

# (568) ベクトル法による結晶粒方位分布解析の問題点

新日本製鐵(株) 分析研究センター○松尾宗次、川崎宏一、  
特別基礎第一研究センター 須貝哲也

## 1. 緒言

集合組織の優先方位定量化手段として、間接的測定法である正極点図から結晶粒方位分布関数を求める際に、連続関数あるいは不連続関数による解析が実用されている。これらの手続きはいずれも、投影像からの原像の復元処理、つまり三次元の結晶粒方位分布の二次元への投影像である極点図上の極密度分布関数から、数値解析により、原像である結晶粒方位分布関数を導出するものである。

既報<sup>(1)</sup>では、著者らは不連続関数による解析であるベクトル法について、その離散系を基にした解析に附随する基本的問題点を指摘した。第一に投影変換行列の階数の退化による、「解の収束の不確定性」がある。第二に結晶粒方位空間における理想方位とその二次元写像である要素極点図との間の不完全な一対一対応関係のために、結晶粒方位空間に生ずる「不自然な非対称性」である。また復元処理に不可避である「ゴースト」の出現について実例を示した。すなわち写像変換の核(Kernel)を構成する関数、つまり零空間の写像関数により優先方位を発生させた結晶粒方位空間を極点図上に投影しても、写像空間には優先方位が生じない。

今回はさらに「解析アルゴリズムの妥当性」および「データ処理時の平滑化」など手続上の問題点について、とくに結晶粒方位分布解析の重要な目的の一つである微弱優先方位成分の検出と定量化との関連で、検討した。同様な問題意識から、最近Schaeben<sup>(2)</sup>は解の収束性を保証するために、解析アルゴリズムにおいて以下の三つの拘束条件を付け加えることを提案している。(a) 最高値のバックグラウンドレベルの設定。(b) 最小数の極大ピークの選択。(c) 可能な限り滑らかな方位分布。これらの条件は、上述の方位分布解析の目的にそぐわないことは明らかである。またこのような条件を与えることで、それに対応して解の変動するのであれば、それは逆に解の不確定性を示唆するものである。

## 2. 実験方法

ベクトル法の解析過程においてシミュレーションで各種要因の変化をあたえることにより、得られる結晶粒方位分布関数に生じる変動を調査した。原データとしては、実測極点図および結晶粒方位空間で理想方位にガウス関数の結晶粒方位分布状態を発生させたものを使用した。

## 3. 実験結果

(1) 負値の発生とその処理の影響：結晶粒方位分布関数に負値はありえない。ベクトル法では、この条件による拘束によって解の収束を保証し、またゴースト発生を妨げていると考えられている。しかし解析過程で発生した負値の取扱いには、任意性がある。通常は負値は零と置換されて、発生した負値の総和は規格化により、結晶粒方位空間内に均等に分配される。この処理方法は、いくつかの観点から変更できる。

(i) 負値の無処理：計算過程で発生した負値をそのままにして解析を続行すると、残留ベクトルの減少が顕著である。さらに極小(負)および極大(正)値ともに尖鋭化する傾向が認められる。ゴーストに相当する極大の発生は明瞭でない。したがって通常の処理法には、解析上重要な意味は見出せなかった。

(ii) バックグラウンドレベルの設定値変更：結晶粒方位関数に負値の発生する原因の一つとして、極点図測定におけるバックグラウンドレベルが不適切であったことが考えられる。そこで、最低(絶対値最大)の負値を零レベルに再設定することは合理的選択である。このような処置を逐次施しても、負値の発生は繰り返され、さらに結晶粒方位空間において優先方位の集積度と尖鋭度はともに著しく鈍化し、ランダム方位に近づく。

これらの事実は、負値の発生が「写像変換における核の存在」に基因することを示唆している。

(2) 原データの平滑化：ベクトル法ではデータの測定誤差が、直接結晶粒方位関数に持ちこたされる可能性が高い。そこで、極点図データに乱数により一定範囲の変動誤差を発生させ、その解析結果への影響を調べた。平滑化されていない場合には、結晶粒方位分布に不特定方位の極大が生じる。

## 文献

- (1) 谷誠一郎、松尾宗次、須貝哲也：鉄と鋼、68(1981), S1293.
- (2) H. Schaeben: phys. stat. sol. (b), 123(1984), p. 425.