathematical Methods. Oxford: Butterworth-Heinemann, 1969. 614 p. [DOI](#)
 8. Theoretical methods of texture analysis / Ed. H.J. Bunge. Oberursel: DGM-Informationsgesellschaft-Verlag, 1987. 450 p.
 9. Holmes P., Lumley J.L., Berkooz G., Rowley C.W. Turbulence, coherent structures, dynamical systems and symmetry. 2nd ed. Cambridge University Press, 2012. 402 p. [DOI](#)
 10. Sirovich L. Turbulence and the dynamics of coherent structures. I. Coherent structures // Quart. Appl. Math. 1987. Vol. 45. P. 561-571. [DOI](#)
 11. Raabe D., Roters F. Using texture components in crystal plasticity finite element simulations // Int. J. Plast. 2004. Vol. 20. P. 339-361. [DOI](#)
 12. Lücke K., Pospiech J., Virnich K.H., Jura J. On the problem of the reproduction of the true orientation distribution from pole figures // Acta Metall. 1981. Vol. 29. P. 167-185. [DOI](#)
 13. Lücke K., Jura J., Pospiech J., Hirsch J.R. On the presentation of orientation distribution functions by model functions // Zeitschrift für Metallkunde. 1986. Vol. 77. P. 312-321. URL: https://www.researchgate.net/publication/292009181_ON_THE_PRESENTATION_OF_ORIENTATION_DISTRIBUTION_FUNCTIONS_BY_MODEL_FUNCTIONS (Дата обращения 25.03.2019)
 14. Matthies S. Form effects in the description of the orientation distribution function (ODF) of texturized materials by model components // Phys. Status Solidi B. 1982. Vol. 112. P. 705-716. [DOI](#)
 15. Helming K., Eschner Th. A new approach to texture analysis of multiphase materials using a texture component model // Cryst. Technol. 1990. Vol. 25, no. 8. P. K203-K208. [DOI](#)
 16. Helming K., Schwarzer R.A., Rauschenbach B., Geier S., Leiss B., Wenk H., Ullemeier K., Heinitz J. Texture estimates by means of components // Zeitschrift für Metallkunde. 1994. Vol. 85. P. 545-553.
 17. Eschner Th., Funderberger J.-J. Application of anisotropic texture components // Textures and Microstructures. 1997. Vol. 28, no. 3-4. P. 181-195. [DOI](#)
 18. Ivanova T.M., Savyolova T.I., Sypchenko M.V. The modified component method for calculation of orientation distribution function from pole figures // Inverse Problems in Science and Engineering. 2010. Vol. 18, no. 1. P. 163-171. [DOI](#)
 19. Ruer D., Baro R. Vectorial method of texture analysis of cubic lattice polycrystalline material // J. Appl. Cryst. 1977. Vol. 10. P. 458-464. [DOI](#)
 20. Matthies S. The ODF-spectrum a new and comprehensive characterization of the degree of anisotropy of orientation distributions // Materials Science Forum. 2005. Vol. 495-497. P. 331-338. [DOI](#)
 21. Kumar A., Dawson P.R. The simulation of texture evolution with finite elements over orientation space I. Development // Comput. Meth. Appl. Mech. Eng. 1996. Vol. 130. P. 227-246. [DOI](#)
 22. Adams B.L., Henrie A., Henrie B., Lyon M., Kalidindi S.R., Garmestani H. Microstructure-sensitive design of a compliant beam // J. Mech. Phys. Solids. 2001. Vol. 49. P. 1639-1663. [DOI](#)
 23. Kalidindi S.R., Houskamp J.R., Lyons M., Adams B.L. Microstructure sensitive design of an orthotropic plate subjected to tensile load // Int. J. Plast. 2004. Vol. 20. P. 1561-1575. [DOI](#)
 24. Kalidindi S.R., Houskamp J., Proust G., Duvvuru H. Microstructure Sensitive design with first order homogenization theories and finite element codes // Materials Science Forum. 2005. Vol. 495-497. P. 23-30. [DOI](#)
 25. Brahme A., Winning M., Raabe D. Prediction of cold rolling texture of steels using an Artificial Neural Network // Comput. Mater. Sci. 2009. Vol. 46. P. 800-804. [DOI](#)
 26. Sundararaghavan V., Zabarar N. On the synergy between texture classification and deformation process sequence selection for the control of texture-dependent properties // Acta Mater. 2005. Vol. 53. P. 1015-1027. [DOI](#)
 27. Sundararaghavan V., Zabarar N. A statistical learning approach for the design of polycrystalline materials // Stat. Anal. Data Min. 2009. Vol. 1. P. 306-321. [DOI](#)
 28. Acharjee S., Zabarar N. A proper orthogonal decomposition approach to microstructure model reduction in Rodrigues space with applications to optimal control of microstructure-sensitive properties // Acta Mater. 2003. Vol. 51. P. 5627-5646. [DOI](#)
 29. Ganapathysubramanian S., Zabarar N. Design across length scales: a reduced-order model of polycrystal plasticity for the control of microstructure-sensitive material properties // Comput. Meth. Appl. Mech. Eng. 2004. Vol. 193. P. 5017-5034. [DOI](#)
 30. Hastie T., Tibshirani R., Friedman J. The elements of statistical learning: Data mining, inference, and prediction. New York: Springer-Verlag, 2009. 767 p. [DOI](#)
 31. Остапович К.В., Трусов П.В. Идентификация компонент кристаллографических текстур с использованием многоуровневых моделей поликристаллов и кластерного анализа // XII междунар. конф. «Механика, ресурс и диагностика материалов и конструкций»: сб. материалов, 21-25 мая 2018 г., Екатеринбург. С. 271. URL: <http://www.imach.uran.ru/conf/conf2018/Sbornik2018.pdf> Дата обращения 26.03.2019)
 32. Мокрова С.М., Петров Р.П., Милч В.Н. Определение структуры поликристаллических материалов с помощью алгоритма объектно-векторного представления плоскостей отражения и визуализация результатов в пространстве Родрига // Вестн. Удмуртск. ун-та. Мат. Мех. Компьют. науки. 2016. Т. 26, № 3. С. 336-344. [DOI](#)
 33. Трусов П.В., Швейкин А.И., Янц А.Ю. О разложении движения, независимых от выбора системы отсчета производных и определяющих соотношениях при больших градиентах перемещений: взгляд с позиций многоуровневого моделирования // Физ. мезомех. 2016. Т. 19, № 2. С. 47-65. (English version [DOI](#))
 34. Швейкин А.И., Трусов П.В. Сопоставление сформулированных в терминах актуальной и разгруженной

- конфигураций геометрически нелинейных упруговязкопластических определяющих соотношений для кристаллитов // Физ. мезомех. 2016. Т. 19, № 5. С. 48-57. (English version [DOI](#))
35. Shveykin A.I., Trusov P.V. Multilevel models of polycrystalline metals: Comparison of relations describing the rotations of crystallite lattice // *Nanomechanics Science and Technology: An International Journal*. 2019. Vol. 10. P. 1-20. [DOI](#)
 36. Kaufman L., Rousseuw P. Finding groups in data: An introduction to cluster analysis. Hoboken, New Jersey: John Wiley & Sons, 1990. 356 p. [DOI](#)
 37. Massart D.L., Plastria F., Kaufman L. Non-hierarchical clustering with MASLOC // *Pattern Recogn.* 1983. Vol. 16. P. 507-516. [DOI](#)
 38. Trusov P.V., Ostapovich K.V. On elastic symmetry identification for polycrystalline materials // *Symmetry*. 2017. Vol. 9, no. 10. 240. [DOI](#)

References

1. Busso E.P. Multiscale approaches: From the nanomechanics to the micromechanics. *Computational and experimental mechanics of advanced materials*, ed. V.V. Silberschmidt. Springer, Vienna, 2010. Pp. 141-165. [DOI](#)
2. Luscher D.J., McDowell D.L. An extended multiscale principle of virtual velocities approach for evolving microstructure. *Procedia Eng.*, 2009, vol. 1, pp. 117-121. [DOI](#)
3. Luscher D.J., McDowell D.L., Bronkhorst C.A. A second gradient theoretical framework for hierarchical multiscale modeling of materials. *Int. J. Plast.*, 2010, vol. 26, pp. 1248-1275. [DOI](#)
4. Trusov P.V., Shveykin A.I. Multilevel crystal plasticity models of single- and polycrystals. *Statistical Models. Phys. Mesomech.*, 2013, vol. 16, pp. 23-33. [DOI](#)
5. Trusov P.V., Shveykin A.I. Multilevel crystal plasticity models of single- and polycrystals. *Direct models. Phys. Mesomech.*, 2013, vol. 16, pp. 99-124. [DOI](#)
6. Trusov P.V., Shveykin A.I., Kondratev N.S. Multilevel metal models: formulation for large displacements gradients. *Nanomechanics Science and Technology: An International Journal*, 2017, vol. 8, pp. 133-166. [DOI](#)
7. Bunge H.-J. *Texture analysis in materials science. Mathematical Methods*. Oxford, Butterworth-Heinemann, 1969. 614 p. [DOI](#)
8. Theoretical methods of texture analysis, ed. H.J. Bunge. Oberursel, DGM-Informationsgesellschaft-Verlag, 1987. 450 p. DOI у этого сборника статей нет
9. Holmes P., Lumley J.L., Berkooz G., Rowley C.W. *Turbulence, coherent structures, dynamical systems and symmetry*. 2nd ed. Cambridge University Press, 2012. 402 p. [DOI](#)
10. Sirovich L. Turbulence and the dynamics of coherent structures. I. Coherent structures. *Quart. Appl. Math.*, 1987, vol. 45, pp. 561-571. [DOI](#)
11. Raabe D., Roters F. Using texture components in crystal plasticity finite element simulations. *Int. J. Plast.*, 2004, vol. 20, pp. 339-361. [DOI](#)
12. Lücke K., Pospiech J., Virnich K.H., Jura J. On the problem of the reproduction of the true orientation distribution from pole figures. *Acta Metall.*, 1981, vol. 29, pp. 167-185. [DOI](#)
13. Lücke K., Jura J., Pospiech J., Hirsch J.R. On the presentation of orientation distribution functions by model functions. *Zeitschrift für Metallkunde*, 1986, vol. 77, pp. 312-321. URL: https://www.researchgate.net/publication/292009181_ON_THE_PRESENTATION_OF_ORIENTATION_DISTRIBUTION_FUNCTIONS_BY_MODEL_FUNCTIONS (accessed 25 March 2019)
14. Matthies S. Form effects in the description of the orientation distribution function (ODF) of texturized materials by model components. *Phys. Status Solidi B*, 1982, vol. 112, pp. 705-716. [DOI](#)
15. Helming K., Eschner Th. A new approach to texture analysis of multiphase materials using a texture component model. *Cryst. Res. Technol.*, 1990, vol. 25, no. 8, pp. K203-K208. [DOI](#)
16. Helming K., Schwarzer R.A., Rauschenbach B., Geier S., Leiss B., Wenk H., Ullemeier K., Heinitz J. Texture estimates by means of components. *Zeitschrift für Metallkunde*, 1994, vol. 85, pp. 545-553.
17. Eschner Th., Fundenberger J.-J. Application of anisotropic texture components. *Textures and Microstructures*, 1997, vol. 28, no. 3-4, pp. 181-195. [DOI](#)
18. Ivanova T.M., Savyolova T.I., Sypchenko M.V. The modified component method for calculation of orientation distribution function from pole figures. *Inverse Problems in Science and Engineering*, 2010, vol. 18, no. 1, pp. 163-171. [DOI](#)
19. Ruer D., Baro R. Vectorial method of texture analysis of cubic lattice polycrystalline material. *J. Appl. Cryst.*, 1977, vol. 10, pp. 458-464. [DOI](#)
20. Matthies S. The ODF-spectrum a new and comprehensive characterization of the degree of anisotropy of orientation distributions. *Materials Science Forum*, 2005, vol. 495-497, pp. 331-338. [DOI](#)
21. Kumar A., Dawson P.R. The simulation of texture evolution with finite elements over orientation space I. Development. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 1996, vol. 130, pp. 227-246. [DOI](#)
22. Adams B.L., Henrie A., Henrie B., Lyon M., Kalidindi S.R., Garmestani H. Microstructure-sensitive design of a compliant beam. *J. Mech. Phys. Solids*, 2001, vol. 49, pp. 1639-1663. [DOI](#)
23. Kalidindi S.R., Houskamp J.R., Lyons M., Adams B.L. Microstructure sensitive design of an orthotropic plate subjected to tensile load. *Int. J. Plast.*, 2004, vol. 20, pp. 1561-1575. [DOI](#)
24. Kalidindi S.R., Houskamp J., Proust G., Duvvuru H. Microstructure Sensitive design with first order homogenization theories and finite element codes. *Materials Science Forum*, 2005, vol. 495-497, pp. 23-30. [DOI](#)
25. Brahme A., Winning M., Raabe D. Prediction of cold rolling texture of steels using an Artificial Neural Network. *Comput. Mater. Sci.*, 2009, vol. 46, pp. 800-804. [DOI](#)
26. Sundararaghavan V., Zabarav N. On the synergy between texture classification and deformation process sequence selection for the control of texture-dependent properties. *Acta Mater.*, 2005, vol. 53, pp. 1015-1027. [DOI](#)

27. Sundararaghavan V., Zabarar N. A statistical learning approach for the design of polycrystalline materials. *Stat. Anal. Data Min.*, 2009, vol. 1, pp. 306-321. [DOI](#)
28. Acharjee S., Zabarar N. A proper orthogonal decomposition approach to microstructure model reduction in Rodrigues space with applications to optimal control of microstructure-sensitive properties. *Acta Mater.*, 2003, vol. 51, pp. 5627-5646. [DOI](#)
29. Ganapathysubramanian S., Zabarar N. Design across length scales: a reduced-order model of polycrystal plasticity for the control of microstructure-sensitive material properties. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 2004, vol. 193, pp. 5017-5034. [DOI](#)
30. Hastie T., Tibshirani R., Friedman J. *The elements of statistical learning: Data mining, inference, and prediction*. New York, Springer-Verlag, 2009. 767 p. [DOI](#)
31. Ostapovich K.V., Trusov P.V. *The 12th Int. Conf. on Mechanics, resource and diagnostics of materials and structures, 21-25 May 2018, Ekaterinburg, Russian Federation*. P. 271. URL: <http://www.imach.uran.ru/conf/conf2018/Sbornik2018.pdf> (accessed 25 March 2019)
32. Mokrova S.M., Petrov R.P., Milich V.N. 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. *Vestn. Udmurtsk. Univ. Mat. Mekh. Komp. nauki*, 2016, vol. 26, no. 3, pp. 336-344. [DOI](#)
33. Trusov P.V., Shveykin A.I., Yanz A.Y. Motion decomposition, frame-independent derivatives and constitutive relations at large displacement gradients from the viewpoint of multilevel modeling. *Phys. Mesomech.*, 2017, vol. 20, pp. 357-376. [DOI](#)
34. Shveikin A.I., Trusov P.V. Correlation between geometrically nonlinear elasto-visco-plastic constitutive relations formulated in terms of the actual and unloaded configurations for crystallites. *Phys. Mesomech.*, 2018, vol. 21, pp. 193-202. [DOI](#)
35. Shveykin A.I., Trusov P.V. Multilevel models of polycrystalline metals: Comparison of relations describing the rotations of crystallite lattice. *Nanomechanics Science and Technology: An International Journal*, 2019, vol. 10, pp. 1-20. [DOI](#)
36. Kaufman L., Rousseeuw P. *Finding groups in data: An introduction to cluster analysis*. Hoboken, New Jersey, John Wiley & Sons, 1990. 356 p. [DOI](#)
37. Massart D.L., Plastria F., Kaufman L. Non-hierarchical clustering with MASLOC. *Pattern Recogn.*, 1983, vol. 16, pp. 507-516. [DOI](#)
38. Trusov P.V., Ostapovich K.V. On elastic symmetry identification for polycrystalline materials. *Symmetry*, 2017, vol. 9, no. 10, 240. [DOI](#)

Поступила в редакцию 30.11.2018; после доработки 25.12.2018; принята к опубликованию 25.12.2018

Сведения об авторах

Остапович Кирилл Вадимович, асп., Пермский национальный исследовательский политехнический университет (ПНИПУ), 614990, Пермь, Комсомольский пр., 29; e-mail: ostkirvad@gmail.com

Трусов Петр Валентинович, дфмн, проф., зав.каф., ПНИПУ; e-mail: tpv@matmod.pstu.ac.ru