

PÓLUSÁBRÁK KÉSZÍTÉSE SZÁMÍTÓGÉPPEL

GANGLI PÉTER*

[Beérkezett: 1973. jan. 18-án]

A szerző módszert közöl pólusábrák számítógépes kidolgozására. A lyukszalagon rögzített intenzitás adatokat két Algol program segítségével gépi úton dolgozza fel. A kész pólusábra számjegyek és szóközök formájában — tehát rajzoló berendezés használata nélkül — kerül kinyomtatásra. A módszer aránylag kis teljesítményű és kis aktív memóriaterű számítógépre előnyös.

I. Bevezetés

A polikristályos anyagokra jellemző pólussűrűségi ábra, vagy röviden pólusábra az anyag anizotrópiáját mutatja kvantitatív formában. Ennek hasznosságát itt nem kívánjuk részletezni, miután számos anizotrópiát leíró és jellemző módszer közül ez vált ismertebbé.

A szakirodalom eddig is számos pólusábrát készítő számítógépprogramról számol be [1—6]. E programok sajnálatosan mind vagy nagy teljesítményű és nagy memória kapacitású gépnek, vagy pedig ugyancsak drága rajzolóberendezéseknek és a hozzájuk tartozó különleges rajzolóprogramoknak használatát tették volna szükségessé.

Mi olyan programot kívántunk készíteni, mely egy olcsóbb és kisebb teljesítményű gépen használható. Ezzel reális lehetőséget kívántunk biztosítani, hogy e módszert mint ipari minőségellenőrző módszert rentábilisan hazánkban is alkalmazni lehessen.

A pólusábra az adott térbeli szögpozíciókhoz tartozó relatív pólussűrűséget mutatja. A szokványos pólusábra szintvonalai hasonlítanak a hegyvízrajzi térképhez: az azonos intenzitású pontokat szintvonalakkal kötik össze. Munkánkban a szintvonalak rajza helyett az osztályozott intenzitás-értékeket számjegyek formájában nyomtatjuk ki. A mért intenzitás-adatokat lyukszalagon rögzítjük, az eredményt (kidolgozott pólusábrát) ugyancsak lyukszalagon kapjuk, amit azután „Teletype” lyukszalagírógépen kiíratunk, vagy lehetőség szerint sornyomtatón nyomtatunk ki. Az ábra területét kis téglalapokra (egy leütés) osztjuk fel. A teljes pólusábrát 2 részben (2 félkör) kétszer 56 sor és soronként 90 leütés formájában kapjuk meg.

* Gangli Péter, 1122 Budapest, Maros u. 4.

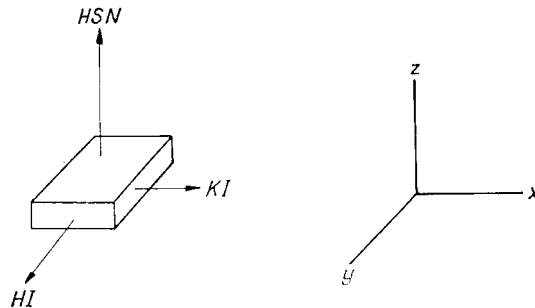
2. A mérőberendezés

A pólusábra készítéséhez szükséges adatokat Schulz-rendszerű [7] három tengelyű röntgen diffraktóméter vagy másnéven textúra goniométer segítségével kaptuk. Csak reflexiók felvételeket készítettünk, transzmissziós felvételekkel nem foglalkoztunk.

Mérőberendezésünk Philips PW 7078/00 típusú textúra goniométer. Ez a berendezés három fajta szög beállításával éri el azt, hogy a kiválasztott kristálytani síkok ((111), (100), (110), stb.) által visszavert sugárintenzitást meg tudjuk mérni.

A röntgensugárnyaláb irányára merőleges tengely körül elfordítható a próbatetttartó szerkezet és az érzékelő (GM-, vagy szcintillációs cső). A mérés kezdetekor a próbatestet úgy állítjuk be, hogy annak felszíne — hengerelt lemez esetén a hengerlési sík (HS) — egy kiválasztott Θ szöget zárjon be a röntgensugárral. A Θ szög értéke a hullámhossz és a vizsgálandó kristálytani síkok által meghatározott d rácsállandó függvénye ($\lambda = 2 d \sin \Theta$). Az érzékelőt ugyancsak úgy rögzítjük, hogy a próbatest felszínével Θ szöget zárjon be, s a beeső röntgensugárral pedig $2 \Theta <$ szöget. Tehát végső soron egy diffraktogramm kiválasztott csúcsát vizsgáljuk. Ellentétben a diffraktométeres mérésekkel, itt a Θ szöget a mérés során nem változtatjuk.

A próbatartó szerkezet feladata, hogy a próbatestet úgy forgassa és döntse, hogy minden lehetséges elhelyezkedésű sík reflektáló helyzetbe kerülhessen. Helyezzük el próbatestünket egy derékszögű koordinátarendszerben. Legyen mintánk egy hengerelt lemezpróba, ahol kiindulási helyzetben:



- $x =$ keresztirány (KI)
- $y =$ hengerlési irány (HI)
- $z =$ hengerlési sík normálisa (HSN)

A beérkező, a visszavert röntgensugár, valamint az érzékelő az xz tengelyek által meghatározott síkban van.

A mérés során a próbatestet döntjük az x -tengely körül (α döntési szög), s ezáltal a HSN és a HI, a z , illetőleg y -tengelyekhez képest ugyancsak α szöggel elfordul.

A másik forgatás (β azimut forgási szög) a HSN körül mint tengely körül történik. Kiinduláskor a HSN egybeesik a z -tengellyel, azonban az x -tengely körüli döntés (α szög) következtében a HSN is megdől, s így egyben a β -szögelfordulást biztosító tengely is.

A döntési szög (α) és az azimut forgási szög (β) változtatása folyamatos; több sebességi kombináció lehetséges: míg a β -szögbeni elfordulás 360° , addig az α szög változása $2,5^\circ$, 5° , 10° lehet. A két elfordulás eredményeképpen a különböző beállításnak megfelelően pólusábránkon háromféle sűrűségű spirálist kapunk.

3. Algoritmus

A további számításokban a következő jelöléseket használtuk fel:

α	— döntési szög
β	— azimut forgási szög
x, y	— az α és β szögpozícióknak megfelelő derékszögű koordináták
t	— a mérés időpontja ($t_0 = 0$)
n	— a mérés sorszáma ($n_0 = 0$)
m	— a mérések száma ($m = n_{\max}$)
$I(t)$	— a mért intenzitás t időpillanatban
$I(n)$	— az n -edik sorszámú intenzitás adat
a	— a texturátlan porminta intenzitás szintje
i	— az intenzitások osztályozásánál figyelembe vett intenzitás egy meghatározott x, y koordinátájú pontban (lehet $I(n)$, vagy több intenzitás érték átlaga)
j	— a texturátlan porminta intenzitás szintje alapján felállított osztályozó szint sorszáma ($0 \leq j \leq 9$)
$A(j)$	— a j sorszámú osztályozó szint értéke
q	— az i intenzitásnak megfelelő valós szám, értéke két j egész szám között található
r	— a pólusábrán ábrázolt orientációs helyzetgömb sugara.

3.1 A texturátlan porminta intenzitás szintjének megállapítása

Ez elvégezhető méréssel — ha ilyen minta rendelkezésünkre áll —, ugyanakkor azonos összetételű anyag texturás mintáján mért intenzitás adataiból pedig számítható.

Mi az utóbbira rendezkedtünk be. Ha kifogástalan texturátlan porminta áll rendelkezésünkre, úgy ez a rész kihagyható. Számításainkat a biztonság kedvéért porminta intenzitás méréssel is ellenőriztük.

Ha a teljes gömb felszínére érkező intenzitást megmérjük, s ezt elosztjuk a gömb felszínével, az egységnyi fedettséghez tartozó intenzitást kapjuk, mely egyben azonos a texturátlan minta intenzitásával.

A gömbfelület df felületrészeire eső intenzitásértékek integrálja adja az összintenzitást. Ezt osztjuk a gömb felszínével. FUCHS [8] szerint:

$$a = \frac{1}{4r^2 \pi} \iint^{\text{gömbfelület}} I(n) df. \quad (1)$$

Az $I(n)$ intenzitás a df területen érzékelt intenzitásérték. Ha az érzékelő $d\alpha$, illetőleg $d\beta$ szögértékek által meghatározott felületrészt tapogatja le, akkor

$$df = r \cdot \cos \alpha \cdot d\alpha \cdot r \cdot d\beta. \quad (2)$$

Behelyettesítve a (2) kifejezést (1)-be:

$$a = \int_{-\pi}^{\pi} \int_0^{2\pi} I(n) \cdot \cos \alpha \cdot d\alpha \cdot d\beta \quad (3)$$

A $d\alpha$ és $d\beta$ értékeket a gyakorlatban a Philips textúra goniométer beállításától függő véges $\Delta\alpha$ és $\Delta\beta$ értékekkel helyettesítjük. Az előbbiekben említett $5^\circ/360^\circ$ beállításra, ha feltételezzük, hogy a teljes gömbfelületet végig kívánjuk mérni — tehát α -90° -tól $+90^\circ$ -ig változik — akkor

$$\Delta\alpha = 5 \pi/180 \text{ rad}, \quad (4)$$

$$\Delta\beta = 72 \pi/m \text{ rad} \quad (5)$$

(Míg α értéke -90° -tól $+90^\circ$ -ig változik, addig a β szög változása 72π rad; 36 körülfordulás).

Felhasználva a (4) és (5) kifejezéseket a (3) kifejezésben szereplő kettős integranduszt egyszeri szummázássá redukálhatjuk:

$$a = \frac{5\pi(180 \cdot 72\pi)m}{4\pi} \sum_{n=1}^m I(n) \cdot \cos \alpha. \quad (6)$$

Miután α értéke az időben folyamatosan változik, minden egyes n sorozatú $I(n)$ értékhez ki tudjuk számítani a hozzátartozó α és $\cos \alpha$ értéket.

$$\alpha = n \cdot \pi \cdot 1/m \quad (7)$$

Ezek szerint

$$a = \frac{5\pi(180 \cdot 72\pi)m}{4\pi} \sum_{n=1}^m I(n) \cos\left(\frac{\pi \cdot n}{2m}\right). \quad (8)$$

Mint már említettük, ha α értékét -90° és $+90^\circ$ között változtatjuk, úgy a β szög egyidejű változtatásával az egész gömbfelületet letapogatjuk. Tulajdonképpen a félgömb is elegendő, mivel a pólussűrűség eloszlás, s így az intenzitás eloszlás is szimmetrikus a két félgömbön. Így α -át 0° -tól 90° -ig változtatva, teljes képet kapnánk. A Schulz-féle reflexiós módszert nem tanácsos $\alpha > 80^\circ$ döntésnél használni: jelentős defókuszálás lép fel.

Ezért méréseinket a $0 \div 80^\circ$ tartományban végeztük. Így az (5), (7) és (8) kifejezéseket módosítani kell:

$$\Delta\alpha = 32 \pi/m \quad (9)$$

$$\alpha = n \pi/2 \cdot 80/90 \cdot 1/m. \quad (10)$$

A letapogatott gömbfelületrész pedig $2r^2\pi(1-1/18)$. Ezek alapján a texturátlan porminta intenzitás szintje:

$$a = \frac{5\pi(180 \cdot 32\pi)m}{2\pi \cdot 17/18} \sum_{n=1}^m I(n) \cdot \cos\left(\frac{\pi \cdot n \cdot 80}{2 \cdot m \cdot 90}\right). \quad (11)$$

3.2 Az osztályozó szintek számítása

Az egyes pontokhoz tartozó intenzitást az a alapszint segítségével fellálított osztályok szerint számítjuk. Az osztályozó szintek az a szinttel arányos hatványsort képeznek:

$$A(j) = a \cdot 1,4^{(j-2)} \quad (12)$$

$$A(0) = 0,51 a$$

$$A(1) = 0,71 a$$

$$A(2) = 1,00 a$$

$$A(3) = 1,40 a$$

$$A(4) = 1,96 a$$

$$A(5) = 2,74 a$$

$$A(6) = 3,84 a \quad (13)$$

$$A(7) = 5,36 a$$

$$A(8) = 7,66 a$$

$$A(9) = 10,81 a$$

3.3 Az $I(n)$ intenzitásérték helye

Ez a pólusábrán az n sorszámhoz tartozó α és β illetőleg az ezeknek megfelelő x, y koordináták alapján állapítható meg.

Az $\alpha = \alpha(n)$ kifejezést (10)-ben megadtuk. Hasonló gondolatmenettel kapjuk:

$$\beta = n \cdot 32\pi \cdot 1/m. \quad (14)$$

Ezen szögek vetületei a pólusábra x, y koordinátaiban kifejezve:

$$x = \tan(\alpha/2) \cdot \cos \beta, \quad (15)$$

$$y = \tan(\alpha/2) \cdot \sin \beta. \quad (16)$$

A (15) és (16) egyenletek segítségével megállapítjuk, hogy az x, y koordinátapontokhoz, mely n sorszámú $I(n)$ érték — tartozik vagy nivó értékek tartoznak. A program olyan szervezésű, hogy a pólusábra minden egyes x, y pontjához hozzákeresi az odavágó intenzitás értékeket, vagy amennyiben többet talál odatartozónak, úgy az osztályozáskor az összes odaváló érték átlagát veszi figyelembe. A pontok ilyen „besűrűsödése” a spirál kezdetén a közép-pontnál van.

3.4 Az x, y koordinátákhoz hozzárendelt intenzitás

Az x, y koordinátákhoz tartozó intenzitást vagy intenzitás átlagszintet a 3.2. pontban leírt osztályozószintek valamelyikébe besoroljuk:

Legyen egy megadott x, y pontban az intenzitás értéke i . Ha

$$i \geq, \text{ akkor } A(j) = 1,4^{(j-2)} a, \quad (17)$$

$$i \leq, \text{ akkor } A(j+1) = 1,4^{(j-1)} a, \quad (18)$$

ahol $j = 1, 2, 3, \dots, 9$ egész szám. Továbbá

$$i = 1,4^{(q-2)} \cdot a \quad (19)$$

Vagyis j éppen q -nak egész számra kerekített értéke. A (19) kifejezés logaritmizált alakjából kifejezzük q -t:

$$q = \frac{\ln(i/a)}{\ln 1,4} + 2. \quad (20)$$

Az j és q közötti összefüggés az entier függvény segítségével fejezhető ki.

$$j = \text{entier}(q + 0,5). \quad (21)$$

(A entier függvény egy valós szám egész számú részét adja, s ha a valós számhoz hozzáadunk 0,5-öt, úgy pozitív szám esetén a legközelebbi egész számot kapjuk, vagyis kerekítünk).

4. A program szervezése

Jelenlegi formájában nem célszerű a feladatot egyetlen egy programban elvégezni: azonos műszerbeállítás mellett pólusábrák „nagyüzemi gyártásánál” az adott x, y koordinátákhoz mindig ugyanazon n sorszámú $I(n)$ érték vagy értékek tartoznak. Hasznosnak látszott ezt a kulcsinformációt csupán egyszer kiszámolni egy segédprogrammal, s valamilyen formában a feldolgozóprogram számára tárolni (lyukszalag). Ezzel jelentős idő és ferritmémória megtakarítást értünk el. Végző soron ez tette lehetővé, hogy feladatunkat a

rendelkezésünkre álló szerény számítógépes lehetőségek mellett rentábilisan oldjuk meg.

A főprogram feladata ezekután a 3.1; 3.2; 3.4. pontokban leírt jellemző intenzitás, osztályszint és osztályozott intenzitások számítására korlátozódik. A 3.3. pontban leírt számítást végrehajtó segédprogram felhasznált gépideje kb. tízszerese (70 perc) a főprogram átlagos futási idejének (7 perc). Az időmegtakarítás 90%-os.

A gép által elkészített pólusábra a 2. ábrán látható: mélyhúzott Al csésze aljáról készített (111) felvétel pólusábrája. Szeretnénk megjegyezni, hogy a 3.1. számítását a texturátlan porminta intenzitás mérésével is ellenőriztük, s a mért és számított értékek jó egyezést mutattak (2%-os eltérés):

$$a_{\text{mért}} = 104 \text{ rel. int. egys.}$$

$$a_{\text{szám}} = 106 \text{ rel. int. egys.}$$

A programokat Algol programnyelven írtuk. A gépi számításokat a Budapesti Műszaki Egyetem Villamosmérnöki Kar Számítástechnikai Központja Odra-1204 számítógépén végeztük. Az Odra-1204 16 K (16324 szó) ferritmémória és 128 K mágnesdob kapacitással rendelkezik. Nagy előnye, hogy gépideje olcsó (700 Ft/óra). A feladat végrehajtási ideje 7 perc. Ezzel feldolgozási módszerünk a pólusábra készítés egyik olcsó formájának tekinthető (kb. 82 Ft).

Köszönetnyilvánítás

A szerző ezúton kíván köszönetet mondani Dr. Prohászka János professzornak, a Villamosipari Anyagtechnológia Tanszék tanszékvezető egyetemi tanárának, a munkához nyújtott segítségért.

IRODALOM

1. JONES, JR. W.: *Advances in X-ray Analysis* 6(1962)223.
2. HECKLER, A. J.—ELIAS, J. A.—WOODS, A. P.: *Trans AIME* 239 (1967), 239
3. LOVE, G. R.: *Trans. AIME*, 242 (1968), 746
4. MONTGOMERY, G. L.: *Trans. AIME* 242 (1968), 762
5. ALTY, J. L.: *J. Appl. Phys.* 39 (1968), 4189
6. HOLLAND, J. R.—ENDLER, N.—POEER, W.: *Advances in X-ray Analysis* 4 (1961), 74
7. SCHULZ, L. G.: *J. Appl. Phys.* 20 (1949), 1030
8. FUCHS E.: Lemezpróbák texturavizsgálata, Vasipari Kutató Intézet 10—2—116/67, Fém-tani Osztály, 1967.

Bestimmung von Polfiguren mit einem Rechner. Der Verfasser gibt ein Verfahren für die Bestimmung von Polkurven mittels eines Digitalrechners bekannt, wobei die auf einem Lochstreifen festgehaltenen Intensitätsangaben mit Hilfe von zwei ALGOL Programmen verarbeitet werden. Die fertige Polkurve wird in der Form von Ziffern und Spatien — also ohne Zeichenvorrichtung — ausgedruckt. Die Methode ist für Rechner mit relativ kleiner Leistung und kleinem aktivem Speicher von Vorteil.

Determination of Pole Figures with a Computer. The author presents a method for making pole curves with a computer. The intensity data carried by a punched tape are processed by a computer with the aid of two ALGOL programs. The pole curves are printed out in the form of digits and spaces — thus without the aid of a tracing device. The method is advantageous with a computer of relatively low performance and having a small active memory.