



**MATEMATICKO-FYZIKÁLNÍ
FAKULTA
Univerzita Karlova**

DIPLOMOVÁ PRÁCE

Iva Karafiátová

**Náhodné kótované mozaiky s aplikacemi
ve výzkumu polykrystalických materiálů**

Katedra pravděpodobnosti a matematické statistiky

Vedoucí diplomové práce: doc. RNDr. Zbyněk Pawlas, Ph.D.

Studijní program: Matematika

Studijní obor: MPMSE

Praha 2020

Prohlašuji, že jsem tuto diplomovou práci vypracovala samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů. Tato práce nebyla využita k získání jiného nebo stejného titulu.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle §60 odst. 1 autorského zákona.

V dne

Podpis autora

Ráda bych poděkovala doc. RNDr. Zbyňku Pawlasovi, Ph.D. nejen za odborné vedení této práce, ale i za ochotu a velkou trpělivost. Dále bych chtěla poděkovat Ing. Ludku Hellerovi, Ph.D. za odborné konzultace. V neposlední řadě bych ráda poděkovala všem, obzvláště rodině, kteří mě během studia podporovali.

Název práce: Náhodné kótované mozaiky s aplikacemi ve výzkumu polykrystalických materiálů

Autor: Iva Karafiátová

Katedra: Katedra pravděpodobnosti a matematické statistiky

Vedoucí diplomové práce: doc. RNDr. Zbyněk Pawlas, Ph.D., Katedra pravděpodobnosti a matematické statistiky

Abstrakt: Na experimentální data získaná z polykrystalického materiálu můžeme v jistých situacích nahlížet jako na realizaci náhodného pole či jako na realizaci náhodné kótované mozaiky s kótami jako je objem nebo orientace zrna. Při analýze takových dat pak přirozeně vyvstávají otázky, zda se v rámci náhodného pole projevují závislosti nebo zda jsou kóty jednotlivým zrnům přiřazeny nezávisle na mozaice. V této práci jsou představeny charakteristiky kvantifikující míru prostorové závislosti kót a na jejich základě jsou navrženy neparametrické testy nezávislého kótování náhodné mozaiky. Síla testů je zkoumána na nově zavedených modelech závisle kótovaných mozaik s kótami z prostoru reprezentujícího orientaci zrn. Metody jsou nakonec aplikovány na mikrostrukturu reálného materiálu s kubickou krystalografickou soustavou.

Klíčová slova: náhodná kótovaná mozaika, disorientace, test nezávislosti, nezávislé kótování, podmíněně nezávislé kótování

Title: Random marked tessellations with applications in research of polycrystalline materials

Author: Iva Karafiátová

Department: Department of Probability and Mathematical Statistics

Supervisor: doc. RNDr. Zbyněk Pawlas, Ph.D., Department of Probability and Mathematical Statistics

Abstract: Experimental data obtained from polycrystalline microstructure can be in certain situations viewed as a realization of a random field or as a realization of a random marked tessellation with marks such as grain volume or grain orientation. A natural question is, whether there are dependencies within the random field or whether the marks are assigned to each grain independently on the tessellation. In this work characteristics quantifying measure of spatial dependence between marks are presented and based on them non-parametric tests of independent marking of a tessellation are proposed. We investigate power of the tests on newly introduced models of dependently marked tessellations with marks from space representing grain orientation. Proposed methods are applied on real data of microstructure with cubic crystal lattice.

Keywords: random marked tessellation, disorientation, test of independence, independent marking, conditional independent marking

Obsah

Úvod	3
1 Fyzikální pojmy	4
1.1 Ideální krystal	4
1.2 Tenzor napětí a deformace	6
1.3 Metoda 3D-XRD	7
2 Popis orientace	9
2.1 Analytické popisy orientace	9
2.1.1 Matice orientace	9
2.1.2 Osa a úhel rotace	10
2.1.3 Eulerovy úhly	10
2.1.4 Kvaterniony	11
2.1.5 Výpočet disorientace	13
2.1.6 Pravděpodobnostní rozdělení orientací	14
2.2 Grafická reprezentace orientací	15
2.2.1 Pólový a inverzní pólový obrazec	15
2.2.2 Pravděpodobnostní hustota orientací	18
3 Stochastické modely	19
3.1 Náhodné pole	19
3.1.1 Náhodné pole na mříži	19
3.1.2 Náhodné pole na spojitě oblasti	19
3.2 Bodový proces	21
3.2.1 Obecný bodový proces	21
3.2.2 Prostorový bodový proces	24
3.3 Kótovaný bodový proces	24
3.3.1 Modely kótování	25
3.3.2 Charakteristiky kótovaného bodového procesu	25
3.4 Proces částic	27
3.5 Náhodná mozaika	28
3.6 Náhodná kótovaná mozaika	29
3.6.1 Modely kótování	30
3.6.2 Charakteristiky náhodné kótované mozaiky	30
3.6.3 Charakteristiky náhodné mozaiky s kótami z prostoru reprezentující orientace	31
4 Testy nezávislosti	35
4.1 Simulační testy	35
4.1.1 Barnardův Monte Carlo test	35
4.1.2 Globální obávkový test	36
4.2 Postup testování	38
4.2.1 Náhodná realokace	38
4.2.2 Jednorozměrná testová statistika	39
4.2.3 Funkcionální testová statistika	40
4.3 Simulační studie	40
4.3.1 Nezávislé kótování	41
4.3.2 Podmíněně nezávislé kótování	47

5 Aplikace na reálná data	53
5.1 Náhodné pole	53
5.2 Kótovaný bodový proces	55
5.3 Kótovaná mozaika	55
Závěr	58
Seznam použité literatury	59
Seznam obrázků	62
A Operátory symetrie pro krychlovou krystalovou soustavu	64
B Převody mezi popisy orientace	66

Úvod

Náhodná mozaika je jedním z hojně užívaných modelů stochastické geometrie. Jde o lokálně konečné rozdělení eukleidovského prostoru na disjunktní podmnožiny.

Použití tohoto modelu k rekonstrukci reálných polykrystalických materiálů umožňuje zkoumání vlastností mikrostruktury v situacích, ve kterých je získávání potřebných informací z naměřených dat velmi obtížné. Příkladem je metoda 3D-XRD, která podává informace o pozicích zrn, jejich orientacích, ale nikoliv o sousedství zrn, natož o hranicích mezi sousedními zrny, jako je tomu například u metody 3D EBSD.

Statistická analýza trojrozměrných mikrostruktur je častým předmětem zkoumání (Šedivý a kol. (2013), Groeber a kol. (2008) či Staněk a kol. (2020)). Tato práce je motivovaná rozsáhlou analýzou mikrostruktury anizotropního superelastického materiálu NiTi (Sedmák a kol., 2016), který byl mechanicky namáhán. Metodou 3D-XRD byly naměřeny polohy jednotlivých zrn spolu s hodnotami tenzoru napětí a orientacemi zrn. Materiál byl zrekonstruován pomocí Laguerrovy mozaiky dvěma odlišnými metodami a výsledky byly mezi sebou porovnány (Heller a kol., 2020). Dále byly zkoumány závislosti mezi vlastnostmi mikrostruktury a elasticitou materiálu i prostorové závislosti vlastností mikrostruktury. V této práci se zaměříme více na teoretické aspekty a statistické testování.

Při analýze naměřených dat můžeme využít různé stochastické modely a statistické metody. Na hodnoty tenzoru napětí je možné nahlížet jako na realizaci náhodného pole na spojitě oblasti a lze zkoumat prostorové korelace této struktury. Mikrostrukturu materiálu můžeme modelovat pomocí náhodných mozaik. Přiřadíme-li jednotlivým zrnům náhodné mozaiky kótu (např. krystalografickou orientaci či objem), získáváme náhodnou kótovanou mozaiku. Tento model jsme použili v článku Pawlas a kol. (2020), který je zasláný k publikaci a tvoří důležitou část této diplomové práce.

Ve většině polykrystalických materiálů se vyskytují nerovnoměrná rozdělení nejen objemů zrn, ale také jejich orientací, hovoříme o textuře materiálu. Přirozeně pak vyvstává otázka, zda se v materiálu objevuje nějaký druh závislosti rozdělení orientací jak mezi jednotlivými zrny, tak na vlastnostech mikrostruktury. To nás motivuje k sestavení testů nezávislosti kótování mozaiky. Hlavním výsledkem práce je sestavení a studium dvou typů testů, a to testu nezávislého kótování a testu podmíněně nezávislého kótování. Zavedeme několik modelů závisle kótovaných mozaik, které slouží jako alternativa k nulové hypotéze. Tyto testy a modely mohou být dále využívány při analýze vlastností dané mikrostruktury. V závěrečné kapitole uvidíme, že v případě zkoumání materiálu NiTi jsme pomocí navržených testů odhalili výskyt závislostí orientací zrn.

Struktura práce je následující. Nejprve představíme základní fyzikální pojmy potřebné pro tuto práci jako *ideální krystal*, *krystalografická soustava* či *tenzor napětí*. Zároveň také stručně popíšeme princip metody 3D-XRD. Ve druhé kapitole se zaměříme na různé způsoby popisu orientace zrna v materiálu a vysvětlíme princip kvantifikace odlišnosti orientací dvojice zrn. Následující část se zabývá zavedením stochastických modelů spolu s charakteristikami sloužícími k popisu těchto modelů. Poté představíme dva typy testů nezávislosti kótování náhodné mozaiky a ukážeme výsledky těchto testů pro simulační studii na různých modelech závislých kót. Na závěr ukážeme výsledky představených metod aplikovaných na reálná data.

1. Fyzikální pojmy

1.1 Ideální krystal

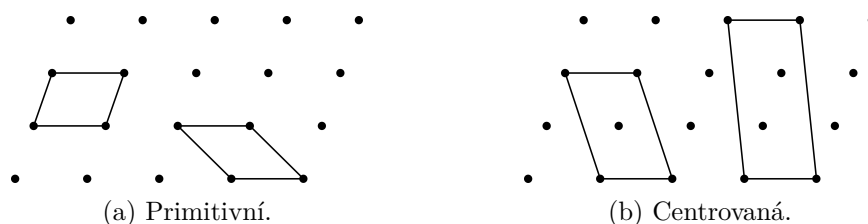
V přírodě se látky přirozeně vyskytují v několika stavech v závislosti na teplotě prostředí. My se zaměříme pouze na stav pevný, který může být buď amorfní, nebo krystalický. V amorfním stavu jsou molekuly náhodně uskupené, zatímco v krystalickém je toto uskupení uspořádané.

Krystal je trojrozměrně periodická struktura, kterou mohou mít nejen minerály, ale i slitiny kovů. Jde o hmotné prostředí, které je homogenní, tedy fyzikální veličiny jsou konstantní v každé objemové jednotce krystalu. Nescalární fyzikální vlastnosti krystalu mohou být anizotropní, tedy mohou záviset na směru v prostoru krystalu. Je vhodné zavést pojem tzv. *ideálního krystalu*. Jde o nekonečný a zcela pravidelný krystal. Je vytvořen trojrozměrnou translační periodicitou, tedy pravidelným opakováním základního motivu. Věda zabývající se strukturou krystalů se nazývá *krystalografie* (Valvoda a kol. (1992) nebo Julian (2014)).

Důležitými pojmy jsou také krystalická *struktura* a *mříž*. Krystalická struktura je prostorové uspořádání atomů krystalu. Na druhou stranu prostorová mříž je trojrozměrná periodická množina bodů, které mají stejné a stejně orientované okolí. Volba mříže je libovolná a je to volně řečeno pouze „věšák“ pro krystalickou strukturu.

Krystaly můžeme dle této periodičnosti dělit na *monokrystaly*, *dvojčata* (symetricky srostlé monokrystaly stejné látky) a *polykrystaly*. Periodicita je v monokrystalech zachována v celém objemu, příkladem takové látky může být diamant. Na rozdíl od monokrystalů se polykrystaly skládají z několika tzv. *zrn*, uvnitř kterých jsou částice rozmístěny periodicky. Zrna se mezi sebou liší nejen orientací, ale obecně také velikostí a rozmístěním, které je v krystalu náhodné a nepravidelné. Látky složené z krystalů nazýváme látky *krystalické*, spec. *monokrystalické* a *polykrystalické*.

Jedním ze základních pojmů je také tzv. *základní (elementární) buňka* krystalu. Jde o rovnoběžnostěn, který je vymezen třemi základními translacemi v prostoru. Jde o takovou nejmenší část krystalické struktury, jejímž prostorovým opakováním dojde beze zbytku k vyplnění prostoru krystalu. Obsahuje-li elementární buňka pouze jediný mřížový bod, jde o buňku *primitivní* (obrázek 1.1a). V opačném případě se jedná o buňku *centrovanou* (obrázek 1.1b).



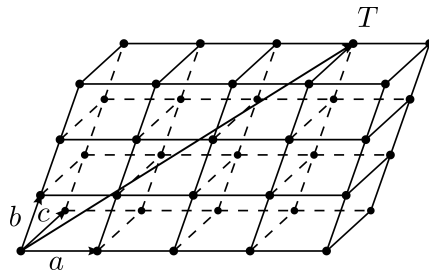
Obrázek 1.1: Typy elementární buňky.

Již jsme zmínili, že krystal vznikne trojrozměrným opakováním základního motivu. Operacemi opakování jsou *translace*, *rotace*, *zrcadlení*, *inverze* (středová souměrnost) a také složení těchto operací. Nicméně inverze může být vytvořena složením zrcadlení a rotace, tudíž lze říci, že základními operacemi opakování jsou pouze translace, rotace a zrcadlení. Je také důležité si uvědomit, že zrcadlení a inverze převádějí levé objekty v pravé a naopak. Obraz a vzor jsou vůči sobě tedy při působení těchto dvou operací *enantiomorfní*, neboli protitvaré.

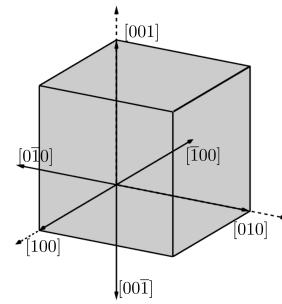
Pravidelný vzor je pak symetrický a přechází sám v sebe operacemi symetrie. Mno-

žinu bodů, které se při operaci symetrie nepohybují, nazýváme prvky symetrie. Krystalografické prvky symetrie v trojrozměrném prostoru dělíme na jednoduché a složené. Jednoduchými prvky symetrie jsou rovina zrcadlení, střed symetrie (inverze) a rotační n -četná osa. Při otáčení struktury kolem n -četné osy dostaneme po n otočeních o úhel $\frac{2\pi}{n}$ výchozí polohu struktury. Lze ukázat, že v ideálních krystalech se může vyskytovat pouze 1, 2, 3, 4 a 6-četná osa, neboť 5-četná osa a více než 6-četné osy nejsou konzistentní s translační periodicitou mříže. Mezi složené prvky symetrie (nejde o kombinované prvky) řadíme inverzní osy, šroubové osy a skluzové roviny.

Soubor kombinací operací symetrie, při kterých zůstane alespoň jeden bod v prostoru pevným bodem, nazýváme *bodové grupy*. Těch je celkem 32. Podle společných operací symetrie lze bodové grupy rozdělit na tzv. *krystalografické soustavy* (používá se i termín *krystalové soustavy*). Rozlišujeme 7 krystalografických soustav, a to soustavu triklinickou, monoklinickou, ortorombickou, tetragonální, trigonální, hexagonální a kubickou (krychlovou). Tyto soustavy se liší také tzv. *mřížovými parametry*. Jde o soubor 3 jednotkových os vymezujících základní buňku, tzv. *krystalografické osy* \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} , resp. jejich délky a , b , c , spolu s úhly α , β , γ , které osy navzájem svírají. V této práci se zaměříme na kubickou soustavu, pro kterou platí $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$.



Obrázek 1.2: Mřížové parametry.



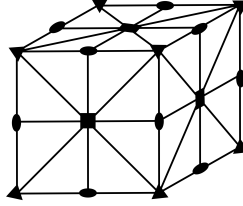
Obrázek 1.3: Millerovy indexy pro ekvivalentní směry $\langle 100 \rangle$.

Každý mřížový bod T , do kterého směřuje vektor \mathbf{t} z počátku, můžeme vyjádřit jako celočíselnou kombinaci

$$\mathbf{t} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c},$$

kde $u, v, w \in \mathbb{Z}$. Omezíme-li se pouze na popis pomocí nesoudělných celých čísel, nazýváme tyto vektory *krystalografickými směry* a značíme je jako $[uvw]$. Tomuto značení říkáme *Millerovy indexy*. Na obrázku 1.2 je zobrazen směr $[331]$. V případě, že u , v nebo w je záporné číslo, označíme složku tohoto směru jako absolutní hodnotu čísla u , v nebo w s pruhem. Chceme-li popsat směr, jehož konečné souřadnice nejsou celočíselné, musíme najít nejmenší celočíselný násobek vektoru. Např. pro vektor $(1, 1/2, 1)$ by označení pomocí Millerových indexů bylo $[212]$. Pro vektor $(2, -2, 4)$ by naopak bylo označení $[1\bar{1}2]$. Symetricky ekvivalentní směry ke směru $[uvw]$ značíme $\langle uvw \rangle$. Na obrázku 1.3 je vykreslen směr $[100]$ a také symetricky ekvivalentní směry $\langle 100 \rangle$ (pro kubickou soustavu).

V této práci budeme pracovat s materiálem (více v kapitole 5) s kubickou elementární buňkou, jejíž prvky symetrie jsou tři 4-četné, čtyři 3-četné a šest 2-četných os, které jsou zobrazeny na obrázku 1.4.



Obrázek 1.4: Zobrazení n -četných os v krychli.

1.2 Tenzor napětí a deformace

Působíme-li vnějšími silami na těleso, dochází k deformaci a zároveň vznikají vnitřní síly, které této deformaci odporují. Intenzitu těchto sil popisuje fyzikální veličina *mechanické napětí* (Newham, 2005). Změnu tvaru a objemu způsobenou mechanickým napětím popisuje *deformace*.

Na základě deformace rozlišujeme materiály elastické a plastické. Elastické materiály se na rozdíl od plastických po působení vnějších sil vrací do původní velikosti a tvaru.

Jelikož jsou zrna polykrystalických látek různě natočena, závisí při popisu napětí na referenční soustavě, vzhledem ke které napětí zrna vyjadřujeme. V této práci budeme pracovat v souřadném systému vzorku (materiálu) a v souřadném systému krystalu, který je umístěn do hlavních os kubického krystalu a je tudíž v každém zrně jiný. V případě souřadného systému vzorku budeme mluvit o tzv. *globálním napětí*, ve druhém případě pak o tzv. *lokálním napětí*. Lokální napětí tedy vyjadřují vnitřní síly v různých vůči sobě natočených souřadných systémech.

K popisu napětí, jehož jednotkou je pascal [Pa], se používá tenzor napětí σ . Jde o tenzor druhého řádu o 9 složkách (můžeme hovořit o matici napětí typu 3×3) popisující působení vnitřních sil na roviny souřadného systému, ve kterém jsou vyjádřeny. První sloupec matice popisuje působení silového vektoru na rovinu (100), jež je popsána normálovým vektorem [100]. Analogicky popisuje druhý (resp. třetí) sloupec působení silového vektoru na rovinu (010) (resp. (001)).

Tenzor napětí σ je symetrický, má tedy tvar

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} & \sigma_{yz} & \sigma_{zz} \end{pmatrix},$$

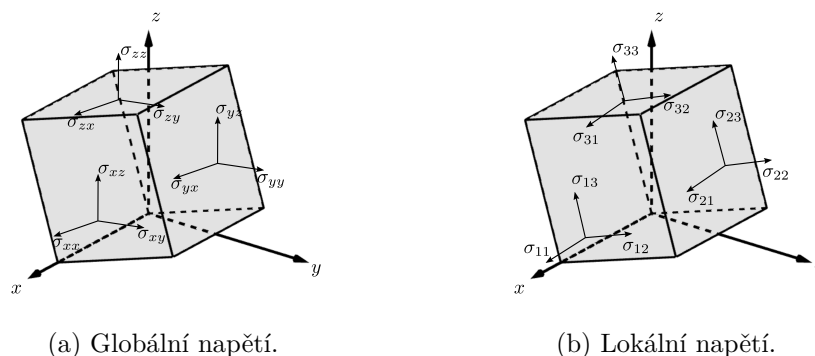
kde složkám σ_{xx} , σ_{yy} a σ_{zz} říkáme *normálová napětí* a složkám σ_{xy} , σ_{xz} a σ_{yz} říkáme *smyková napětí*.

Na obrázcích 1.5a a 1.5b jsou znázorněny jednotlivé složky tenzorů globálního a lokálního napětí. Normálové složky lokálního napětí označujeme jako σ_{11} , σ_{22} , σ_{33} , analogicky značíme smyková napětí.

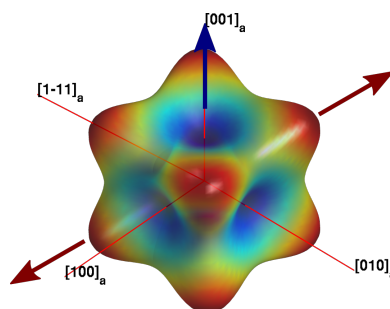
Deformace je na rozdíl od napětí bezrozměrná veličina popisující změnu tvaru (prodloužení či zkrácení) a objemu tělesa v různých směrech. Pro popis se používá tenzor deformace ϵ :

$$\epsilon = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} & \epsilon_{xz} \\ \epsilon_{xy} & \epsilon_{yy} & \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{xz} & \epsilon_{yz} & \epsilon_{zz} \end{pmatrix}.$$

Při experimentálním měření se měří hodnoty tenzoru deformace. Tenzor napětí se



Obrázek 1.5: Rozložení složek tenzoru napětí.



Obrázek 1.6: Měkké a tvrdé směry deformace.

poté počítá skrze Hookův zákon:

$$\sigma_{ij} = \sum_{k=1}^3 \sum_{l=1}^3 C_{ijkl} \varepsilon_{kl}, \quad (1.1)$$

kde (C_{ijkl}) značí složky tenzoru čtvrtého řádu, tzv. *elastické konstanty*. Tento tenzor může mít v důsledku symetrie tenzorů σ a ε maximálně 21 nezávislých složek v závislosti na krystalové soustavě. Díky symetriím krystalové soustavy dochází pro kubickou soustavu k redukci tohoto počtu na pouhé 3 nezávislé složky.

Modul pružnosti nebo také *Youngův modul* charakterizuje odpor materiálu proti protažení ve směru působícího namáhání (jednoosého napětí). Ten nicméně v různých směrech anizotropních látek nemusí být stejný. Na obrázku 1.6 jsou znázorněny různé směry deformace pro materiál NiTi s kubickou soustavou. Hovoříme o tzv. *měkkých směrech*, ve kterých je Youngův modul menší, a *tvrdých směrech*, ve kterých je naopak větší. Je-li zrn namáháno v měkkém směru, dochází k větší deformaci než v případě namáhání v tvrdém směru. Měkké směry jsou na obrázku 1.6 znázorněny modrou barvou, zatímco tvrdé směry červenou.

1.3 Metoda 3D-XRD

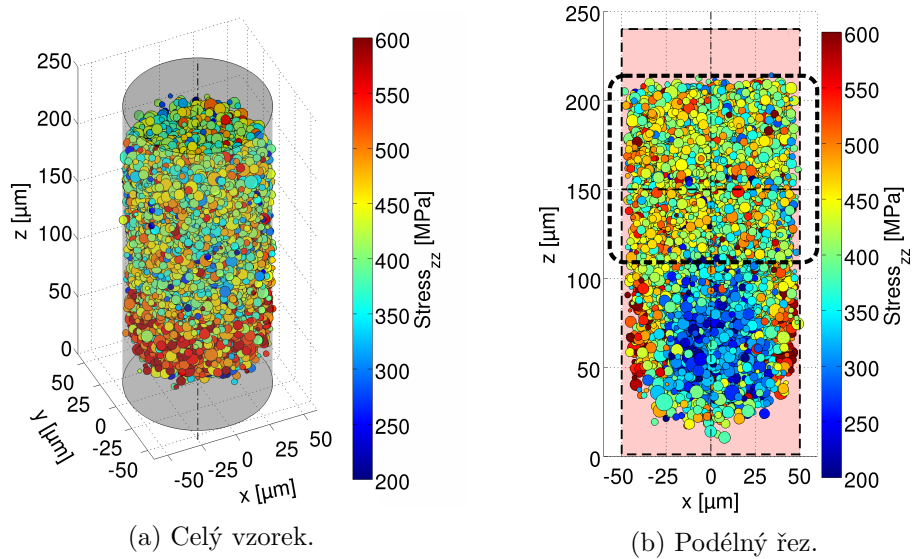
Zkoumání vnitřní struktury polykrystalů v trojrozměrném prostoru, jako je umístění zrn, orientace, velikost i deformaci a napětí jednotlivých zrn zároveň, umožňuje např. nedestruktivní metoda 3D-XRD (Poulsen, 2004) využívající rentgenové paprsky. Oproti destruktivním metodám, jako je 3D EBSD, lze také zkoumat, jak se jednotlivá zrna vyvíjí v čase, tedy např. jak se deformují v průběhu působení vnějších sil při namáhání.

Při zatížení tělesa vnějšími silami se pomocí této metody měří vzdálenosti mezi atomárními rovinami. Ze znalosti těchto vzdáleností v nezatíženém stavu se spočítají

hodnoty tenzoru deformace pro každé zrno. Z těch se následně dopočítají hodnoty tenzoru napětí pomocí Hookova zákona (1.1).

Nevýhodou této metody je, že neposkytuje informaci o tvaru zrn, hranicích mezi sousedními zrny ani o tom, s jakými zrny dané zrno sousedí. Pro získání takových informací je třeba danou látku zrekonstruovat pomocí numerických modelů.

Na obrázku 1.7 je vykreslen výsledek měření pomocí této metody na NiTi drátu (viz kapitola 5), který byl namáhán ve směru osy drátu. Každý bod představuje jedno zrno a jeho velikost je úměrná velikosti zrna. Barevná škála odpovídá průměrnému globálnímu normálovému napětí σ_{zz} v zrně. Obrázek 1.7b představuje podélný řez středem tohoto drátu a čárkovaně je zde zvýrazněna část dat, která byla v této práci použita.



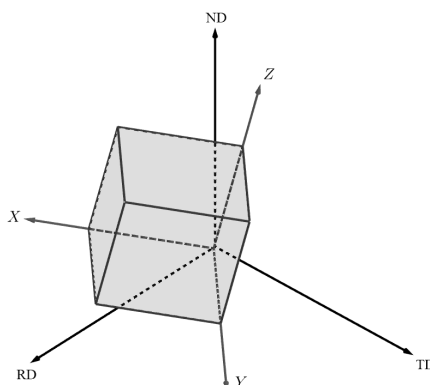
Obrázek 1.7: Výsledek měření globálního normálového napětí σ_{zz} metodou 3D-XRD pro NiTi materiál.

2. Popis orientace

Jak bylo již zmíněno, polykrystalické látky se skládají z několika oblastí s navzájem různou orientací, kterým říkáme *zrna*. V rámci zrn jsou částice natočeny podobně, ale ne nutně identicky. Za orientaci zrna se pak považuje průměrná orientace příslušných částic (Cho a kol. (2005) nebo Humbert a kol. (1996)).

Orientaci zrna můžeme popsat jako rotaci referenčního souřadného systému do souřadného systému zrna. Této rotaci se říká *pasivní*. Při práci se souřadnými systémy je zvykem používat pravotočivý souřadný systém, který je zobrazen na obrázku 2.1. Osy referenčního souřadného systému značíme RD, TD, ND a osy zrna značíme X , Y , Z . Existuje několik způsobů pro popis této rotace, a to jak analytických, tak i grafických. Z analytických zde uvedeme čtyři, a to matici orientace (rotace), Eulerovy úhly, osu a úhel rotace a kvaterniony, jejichž popis můžeme nalézt např. v Engler a Randle (2010) a Morawiec (2004). Převody mezi těmito popisy jsou uvedeny v příloze B či Rowenhorst a kol. (2015).

Následující popisy můžeme použít nejen k vyjádření natočení zrna vzhledem k souřadným osám celého materiálu, ale i k vyjádření rozdílu orientací dvou zrn, zvolíme-li za referenční systém souřadný systém jednoho ze zrn. V takovém případě hovoříme o tzv. *misorientaci*.



Obrázek 2.1: Referenční souřadný systém a systém zrna.

2.1 Analytické popisy orientace

2.1.1 Matice orientace

Mezi nejznámější způsob popis rotace patří ortogonální matice $G \in SO(3)$, kde $SO(3) = \{G \in \mathbb{R}^{3 \times 3} : GG^T = \mathbb{I}_3, \det(G) = 1\}$, \mathbb{I}_3 značí jednotkovou matici typu 3×3 . Prvky této matice jsou rovny kosinům úhlů mezi osami souřadného systému zrna a osami referenčního systému. První řádek je tvořen kosiny úhlů $\alpha_1, \beta_1, \gamma_1$ mezi osou RD a osami X, Y a Z . Obdobné jsou zbylé dva řádky matice, které jsou tvořeny kosiny úhlů $\alpha_2, \beta_2, \gamma_2$, resp. $\alpha_3, \beta_3, \gamma_3$, mezi osou TD, resp. ND, a osami X, Y a Z . Matice orientace má tedy tento tvar:

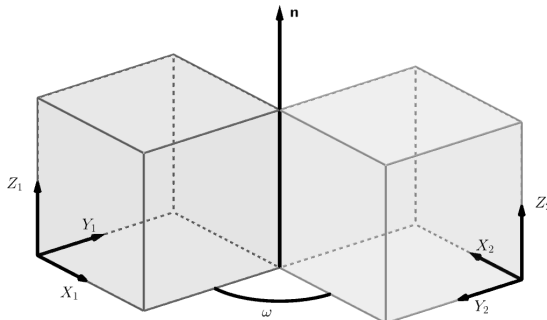
$$G = \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & G_{13} \\ G_{21} & G_{22} & G_{23} \\ G_{31} & G_{32} & G_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \alpha_1 & \cos \beta_1 & \cos \gamma_1 \\ \cos \alpha_2 & \cos \beta_2 & \cos \gamma_2 \\ \cos \alpha_3 & \cos \beta_3 & \cos \gamma_3 \end{pmatrix}.$$

Jak je uvedeno v Engler a Randle (2010), podkapitola 2.3.2, lze ukázat, že vektorový součin libovolné dvojice řádků (nebo sloupců) dá řádek třetí (nebo sloupec).

2.1.2 Osa a úhel rotace

Orientaci lze také popsat pomocí jednoho úhlu a jedné osy. K tomuto popisu slouží dvojice *osa a úhel rotace* (\mathbf{n}, ω) , která popisuje, kolem jaké jednotkové osy a o jaký úhel je třeba referenční souřadný systém otočit, abychom dostali souřadný systém zrna. Existenci této dvojice zaručuje Eulerova věta o rotaci, jejíž důkaz lze nalézt např. v Palais a kol. (2009).

Jak jsme již zmínili, v případě, že za referenční systém vezmeme systém jiného zrna, hovoříme o vyjádření misorientace dvou zrn. Na obrázku 2.2 je zobrazena osa a úhel misorientace mezi dvěma různými zrny s hodnotou $\omega = 45^\circ$.



Obrázek 2.2: Osa a úhel misorientace mezi dvěma zrny.

Z matice orientace G lze úhel orientace (resp. misorientace) získat jako (Morawiec (2004), (2.18))

$$\omega = \arccos\left(\frac{\text{tr}(G) - 1}{2}\right),$$

kde tr značí stopu matice, tedy $\text{tr}(G) = G_{11} + G_{22} + G_{33}$.

V důsledku symetrií krystalových soustav není dvojice osa a úhel rotace (resp. misorientace) určena jednoznačně. Nejmenší úhel misorientace nazveme *disorientací*. Pro kubickou soustavu existuje 24 symetrií, díky nimž nemůže úhel disorientace překročit $\beta_{\max} \doteq 62,8^\circ$.

Pro úplný popis misorientace dvou zrn je zapotřebí znát nejen osu a úhel rotace, ale také orientaci normály hranice mezi těmito zrny. Analýze hranic se pak říká *pěti-parametrová analýza* (Randle, 2006). V této práci se nicméně zaměříme pouze na úhel disorientace.

Rodriguesův vektor

Orientaci můžeme také popsat jen pomocí jednoho trojrozměrného vektoru, který nazýváme *Rodriguesův*. Snadno se získá z dvojice osa a úhel rotace (\mathbf{n}, ω) pomocí vzorce

$$\mathbf{r} = \tan\left(\frac{\omega}{2}\right) \mathbf{n}.$$

Tento popis je užitečný například při zjišťování speciálních typů hranic mezi zrny a použili jsme ho ve článku Staněk a kol. (2020).

2.1.3 Eulerovy úhly

V krystalografii se pro popis orientace nejčastěji používají tzv. *Eulerovy úhly*. Existuje několik konvencí pro popis Eulerových úhlů, avšak zde popsána je tou nejčastější, tzv. Bungeho konvence (Bunge, 1982). Jde o trojici úhlů $(\varphi_1, \phi, \varphi_2)$ popisující tři po

sobě jdoucí rotace kolem os souřadného systému takových, abychom referenční systém s osami RD, TD a ND ztotožnili se systémem s osami X , Y , Z .

Systém nejprve otočíme kolem osy ND o úhel φ_1 , čímž obdržíme zrotované osy RD a TD, které označme RD' a TD'. Následující rotaci kolem osy RD' popisuje úhel ϕ . Takto zrotované osy TD' a ND = ND' označme TD'' a ND''. Třetí úhel φ_2 popisuje rotaci kolem zrotované osy ND''.

Analyticky můžeme tyto rotace popsat následovně:

$$g_{\varphi_1} = \begin{pmatrix} \cos \varphi_1 & \sin \varphi_1 & 0 \\ -\sin \varphi_1 & \cos \varphi_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad g_{\phi} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \phi & \sin \phi \\ 0 & -\sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix},$$

$$g_{\varphi_2} = \begin{pmatrix} \cos \varphi_2 & \sin \varphi_2 & 0 \\ -\sin \varphi_2 & \cos \varphi_2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Definice 1. Definujme zobrazení $g : \mathbb{R}^3 \rightarrow SO(3)$ předpisem

$$g(\varphi_1, \phi, \varphi_2) = g_{\varphi_2} \cdot g_{\phi} \cdot g_{\varphi_1}. \quad (2.1)$$

Z popisu je zřejmé, že Eulerovy úhly jsou periodické s periodou 2π , a tedy

$$g(\varphi_1 + 2\pi, \phi + 2\pi, \varphi_2 + 2\pi) = g(\varphi_1, \phi, \varphi_2).$$

Dokonce platí i identita

$$g(\varphi_1 + \pi, 2\pi - \phi, \varphi_2 + \pi) = g(\varphi_1, \phi, \varphi_2).$$

Nicméně zvykem je definovat tyto úhly v následujících intervalech: $\varphi_1, \varphi_2 \in [0, 2\pi)$ a $\phi \in [0, \pi]$. Definiční obor zobrazení g definovaného předpisem (2.1) můžeme tedy omezit na prostor $[0, 2\pi) \times [0, \pi] \times [0, 2\pi)$.

Matici rotace lze pak z Eulerových úhlů dostat jako $G = g(\varphi_1, \phi, \varphi_2)$. V příloze B lze nalézt i opačné vyjádření, tedy vyjádření Eulerových úhlů z matice orientace.

Fundamentální oblasti Eulerova prostoru

Každou orientaci lze pomocí Eulerových úhlů vyjádřit jednoznačně. Díky symetriím existují ekvivalentní oblasti v prostoru těchto úhlů, které nazýváme též *fundamentální oblasti* nebo *fundamentální zóny* (Engler a Randle (2010), podkapitola 2.6.2). Počet těchto oblastí se liší podle počtu symetrií. Pro kubickou krystalovou strukturu existuje 24 takovýchto ekvivalentních oblastí, které jsou postačující pro jednoznačné popsání orientace zrna, či disorientace mezi různými zrny.

V případě počítání disorientace mezi dvěma zrny, je třeba uvažovat všechny ekvivalentní vyjádření orientací obou zrn. Je tedy třeba vybrat minimum z $24 \cdot 24$ úhlů. Existence fundamentálních zón tento počet nicméně redukuje na pouhých 24.

2.1.4 Kvaterniony

Poněkud více abstraktní nástroj pro popis orientace zrna je použití kvaternionů (Morawiec, 2004). Než se pustíme do zasazení kvaternionů do kontextu krystalografie, připomeneme některé vlastnosti této algebraické struktury.

Definice 2. *Kvaternion* $q = (q_0, q_1, q_2, q_3)$ je uspořádaná čtveřice reálných čísel. Skládá se ze skalární části q_0 a vektorové části $\mathbf{q} = (q_1, q_2, q_3)$. Zapisujeme $q = (q_0, \mathbf{q})$.

Norma kvaternionu je definována jako $\|q\| = \sqrt{q_0^2 + q_1^2 + q_2^2 + q_3^2}$. *Inverzní kvaternion* k nenulovému kvaternionu definujeme pomocí normy předpisem

$$q^{-1} = \frac{1}{\|q\|^2}(q_0, -\mathbf{q}).$$

Definice 3. Mějme dva různé kvaterniony q a p , potom definujeme jejich součin

$$\begin{aligned} pq &= (p_0q_0 - \mathbf{p} \cdot \mathbf{q}, q_0\mathbf{p} + p_0\mathbf{q} + \mathbf{p} \times \mathbf{q}) \\ &= (p_0q_0 - \sum_{j=1}^3 p_jq_j, pq_1, pq_2, pq_3), \end{aligned}$$

kde $pq_i = q_0p_i + p_0q_i + \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk}p_jq_k$, $i = 1, 2, 3$ a ϵ_{ijk} je permutační symbol (Levi-Civitův symbol)¹.

Z definice je patrné, že násobení kvaternionů není komutativní, obecně tedy platí $pq \neq qp$. Dále platí $q^{-1}q = qq^{-1} = (1, 0, 0, 0)$.

V krystalografii se pracuje s jednotkovými kvaterniony, tedy s těmi, pro které platí $\|q\| = 1$. Jedná se o prvky trojrozměrné sféry

$$\mathbb{S}^3 = \{(q_0, q_1, q_2, q_3) \in \mathbb{R}^4 : q_0^2 + q_1^2 + q_2^2 + q_3^2 = 1\}.$$

Dále můžeme uvažovat pouze kvaterniony s nezápornou skalární částí, neboť kvaternion q i k němu opačný $-q$ popisují stejnou orientaci. Omezíme se tedy na prvky trojrozměrné polosféry

$$\mathbb{S}_+^3 = \mathbb{S}^3 \cap (T_0 \cup T_1 \cup T_2 \cup T_3),$$

kde $T_0 = \{(q_0, q_1, q_2, q_3) \in \mathbb{R}^4 : q_0 > 0\}$, $T_3 = \{(0, q_1, q_2, q_3) \in \mathbb{R}^4 : q_3 > 0\}$, $T_2 = \{(0, q_1, q_2, 0) \in \mathbb{R}^4 : q_2 > 0\}$ a $T_1 = \{(0, q_1, 0, 0) \in \mathbb{R}^4 : q_1 > 0\}$.

Vztah mezi jednotkovým kvaternionem popisujícím orientaci a maticí orientace udává následující tvrzení.

Tvrzení 1. Zobrazení $h : \mathbb{S}_+^3 \rightarrow SO(3)$ definované předpisem

$$h(q) = \begin{pmatrix} q_0^2 + q_1^2 - q_2^2 - q_3^2 & 2(q_1q_2 - q_0q_3) & 2(q_1q_3 + q_0q_2) \\ 2(q_1q_2 + q_0q_3) & q_0^2 - q_1^2 + q_2^2 - q_3^2 & 2(q_2q_3 - q_0q_1) \\ 2(q_1q_3 - q_0q_2) & 2(q_2q_3 + q_0q_1) & q_0^2 - q_1^2 - q_2^2 + q_3^2 \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

je izomorfismus. Matici orientace z kvaternionového vyjádření lze tedy získat jako $G = h(q)$.

Důkaz. Kvaternionu q jsme přiřadili matici $G = h(q)$, pro kterou není těžké přímým výpočtem ověřit, že splňuje $GG^T = \mathbb{I}_3$ a $\det(G) = 1$. Obráceně pro matici $G \in SO(3)$ tvaru

$$G = \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & G_{13} \\ G_{21} & G_{22} & G_{23} \\ G_{31} & G_{32} & G_{33} \end{pmatrix}$$

¹Levi-Civitův symbol ϵ_{ijk} je definován jako

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & \text{pro } (1, 2, 3), (2, 3, 1), (3, 1, 2), \\ -1 & \text{pro } (1, 3, 2), (2, 1, 3), (3, 2, 1), \\ 0 & \text{jinak.} \end{cases}$$

je její stopa $\text{tr}(G) = G_{11} + G_{22} + G_{33}$ alespoň -1 , a proto můžeme vyjádřit

$$q_0 = \frac{1}{2} \sqrt{1 + \text{tr}(G)}.$$

Jestliže $q_0 > 0$, položíme

$$q_1 = \frac{G_{32} - G_{23}}{4q_0}, \quad q_2 = \frac{G_{13} - G_{31}}{4q_0} \quad \text{a} \quad q_3 = \frac{G_{21} - G_{12}}{4q_0}.$$

V případě $q_0 = 0$ lze psát $q_3 = \sqrt{\frac{1 + G_{33}}{2}}$ a také

$$q_2 = \begin{cases} \frac{G_{23}}{2q_3} & \text{pro } q_3 > 0, \\ \sqrt{\frac{1 + G_{22}}{2}} & \text{pro } q_3 = 0, \end{cases}$$

a

$$q_1 = \begin{cases} \frac{G_{13}}{2q_3} & \text{pro } q_3 > 0, \\ \frac{G_{12}}{2q_2} & \text{pro } q_3 = 0, q_2 > 0, \\ 1 & \text{pro } q_3 = 0, q_2 = 0. \end{cases}$$

Tímto způsobem jsme našli kvaternion $q = (q_0, q_1, q_2, q_3) \in \mathbb{S}_+^3$ takový, že $G = h(q)$. Neboli jsme popsali inverzní zobrazení $q = h^{-1}(G)$. Odtud vidíme, že h je bijekce. Abychom ukázali, že h je rovněž homomorfismus, potřebujeme zjistit, zda pro $p, q \in \mathbb{S}_+^3$ platí, že $h(pq) = h(p) \cdot h(q)$. Toto odvození je přímočaré, ale poněkud zdlouhavější, a proto ho zde nevypisujeme. □

Pomocí předchozího vyjádření a vztahů mezi maticí orientace a osou a úhlem orientace (\mathbf{n}, ω) lze poměrně snadno vyjádřit kvaternion popisující orientaci právě skrze tuto dvojici následujícím vztahem:

$$q_0 = \cos\left(\frac{\omega}{2}\right), \quad q_i = n_i \sin\left(\frac{\omega}{2}\right), \quad i = 1, 2, 3,$$

kde $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$.

Převody mezi kvaternionem a Eulerovými úhly spolu s vyjádřením kvaternionu z matice orientace lze nalézt v příloze B. Odvození těchto vztahů lze nalézt v Morawiec (2004), podkapitola 2.5.3.

2.1.5 Výpočet disorientace

Při výpočtu *disorientace* (minimálního úhlu misorientace) mezi dvěma zrny je třeba zohlednit symetrie dané krystalografické soustavy. Pro krychlovou soustavu existuje 24 symetrií, díky nimž nemůže úhel disorientace překročit $\beta_{\max} \doteq 62,8^\circ$. Uvedeme zde postup pro výpočet disorientace mezi dvěma zrny v materiálu s tímto typem krystalografické soustavy.

Označme q^1, q^2 kvaternion orientace prvního, resp. druhého zrna. Úhel disorientace mezi dvěma zrny je pak roven

$$\zeta(q^1, q^2) = \min_{i=1, \dots, 24} 2 \arccos p_0^i,$$

kde p_0^i značí skalární složku kvaternionu $p^i = (q^1)^{-1} \cdot s^i \cdot q^2$ a s^i je kvaternion symetrie (viz příloha A).

Výpočet může být také modifikován pro reprezentaci orientací maticemi, nicméně z výpočetního hlediska je vhodnější volit kvaterniony. Označme G_1, G_2 matice orientace prvního, resp. druhého zrna. Úhel disorientace mezi dvěma zrny je pak roven

$$\zeta(G_1, G_2) = \min_{i=1, \dots, 24} \arccos \left(\frac{\text{tr}(G_1^{-1} \cdot M^i \cdot G_2) - 1}{2} \right),$$

kde M^i je matice symetrie (viz příloha A). Platí, že $M_i = h(s_i)$, $i = 1, \dots, 24$, kde h je izomorfismus definovaný předpisem (2.2).

2.1.6 Pravděpodobnostní rozdělení orientací

V literatuře (např. Engler a Randle (2010), podkapitola 5.3) se setkáváme s termínem „orientation distribution function“, tedy distribuční funkce orientací, který ovšem neznamená distribuční funkci, nýbrž hustotu pravděpodobnostního rozdělení. Abychom však zachovali zavedenou terminologii, převezmeme toto označení a hustotu označíme zkratkou *odf*.

Matice orientace jsou prvky prostoru $SO(3)$, na kterém existuje jednoznačně určená pravděpodobnostní Haarova míra μ (viz Halmos (1950), kapitola 11). To znamená, že $\mu(SO(3)) = 1$ a $\mu(GA) = \mu(A)$ pro každou matici $G \in SO(3)$ a borelovskou podmnožinu $A \subseteq SO(3)$, přičemž značíme $GA = \{G \cdot G_0 : G_0 \in A\}$.

Definice 4. Nezápornou a borelovsky měřitelnou funkci f na $SO(3)$ nazveme pravděpodobnostní hustotou orientací (*odf*), jestliže

$$\int_{SO(3)} f(G) \mu(dG) = 1.$$

Speciálně pro rovnoměrné rozdělení orientací platí $f(G) = 1$ pro každé $G \in SO(3)$.

Pro jiné reprezentace orientací použijeme příslušnou transformaci. Uvažujme zobrazení g definované předpisem (2.1) na prostoru Eulerových úhlů, $g : [0, 2\pi) \times [0, \pi] \times [0, 2\pi) \rightarrow SO(3)$. Tato transformace dává (Morawiec (2004), kapitola 3)

$$\int_A f(G) \mu(dG) = \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} f(g(\varphi_1, \phi, \varphi_2)) \mathbf{1}\{g(\varphi_1, \phi, \varphi_2) \in A\} \sin \phi \, d\varphi_1 \, d\phi \, d\varphi_2$$

pro libovolnou borelovskou podmnožinu $A \subseteq SO(3)$. Zjednodušeně v řeči diferenciálů máme rozklad

$$\mu(dG) = \frac{\sin \phi}{8\pi^2} \, d\varphi_1 \, d\phi \, d\varphi_2.$$

V případě parametrizace orientací pomocí Eulerových úhlů budeme pro pravděpodobnostní hustotu opět používat symbol f . Tato funkce pak splňuje

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} f(\varphi_1, \phi, \varphi_2) \frac{\sin \phi}{8\pi^2} \, d\varphi_1 \, d\phi \, d\varphi_2 = 1.$$

V podkapitole 2.1.4 bylo zmíněno, že v krystalografii uvažujeme kvaterniony z polosféry \mathbb{S}_+^3 . Haarova míra na tomto prostoru je násobek Hausdorffovy míry \mathcal{H}^3 . Znormování na pravděpodobnostní míru dostaneme využitím toho, že $\mathcal{H}^3(\mathbb{S}_+^3) = \pi^2$. Uvažujeme-li zobrazení h definované předpisem (2.2), $h : \mathbb{S}_+^3 \rightarrow SO(3)$, pak

$$\int_A f(G) \mu(dG) = \frac{1}{\pi^2} \int_{\mathbb{S}_+^3} f(h(q)) \mathbf{1}\{h(q) \in A\} \mathcal{H}^3(dq)$$

pro libovolnou borelovskou podmnožinu $A \subseteq SO(3)$, neboli

$$\mu(dG) = \frac{1}{\pi^2} \mathcal{H}^3(dq).$$

Integrál ještě můžeme více rozepsat, čímž dostaneme

$$\int_A f(G) \mu(dG) = \int_{b(o,1)} f(h(q_0, q_1, q_2, q_3)) \mathbf{1}\{h(q_0, q_1, q_2, q_3) \in A\} \frac{1}{\pi^2 q_0} d(q_1, q_2, q_3),$$

kde $b(o, 1)$ je jednotková koule v \mathbb{R}^3 se středem v počátku a $q_0 = \sqrt{1 - q_1^2 - q_2^2 - q_3^2}$.

Příklady rozdělení orientací jako *von Misesovo–Fisherovo* či *Binghamovo* rozdělení lze nalézt například v Morawiec (2004), podkapitola 5.2.

Existuje i analytické vyjádření *odf* pomocí zobecněných sférických harmonik T_{mn}^l (Bunge (1982) či Roe (1965)):

$$\begin{aligned} f(\varphi_1, \phi, \varphi_2) &= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=0}^l \sum_{n=0}^l C_{mn}^l T_{mn}^l(\varphi_1, \phi, \varphi_2) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=0}^l \sum_{n=0}^l C_{mn}^l e^{im\varphi_2} P_{mn}^l(\cos \phi) e^{in\varphi_1} \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=0}^l \sum_{n=0}^l C_{mn}^l e^{im\varphi_2} i^{m-n} \left(\frac{2l+1}{2}\right)^{-\frac{1}{2}} Z_{mn}^l(\cos \phi) e^{in\varphi_1}, \end{aligned}$$

kde C_{mn}^l jsou koeficienty, $P_{mn}^l(x)$ značí zobecněný Legendrův polynom a $Z_{mn}^l(x)$ značí zobecněný Jacobiho polynom.

2.2 Grafická reprezentace orientací

2.2.1 Pólový a inverzní pólový obrazec

Pro grafické znázornění orientací zrn se nejčastěji používají pólové a inverzní pólové obrazce (Engler a Randle (2010), podkapitola 2.5), což jsou 2D obrazce založené na projekci krystalografických směrů.

Každý krystalografický (trojrozměrný) směr lze zobrazit jako bod na jednotkové referenční sféře, tedy na povrchu koule s jednotkovým poloměrem a středem umístěném v počátku souřadného systému daného zrna. Za reprezentující bod vezmeme průsečík daného směrového vektoru a referenční sféry. Pro zobrazení tohoto bodu na 2D ploše je zapotřebí aplikovat některou z projekcí. Projekci můžeme volit buď *stereografickou*, která zachovává úhlové vzdálenosti, nebo tzv. *equal-area* projekci, která naopak zachovává velikosti ploch. Pro equal-area projekci tedy platí, že plochy, které mají shodnou velikost na referenční sféře, mají také shodnou velikost na zprojektované ploše.

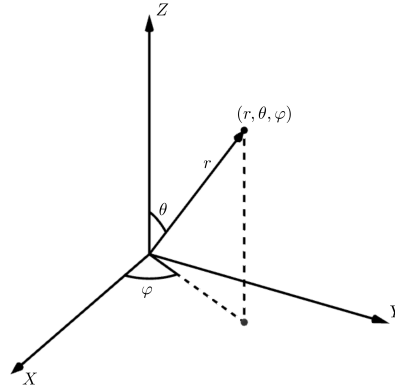
Mějme bod, jehož sférické souřadnice jsou (r, θ, φ) (obrázek 2.3). Potom v případě stereografické projekce jsou souřadnice zprojektovaného bodu

$$r \tan\left(\frac{\theta}{2}\right) (\cos \varphi, \sin \varphi). \quad (2.3)$$

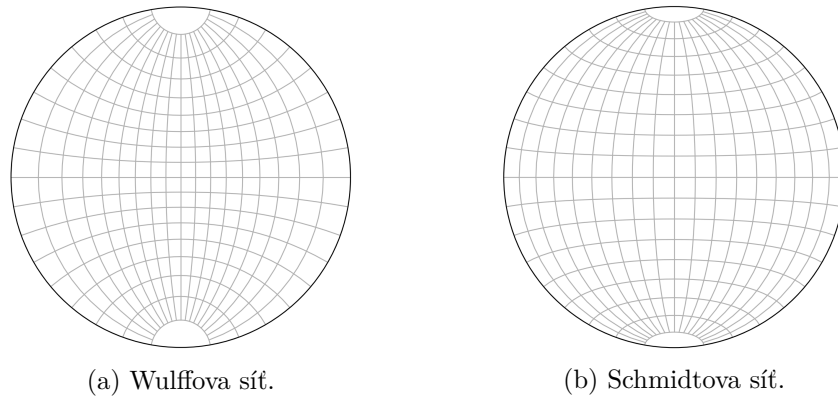
V případě equal-area projekce jsou však tyto souřadnice

$$r\sqrt{2} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) (\cos \varphi, \sin \varphi). \quad (2.4)$$

Pro čtení těchto projekcí se používají jiné sítě. Pro stereografickou projekci je to tzv. *Wulffova síť* (obrázek 2.4a) a pro equal-area projekci je to *Schmidtova síť* (obrázek 2.4b), ve které jednotka reprezentuje přesně podíl části v prostoru orientací.



Obrázek 2.3: Sférické souřadnice.



(a) Wulffova síť.

(b) Schmidtova síť.

Obrázek 2.4: Typy sítí pro stereografickou projekci a equal-area projekci s krokem 10° .

Pólový obrazec

Pólový obrazec (na rozdíl od inverzního pólového obrazce) je projekcí krystalografických směrů vyjádřených v referenčním souřadném systému (systém materiálu). Referenční systém je umístěn do středu referenční sféry tak, že osa ND směřuje k severnímu pólu, a systém vzorku je nakloněn podle příslušné orientace (jako je na obrázku 2.1).

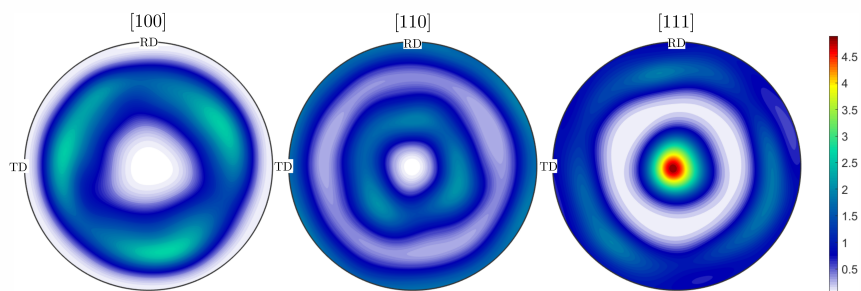
Sférické souřadnice směru $[xyz]$ zrna získáme ze vztahu

$$\begin{pmatrix} \sin \theta \cdot \cos \varphi \\ \sin \theta \cdot \sin \varphi \\ \cos \theta \end{pmatrix} = \frac{1}{N} \cdot G \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix},$$

kde $N = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ je normující konstanta a G je matice orientace daného zrna. S volbou $r = 1$ potom získáme souřadnice zprojektovaného bodu ze vzorce (2.3) nebo (2.4) podle toho, jakou projekci zvolíme.

Při vykreslování obrazce projektujeme všechny krystalograficky ekvivalentní směry v severní polokouli. To znamená, že např. pro směr $[100]$ se projektují 3 vektory, zatímco pro směr $[111]$ se projektují vektory 4.

Na obrázku 2.5 jsou vykresleny pólové obrazce z odhadnuté *odf* pomocí sférických harmonik z reálných dat (kapitola 5) založené na equal-area projekci pro směry $[100]$, $[110]$ a $[111]$. Stupnice je tedy uvedena v násobcích hustoty rovnoměrného rozdělení. K vykreslení jsme využili software MTEX (Bachmann a kol., 2010). Vidíme, že směr $[111]$ je u většiny zrn natočen ve směru osy ND. Rozdělení orientací není tedy rovnoměrné, ale je zde preferenční orientace, říkáme také tzv. *textura*.



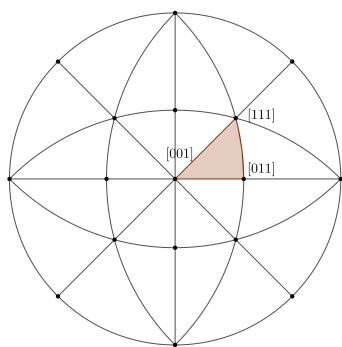
Obrázek 2.5: Pólové obrazce založené na equal-area projekci pro tři krystalografické směry. Obrazce jsou určeny pomocí odhadu *odf* z dat naměřených pro NiTi materiál.

Inverzní pólový obrazec

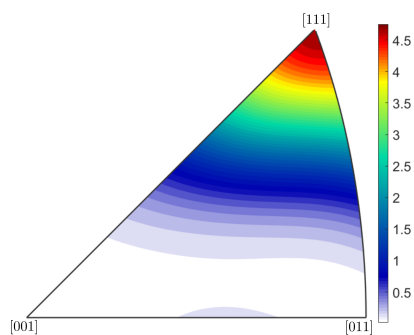
Druhým případem je inverzní pólový obrazec, což je projekce charakteristických směrů vzorku vyjádřených v lokálních souřadných systémech jednotlivých zrn.

Referenční systém je stejně jako v případě pólového obrazce umístěn do středu referenční sféry tak, že osa ND směřuje k severnímu pólu, a systém vzorku je nakloněn podle příslušné orientace.

Pro vykreslení projektovaného směru aplikujeme na daný vektor symetrie soustavy materiálu. Poté všechny symetricky ekvivalentní vektory zprojektujeme buď pomocí stereografické, nebo equal-area projekce. Referenční sféra je tak rozdělena podle symetrie krystalu na sférické trojúhelníky. Pro kubickou soustavu jde o 48 krystalograficky ekvivalentních jednotkových sférických trojúhelníků, aplikujeme-li i inverzi. Nicméně zprojektovaných trojúhelníků je 24 (stačí tedy opět projektovat pouze směry v severní polokouli referenční sféry) a pro vykreslení inverzního pólového obrazce pak nezáleží na volbě trojúhelníku. Posledním krokem je tedy volba trojúhelníku a následně jeho vykreslení. Na obrázku 2.6 jsou tyto trojúhelníky znázorněny a je zde také zvýrazněn ten, který se vybírá nejčastěji.



Obrázek 2.6: Projekce sférických trojúhelníků pro kubickou soustavu.



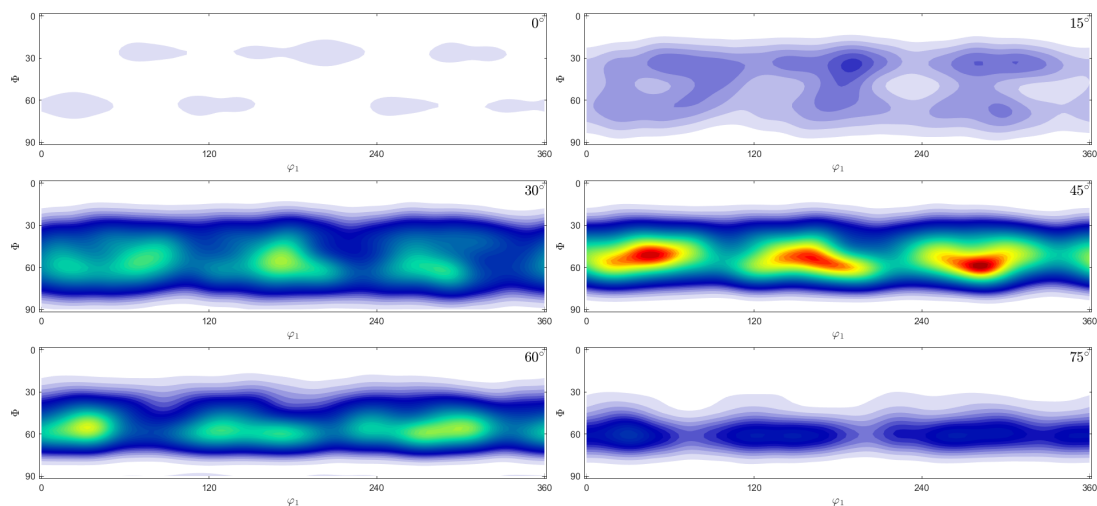
Obrázek 2.7: Inverzní pólový obrazec určený pomocí odhadu *odf* z dat naměřených pro NiTi materiál.

Na obrázku 2.7 je vykreslen inverzní pólový obrazec z odhadnuté *odf* pro osu ND pro kubickou soustavu pro stejná reálná data jako předchozí pólový obrazec (obrázek 2.5). I z tohoto obrázku je patrná preferenční orientace směru [111] ve směru osy drátu, neboť vidíme, že hustota rozdělení je mnohem vyšší u osy [111] než ve zbylých částech trojúhelníku.

2.2.2 Pravděpodobnostní hustota orientací

Dalším, možná méně přehledným, avšak podrobnějším, grafickým nástrojem na vykreslení orientací jsou řezy odhadem hustoty orientací, která byla zavedena v podkapitole 2.1.6.

Na obrázku 2.8 jsou vykresleny řezy podle úhlu φ_2 po 15° pro stejná reálná data jako předchozí pólový a inverzní pólový obrazec, kde na vodorovné ose je φ_1 a na svislé ϕ . Jelikož se při odhadování *odf* berou v úvahu symetrie dané struktury, je v tomto případě možné omezit se pro úhly ϕ a φ_2 pouze na interval $[0^\circ, 90^\circ)$. Stejně jako u předchozích obrazců je z tohoto obrázku patrná textura materiálu. Vidíme, že odhad hustoty dosahuje nejvyšších hodnot pro Eulerovy úhly $\phi \doteq 60^\circ$ a $\varphi_2 \doteq 45^\circ$.



Obrázek 2.8: Řezy odhadem *odf* podle φ_2 po 15° .

3. Stochastické modely

V této kapitole představíme základní prostorové modely, s kterými budeme dále pracovat. Budeme předpokládat, že je pevně dán pravděpodobnostní prostor $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$.

3.1 Náhodné pole

3.1.1 Náhodné pole na mříži

Mějme $L \subseteq \mathbb{R}^d$ konečnou podmnožinu, kterou nazveme *mříž*. Jednotlivým bodům z L budeme říkat *vrcholy*. Počet vrcholů označme jako $n = |L|$.

Definice 5. Soubor náhodných veličin $\{Z_i : i \in L\}$ definovaných na pravděpodobnostním prostoru $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$ nazveme *náhodné pole na mříži* L .

Definice 6. Mějme symetrickou relaci \sim na $L \times L$. Řekneme, že dva vrcholy $i, j \in L$ jsou *sousedé*, jestliže jsou v této relaci, tedy $i \sim j$. Opačný případ budeme značit $i \not\sim j$.

Definice 7. Mějme náhodné pole $\{Z_i : i \in L\}$ s konstantní střední hodnotou a konečným rozptylem. Dále mějme pro každou dvojici vrcholů (i, j) nezápornou váhu w_{ij} takovou, že $w_{ij} = 0$ pro $i \not\sim j$ a pro $i = j$. Potom definujeme *Moranův index* předpisem

$$I = \frac{n \sum_{i \in L} \sum_{j \in L} w_{ij} (Z_i - \bar{Z})(Z_j - \bar{Z})}{w \sum_{i \in L} (Z_i - \bar{Z})^2},$$

kde $\bar{Z} = \frac{1}{n} \sum_{i \in L} Z_i$ a $w = \sum_{i \in L} \sum_{j \in L} w_{ij}$.
Gearyho index definujeme předpisem

$$c = \frac{n-1}{2w} \frac{\sum_{i \in L} \sum_{j \in L} w_{ij} (Z_i - Z_j)^2}{\sum_{i \in L} (Z_i - \bar{Z})^2}. \quad (3.1)$$

Poznámka. Moranův a Gearyho index udávají míru korelace mezi jednotlivými náhodnými veličinami náhodného pole.

3.1.2 Náhodné pole na spojitě oblasti

Náhodné pole můžeme uvažovat také se spojitou indexovou množinou. Příkladem může být třeba nadmořská výška zemského povrchu nebo teplota.

Definice 8. Necht $D \subseteq \mathbb{R}^d$. Jako *náhodné pole* označíme soubor $\{Z(x) : x \in D\}$ náhodných veličin definovaných na pravděpodobnostním prostoru $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$.

Definice 9. Řekneme, že náhodné pole $\{Z(x) : x \in D\}$ je *striktně stacionární*, jestliže rozdělení náhodných vektorů $(Z(x_1), \dots, Z(x_n))$ a $(Z(x_1 + h), \dots, Z(x_n + h))$ jsou shodná pro každé $n \in \mathbb{N}$ a $h \in \mathbb{R}^d$ takové, že $x_1 + h, \dots, x_n + h \in D$.

Definice 10. Řekneme, že náhodné pole $\{Z(x) : x \in D\}$ s konečnými druhými momenty je *slabě stacionární*, jestliže

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(Z(x)) &= \mu \in \mathbb{R}, \\ \text{cov}(Z(x+h), Z(y+h)) &= \text{cov}(Z(x), Z(y)) \end{aligned}$$

pro každé $x, y \in D$ a $h \in \mathbb{R}^d$ takové, že $x+h, y+h \in D$.

Definice 11. Náhodné pole $\{Z(x) : x \in D\}$ nazveme *vnitřně stacionární*, jestliže pro každé $x, y \in D$ platí $\mathbb{E}(Z(x) - Z(y)) = 0$ a $\text{var}(Z(x) - Z(y))$ závisí pouze na rozdílu $x - y$.

Tvrzení 2. *Slabě stacionární náhodné pole je vnitřně stacionární.*

Důkaz. Pro slabě stacionární pole platí

$$\begin{aligned}\mathbb{E}(Z(x) - Z(y)) &= \mu - \mu = 0, \\ \text{var}(Z(x) - Z(y)) &= \text{var} Z(x) + \text{var} Z(y) - 2 \text{cov}(Z(x), Z(y)) \\ &= 2[C(o) - C(x - y)],\end{aligned}$$

kde $C(x - y) = \text{cov}(Z(x), Z(y))$ je z definice pro slabě stacionární náhodné pole funkcí pouze rozdílu $x - y$. □

Užitečným nástrojem pro popis prostorové korelace náhodného pole je tzv. variogram. Jehož idea odpovídá představě, že s rostoucí vzdáleností klesá prostorová závislost.

Definice 12. Mějme vnitřně stacionární náhodné pole $\{Z(x) : x \in D\}$. Potom definujeme *variogram* náhodného pole předpisem:

$$2\gamma(h) = \text{var}(Z(x+h) - Z(x)), \quad h \in D - D,$$

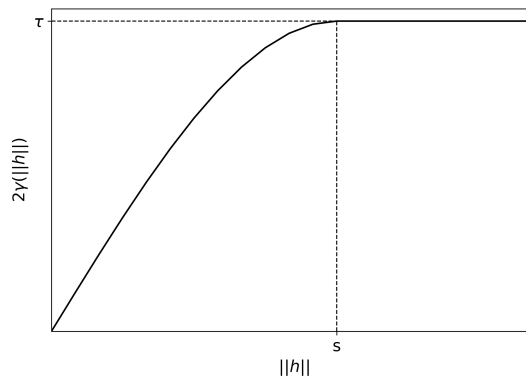
kde $D - D = \{x - y : x, y \in D\}$. Funkci $\gamma(h)$ nazýváme *semivariogram*.

Definice 13. Jestliže existuje konečná limita $\lim_{\|h\| \rightarrow \infty} 2\gamma(h) = \tau$, potom nazveme jako *dosah* vzdálenost, pro kterou se hodnota variogramu ustálí, tedy

$$s = \inf\{r \geq 0 : 2\gamma(h) = \tau, \forall h \in D, \|h\| \geq r\}.$$

Poznámka. Na obrázku 3.1 je vykreslen teoretický variogram závislý pouze na $\|h\|$ se znázorněným dosahem definovaným v předchozí definici pro sférický model s předpisem

$$2\gamma(\|h\|) = \mathbf{1}\{0 < \|h\| < s\} \left(\frac{3\|h\|}{2s} - \frac{\|h\|^3}{2s^3} \right) \tau + \mathbf{1}\{\|h\| \geq s\} \tau.$$



Obrázek 3.1: Teoretický variogram pro sférický model.

Poznámka. Empirický odhad variogramu na základě pozorování $Z(x_1), \dots, Z(x_n)$ je

$$2\hat{\gamma}(h) = \frac{1}{|N(h)|} \sum_{N(h)} (Z(x_i) - Z(x_j))^2,$$

kde $N(h) = \{(x_i, x_j) : x_i - x_j = h, i, j = 1, \dots, n\}$. Protože $N(h)$ pro dané h obvykle obsahuje jen málo nebo žádnou dvojici, volí se dělení $D - D$ na podskupiny H_1, \dots, H_k . Vybereme-li z množiny H_l prvek $h_l, l = 1, \dots, k$, který ji reprezentuje, pak empirický odhad variogramu v bodech h_1, \dots, h_k je

$$2\hat{\gamma}(h_l) = \frac{1}{|N(H_l)|} \sum_{N(H_l)} (Z(x_i) - Z(x_j))^2, \quad l = 1, \dots, k, \quad (3.2)$$

kde $N(H_l) = \{(x_i, x_j) : x_i - x_j \in H_l, i, j = 1, \dots, n\}$.

3.2 Bodový proces

Velmi užitečným stochastickým modelem pro popis náhodně rozmístěných bodů či množin v prostoru je tzv. *bodový proces*.

Mějme (E, ϱ) úplný separabilní metrický prostor. Označme $\mathcal{B} = \mathcal{B}(E)$ systém borelovských podmnožin množiny E a $\mathcal{B}_0 = \mathcal{B}_0(E)$ systém omezených borelovských podmnožin množiny E .

3.2.1 Obecný bodový proces

Definice 14. Míru μ nazveme *lokálně konečnou* na prostoru (E, \mathcal{B}) , jestliže $\mu(B) < \infty$ pro každou množinu $B \in \mathcal{B}_0$. Prostor všech lokálně konečných měr na prostoru (E, \mathcal{B}) označme $\mathcal{M}(E) = \mathcal{M}$ a prostor všech lokálně konečných čítecích měr na prostoru (E, \mathcal{B}) označme $\mathcal{N}(E) = \mathcal{N}$, tedy

$$\mathcal{N} = \{\mu \in \mathcal{M} : \mu(B) \in \mathbb{N} \cup \{0, \infty\} \forall B \in \mathcal{B}\}.$$

Dále označme σ -algebru \mathfrak{M} na prostoru \mathcal{M} :

$$\mathfrak{M} = \sigma\left\{\{\mu : \mu(B) \leq r\}, B \in \mathcal{B}, r \in [0, \infty)\right\}.$$

Symbolem \mathfrak{N} označíme stopu σ -algebry \mathfrak{M} na \mathcal{N} , tedy

$$\mathfrak{N} = \{M \cap \mathcal{N}, M \in \mathfrak{M}\}.$$

Definice 15. *Náhodná míra* Ψ je měřitelné zobrazení $\Psi : (\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P}) \rightarrow (\mathcal{M}, \mathfrak{M})$. *Bodový proces* Φ je měřitelné zobrazení $\Phi : (\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P}) \rightarrow (\mathcal{N}, \mathfrak{N})$.

Poznámka. Bodový proces je tedy speciální případ náhodné míry.

Poznámka. Rozdělení náhodné míry Ψ označme $Q = \mathbb{P}\Psi^{-1}$.

Definice 16. *Míru intenzity* Λ náhodné míry Ψ definujeme předpisem

$$\Lambda(B) = \mathbb{E}\Psi(B), \quad B \in \mathcal{B}.$$

Definice 17. Řekneme, že bodový proces Φ je *jednoduchý*, jestliže $\Phi(\{x\}) \leq 1$ pro každé $x \in E$.

Definice 18. Bod $x \in E$ nazveme *atomem* bodového procesu Φ , jestliže $\Phi(\{x\}) > 0$.

Definice 19. Nosič míry $\mu \in \mathcal{M}$ (značíme $\text{supp } \mu$) definujeme jako nejmenší uzavřenou množinu $A \subseteq E$ takovou, že $\mu(E \setminus A) = 0$.

Nosič bodového procesu je sjednocení jeho atomů. V každé omezené množině jich je konečně mnoho. Bodový proces lze pak reprezentovat pomocí náhodných elementů s hodnotami v prostoru E , které odpovídají jeho atomům.

Tvrzení 3. Každý bodový proces Φ můžeme reprezentovat jako

$$\Phi(B) = \sum_i \delta_{X_i}(B), \quad B \in \mathcal{B},$$

kde X_i je náhodný element z E a δ_x značí Diracovu míru v bodě x definovanou předpisem

$$\delta_x(B) = \begin{cases} 1, & \text{když } x \in B, \\ 0, & \text{jinak.} \end{cases}$$

Důkaz. Viz Daley a Vere-Jones (2008), lemma 9.1.XII. □

Definice 20. Necht ν, μ jsou σ -konečné míry na (E, \mathcal{B}) . Řekneme, že míra μ je *absolutně spojitá* vzhledem k míře ν , jestliže pro každé $B \in \mathcal{B}$ platí

$$\nu(B) = 0 \implies \mu(B) = 0.$$

Věta 4 (Radonova–Nikodymova). *Necht ν, μ jsou σ -konečné míry na (E, \mathcal{B}) a míra μ je absolutně spojitá vzhledem k míře ν . Potom existuje nezáporná měřitelná funkce f na E taková, že*

$$\mu(B) = \int_B f(x) \nu(dx), \quad B \in \mathcal{B}.$$

Důkaz. Viz Halmos (1950), kapitola 31. □

Definice 21. Funkce f z věty 4 se nazývá *Radonova–Nikodymova derivace*.

Definice 22. Mějme (S, \mathcal{S}) a (T, \mathcal{T}) měřitelné prostory. Řekneme, že zobrazení $\rho : S \times T \rightarrow [0, \infty]$ je *jádro* z (T, \mathcal{T}) do (S, \mathcal{S}) , jestliže

- i) $t \mapsto \rho(A, t)$ je měřitelná funkce na T pro každé $A \in \mathcal{S}$,
- ii) $A \mapsto \rho(A, t)$ je míra na (S, \mathcal{S}) pro každé $t \in T$.

Řekneme, že ρ je *pravděpodobnostní jádro*, jestliže $\rho(\cdot, t)$ je pravděpodobnostní míra pro každé $t \in T$.

Věta 5 (O dezintegraci). *Necht (S, \mathcal{S}) je úplný separabilní metrický prostor s borelovskou σ -algebrou a (T, \mathcal{T}) měřitelný prostor. Necht dále ν je míra na $(S \times T, \mathcal{S} \otimes \mathcal{T})$ taková, že projekce $\mu(\cdot) = \nu(S \times \cdot)$ je σ -konečná. Potom existuje jádro ρ z (T, \mathcal{T}) do (S, \mathcal{S}) takové, že pro každou nezápornou měřitelnou funkci f na $S \times T$ platí*

$$\int_{S \times T} f(s, t) \nu(d(s, t)) = \int_T \int_S f(s, t) \rho(ds, t) \mu(dt).$$

Důkaz. Viz Rataj (2006), věta 7.1. □

Poznámka. Pro každé $A \in \mathcal{S}$ je míra $\nu(A \times \cdot)$ absolutně spojitá vzhledem k míře μ a $\rho(A, \cdot)$ je příslušná Radonova–Nikodymova derivace.

Definice 23. *Campbellovu míru* C asociovanou s náhodnou mírou Ψ na E s rozdělením Q definujeme vztahem

$$\int_{E \times \mathcal{M}} f(x, \mu) C(d(x, \mu)) = \int_{\mathcal{M}} \int_E f(x, \mu) \mu(dx) Q(d\mu),$$

kde f je libovolná nezáporná měřitelná funkce.

Důsledek 1. Necht Ψ je náhodná míra na E s rozdělením Q a mírou intenzity Λ . Potom existuje pravděpodobnostní jádro $x \mapsto P_x$ z (E, \mathcal{B}) do $(\mathcal{M}, \mathfrak{M})$ takové, že

$$\int_{\mathcal{M}} \int_E f(x, \mu) \mu(dx) Q(d\mu) = \int_E \int_{\mathcal{M}} f(x, \mu) P_x(d\mu) \Lambda(dx),$$

kde f je libovolná nezáporná měřitelná funkce na $E \times \mathcal{M}$.

Definice 24. Rozdělení P_x z předchozího důsledku nazýváme *Palmovo rozdělení* náhodné míry Ψ v bodě $x \in E$.

Definice 25. *Redukované Palmovo rozdělení* v bodě $x \in E$ pro bodový proces Φ definujeme jako pravděpodobnostní míru $P_x^!$ předpisem

$$\int_{\mathcal{N}} g(\mu) P_x^!(d\mu) = \int_{\mathcal{N}} g(\mu - \delta_x) P_x(d\mu),$$

kde g je libovolná nezáporná měřitelná funkce.

Poznámka. Pro bodový proces Φ můžeme Palmovo rozdělení P_x interpretovat jako podmíněné rozdělení procesu Φ za podmínky, že x je bodem procesu Φ . Redukované Palmovo rozdělení $P_x^!$ můžeme interpretovat jako podmíněné rozdělení procesu Φ za podmínky, že x je bodem procesu Φ , který není počítán.

Definice 26. Pro $n \in \mathbb{N}$ označme $E^{[n]} = \{(x_1, \dots, x_n) \in E^n, x_i \neq x_j, i \neq j\}$ množinu n -tic navzájem různých bodů z E . Necht dále $\mathcal{B}^{[n]}$ značí stopu σ -algebry \mathcal{B}^n na $E^{[n]}$. *Faktoriální momentovou míru n -tého řádu* $\alpha^{(n)}$ náhodné míry Ψ definujeme předpisem

$$\alpha^{(n)}(B) = \mathbb{E} \Psi^{[n]}(B), \quad B \in \mathcal{B}^{[n]},$$

kde $\Psi^{[n]}$ značí restrikcí Ψ^n na $E^{[n]}$.

Poznámka. Platí $\alpha^{(1)} = \Lambda$, tedy faktoriální momentová míra prvního řádu je míra intenzity.

Poznámka. Pro jednoduchý bodový proces Φ můžeme psát

$$\alpha^{(n)}(B) = \mathbb{E} \sum_{\substack{\neq \\ X_1, \dots, X_n \in \text{supp } \Phi}} \mathbf{1}\{(X_1, \dots, X_n) \in B\}, \quad B \in \mathcal{B}^n,$$

kde symbol $\sum_{\substack{\neq \\ X_1, \dots, X_n \in \text{supp } \Phi}}$ značí sumu přes všechny navzájem různé n -tice z nosiče Φ , tedy $X_i \neq X_j$ pro $i \neq j$.

Věta 6 (Campbellova). *Nechť Φ je jednoduchý bodový proces. Pro libovolnou nezápornou měřitelnou funkci f platí*

$$\mathbb{E} \sum_{X_1, \dots, X_n \in \text{supp } \Phi}^{\neq} f(X_1, \dots, X_n) = \int_E \cdots \int_E f(x_1, \dots, x_n) \alpha^{(n)}(d(x_1, \dots, x_n)).$$

Důkaz. Viz Schneider a Weil (2008), věta 3.1.3. Pro $n = 1$ také viz Chiu a kol. (2013), věta 4.1. □

3.2.2 Prostorový bodový proces

Uvažujme prostor $E = \mathbb{R}^d$ se standardní eukleidovskou metrikou a borelovskou σ -algebrou \mathcal{B}^d . Bodový proces na takovém prostoru nazveme *prostorový bodový proces*. Dále označme \mathcal{B}_0^d systém všech omezených borelovských podmnožin \mathbb{R}^d .

Definice 27. Necht pro $z \in \mathbb{R}^d$ značí t_z operátor posunutí na \mathcal{M} definovaný předpisem

$$t_z \mu(B) = \mu(B - z), \quad \mu \in \mathcal{M}, \quad B \in \mathcal{B}^d.$$

Řekneme, že náhodná míra Ψ je *stacionární*, jestliže její rozdělení Q je invariantní vůči posunutí, tedy $Qt_z^{-1} = Q$ pro každé $z \in \mathbb{R}^d$.

Definice 28. Pro stacionární náhodnou míru Ψ s lokálně konečnou mírou intenzity Λ definujeme *intenzitu* λ předpisem

$$\Lambda(B) = \lambda|B|, \quad B \in \mathcal{B}^d,$$

kde $|B|$ značí Lebesgueovu míru množiny B .

Poznámka. Intenzita je nezáporná konstanta. V případě bodového procesu udává intenzita střední počet bodů na jednotku objemu.

Existence intenzity λ je zaručena díky stacionaritě náhodné míry, neboť platí $\Lambda(B + z) = \Lambda(B)$ pro každé $z \in \mathbb{R}^d$, a díky faktu, že Lebesgueova míra je jediná translačně-invariantní míra na $(\mathbb{R}^d, \mathcal{B}^d)$.

3.3 Kótovaný bodový proces

Přiřadíme-li atomům bodového procesu značky (kóty), v případě procesů na \mathbb{R}^2 např. výšku stromu, druh (jedle, smrk, ...) či velikost zrna v případě bodových procesů na \mathbb{R}^3 , dostaneme tzv. *kótovaný bodový proces*.

Definice 29. Mějme úplný separabilní metrický prostor \mathbb{M} , který nazveme *prostor kót*, a borelovskou σ -algebrou $\mathcal{B}(\mathbb{M})$ na tomto prostoru. *Kótovaný bodový proces* $\Phi_{\mathbb{m}}$ definujeme jako jednoduchý bodový proces na prostoru $\mathbb{R}^d \times \mathbb{M}$ s mírou intenzity $\Lambda_{\mathbb{m}}$ splňující $\Lambda_{\mathbb{m}}(B \times \mathbb{M}) < \infty$ pro každé $B \in \mathcal{B}_0^d$.

Pro kótovaný bodový proces $\Phi_{\mathbb{m}}$ můžeme uvažovat také příslušný *nekótovaný bodový proces* Φ , který vznikne projekcí z prostoru $\mathbb{R}^d \times \mathbb{M}$ na \mathbb{R}^d , neboli $\Phi(B) = \Phi_{\mathbb{m}}(B \times \mathbb{M})$, $B \in \mathcal{B}^d$.

Kóty mohou být jednorozměrné diskrétní a spojité, ale také ze složitějších prostorů jako například z prostorů reprezentujících orientace zrn krystalů.

Poznámka. Kótovaný proces $\Phi_{\mathbb{m}}$ můžeme podle tvrzení 3 reprezentovat jako

$$\Phi_{\mathbb{m}} = \sum_i \delta_{(X_i, M_i)}.$$

3.3.1 Modely kótování

Uvedeme zde dva modely kótovaných bodových procesů, které budeme dále využívat. První model lze nalézt např. v Schneider a Weil (2008), definice 3.5.2.

Definice 30. Kótovaný bodový proces $\Phi_m = \sum_i \delta_{(X_i, M_i)}$ nazveme *nezávisle kótovaným*, jestliže $\{M_i\}$ jsou nezávislé stejně rozdělené náhodné elementy s hodnotami v \mathbb{M} , které jsou nezávislé na bodovém procesu $\Phi = \sum_i \delta_{X_i}$.

Druhý model, který lze nalézt v Daley a Vere-Jones (2003), definice 6.4.III, není tolik restriktivní.

Definice 31. Kótovaný bodový proces $\Phi_m = \sum_i \delta_{(X_i, M_i)}$ nazveme *podmíněně nezávisle kótovaným*, jestliže podmíněně při bodovém procesu $\Phi = \sum_i \delta_{X_i}$ jsou $\{M_i\}$ nezávislé náhodné elementy s hodnotami v \mathbb{M} a rozdělení kóty M_i závisí pouze na příslušném bodu X_i .

Poznámka. Nezávisle kótovaný bodový proces je rovněž podmíněně nezávisle kótovaný.

3.3.2 Charakteristiky kótovaného bodového procesu

Podobně jako u nekótovaného prostorového bodového procesu zavedme pojem stacionarity a uvedme některé charakteristiky popisující kótovaný bodový proces.

Definice 32. Nechť pro $z \in \mathbb{R}^d$ značí t_z operátor posunutí definovaný předpisem

$$t_z \mu(A \times L) = \mu((A - z) \times L), \quad \mu \in \mathcal{N}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{M}), \quad A \in \mathcal{B}^d, \quad L \in \mathcal{B}(\mathbb{M}).$$

Řekneme, že kótovaný bodový proces Φ_m je *stacionární*, jestliže má stejné rozdělení jako $t_z \Phi_m$ pro každé $z \in \mathbb{R}^d$.

Definice 33. *Míru intenzity* kótovaného bodového procesu Φ_m definujeme předpisem

$$\Lambda_m(B \times L) = \mathbb{E} \Phi_m(B \times L), \quad B \in \mathcal{B}^d, \quad L \in \mathcal{B}(\mathbb{M}).$$

Míra intenzity udává střední počet bodů procesu v množině B s kótou z množiny L .

Poznámka. Pro fixní $L \in \mathcal{B}(\mathbb{M})$ je míra $\Lambda_m(\cdot \times L)$ absolutně spojitá vzhledem k míře intenzity Λ příslušného nekótovaného procesu.

Věta 7. *Pro stacionární kótovaný bodový proces Φ_m existuje pravděpodobnostní míra \mathbb{Q}_m na prostoru \mathbb{M} tak, že pro míru intenzity platí*

$$\Lambda_m(B \times L) = \lambda |B| \mathbb{Q}_m(L), \quad B \in \mathcal{B}^d, \quad L \in \mathcal{B}(\mathbb{M}),$$

kde nezáporná konstanta λ značí intenzitu příslušného nekótovaného procesu.

Důkaz. Důkaz, který zde předvedeme, lze nalézt např. v Schneider a Weil (2008), věta 3.5.1.

Pro každé $L \in \mathcal{B}(\mathbb{M})$ je díky stacionaritě míra $\Lambda_m(\cdot \times L)$ translačně invariantní na \mathbb{R}^d . Navíc předpokládáme, že je lokálně konečná, takže je násobkem Lebesgueovy míry. Můžeme tedy psát $\Lambda_m(B \times L) = \lambda_L |B|$. Položme $\mathbb{Q}_m(L) = \lambda_L / \lambda$. Snadno se přesvědčíme, že jde o pravděpodobnostní míru. □

Definice 34. Pravděpodobnostní míru \mathbb{Q}_m z věty 7 nazveme *stacionární rozdělení kót*.

Pro $L \in \mathcal{B}(\mathbb{M})$ definujme *intenzitu kótovaného procesu vzhledem k množině L* předpisem

$$\lambda_L = \lambda \mathbb{Q}_m(L).$$

Poznámka. Pro proces Φ_m platí

$$\lambda_{\mathbb{M}} = \lambda.$$

Věta 8 (Campbellova). *Pro libovolnou nezápornou měřitelnou funkci f na $\mathbb{R}^d \times \mathbb{M}$ platí*

$$\mathbb{E} \sum_{(X,M) \in \text{supp } \Phi_m} f(X, M) = \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{M}} f(x, m) \Lambda_m(d(x, m)).$$

Důkaz. Jedná se o větu 6 pro $n = 1$ a $E = \mathbb{R}^d \times \mathbb{M}$. □

Poznámka. Necht Φ_m je kótovaný bodový proces. *Faktoriální momentovou míru druhého řádu tohoto procesu lze pak vyjádřit předpisem*

$$\alpha_m^{(2)}(B_1 \times B_2 \times L_1 \times L_2) = \mathbb{E} \sum_{\substack{(X_i, M_i) \in \text{supp } \Phi_m \\ (X_j, M_j) \in \text{supp } \Phi_m \\ i \neq j}} \mathbf{1}_{B_1}(X_i) \mathbf{1}_{B_2}(X_j) \mathbf{1}_{L_1}(M_i) \mathbf{1}_{L_2}(M_j)$$

pro libovolné $B_1, B_2 \in \mathcal{B}^d$, $L_1, L_2 \in \mathcal{B}(\mathbb{M})$.

Poznámka. Necht $\alpha^{(2)}$ je faktoriální momentová míra druhého řádu příslušného nekótovaného bodového procesu. Platí, že $\alpha_m^{(2)}(\cdot \times \cdot \times \mathbb{M} \times \mathbb{M}) = \alpha^{(2)}(\cdot \times \cdot)$, a navíc $\alpha_m^{(2)}(\cdot \times \cdot \times L_1 \times L_2)$ je absolutně spojitá vzhledem k $\alpha^{(2)}$. Z Radonovy–Nikodymovy věty (věta 4) pak existuje Radonova–Nikodymova derivace. Z věty 5 plyne následující důsledek.

Důsledek 2. Necht míra $\alpha^{(2)}$ je σ -konečná. Potom existuje pravděpodobnostní jádro $(x, y) \mapsto P_{xy}$ tak, že

$$\alpha_m^{(2)}(B_1 \times B_2 \times L_1 \times L_2) = \int_{B_1 \times B_2} P_{xy}(L_1 \times L_2) \alpha^{(2)}(d(x, y))$$

pro libovolné $B_1, B_2 \in \mathcal{B}^d$, $L_1, L_2 \in \mathcal{B}(\mathbb{M})$.

Definice 35. Pravděpodobnostní rozdělení P_{xy} z důsledku 2 nazveme *dvoubodové rozdělení kót* v bodech $x, y \in \mathbb{R}^d$, $x \neq y$.

Poznámka. Definici dvoubodového rozdělení kót můžeme nalézt v Stoyan (1984) nebo Chiu a kol. (2013), podkapitola 4.3.5. Jde o sdružené rozdělení kót bodů x a y za podmínky, že se skutečně jedná o body příslušného bodového procesu.

V případě stacionárního kótovaného bodového procesu je míra P_{xy} invariantní vůči diagonálním posunům, tedy $P_{xy} = P_{oh}$ pro libovolné $x, y \in \mathbb{R}^d$, přičemž $y - x = h \in \mathbb{R}^d$ a o značí počátek v \mathbb{R}^d .

Definice 36. Necht Φ_m je stacionární kótovaný bodový proces se stacionárním rozdělením kót \mathbb{Q}_m . *Korelační funkci kót* definujeme jako

$$\kappa_t(h) = \int_{\mathbb{M} \times \mathbb{M}} t(m_1, m_2) P_{oh}(d(m_1, m_2)), \quad h \in \mathbb{R}^d,$$

kde t je pevně zvolená nezáporná měřitelná funkce na $\mathbb{M} \times \mathbb{M}$. Můžeme také pracovat s normalizovanou verzí tvaru

$$k_t(h) = \frac{\kappa_t(h)}{c_t}, \quad h \in \mathbb{R}^d,$$

kde

$$c_t = \int_{\mathbb{M}} \int_{\mathbb{M}} t(m_1, m_2) \mathbb{Q}_m(dm_1) \mathbb{Q}_m(dm_2).$$

Poznámka. Předpokládejme, že pozorujeme realizaci Φ_m v množině $D \in \mathcal{B}_0^d$. Stejně jako u odhadu variogramu uvážíme dělení $D - D$ na podskupiny H_1, \dots, H_k s reprezentujícími prvky h_1, \dots, h_k . Empirický odhad korelační funkce kót má potom tvar

$$\hat{\kappa}_t(h_l) = \frac{\sum_{(X_i, M_i), (X_j, M_j) \in (\text{supp } \Phi_m) \cap (D \times \mathbb{M})} t(M_i, M_j) \mathbf{1}\{X_i - X_j \in H_l\}}{\sum_{(X_i, M_i), (X_j, M_j) \in (\text{supp } \Phi_m) \cap (D \times \mathbb{M})} \mathbf{1}\{X_i - X_j \in H_l\}}, \quad l = 1, \dots, k.$$

Normalizovanou verzi odhadneme jako

$$\hat{k}_t(h_l) = \frac{\hat{\kappa}_t(h_l)}{\hat{c}_t}, \quad (3.3)$$

kde

$$\hat{c}_t = \frac{1}{\Phi_m(D \times \mathbb{M})^2} \sum_{(X_i, M_i), (X_j, M_j) \in (\text{supp } \Phi_m) \cap (D \times \mathbb{M})} t(M_i, M_j).$$

Definice 37. Mějme prostor kót $\mathbb{M} = \mathbb{R}^+$ tvořen nezápornými reálnými čísly. Funkce $k_t(h)$ s volbou $t(m_1, m_2) = m_1 m_2$ se nazývá *Stoyanova korelační funkce kót* a označuje se $k_{mm}(h)$.

Poznámka. U odhadu $k_{mm}(h)$ vystupuje ve jmenovateli $\hat{c}_t = (\hat{\mu})^2$, kde

$$\hat{\mu} = \frac{1}{\Phi_m(D \times \mathbb{M})} \sum_{(X_i, M_i) \in \text{supp } \Phi_m} M_i \mathbf{1}\{X_i \in D\}$$

je průměr pozorovaných kót.

3.4 Proces částic

Uvažujme úplný separabilní metrický prostor (E, ϱ) , kde E je prostor neprázdných kompaktních podmnožin \mathbb{R}^d a ϱ je Hausdorffova metrika. Potom mluvíme o speciálním bodovém procesu, a to procesu částic (Schneider a Weil (2008), podkapitola 4.1).

Definice 38. *Proces částic* na \mathbb{R}^d definujeme jako bodový proces na množině $\mathcal{C}'(\mathbb{R}^d)$ neprázdných kompaktních podmnožin \mathbb{R}^d .

Proces konvexních částic na \mathbb{R}^d definujeme jako bodový proces na množině $\mathcal{K}'(\mathbb{R}^d)$ neprázdných konvexních kompaktních podmnožin \mathbb{R}^d .

Definice 39. Necht $c : \mathcal{K}'(\mathbb{R}^d) \rightarrow \mathbb{R}^d$ je měřitelné zobrazení, které splňuje podmínku $c(K + x) = c(K) + x$ pro každé $K \in \mathcal{K}'(\mathbb{R}^d)$ a $x \in \mathbb{R}^d$. Řekneme, že $c(K)$ je *referenční bod* množiny K .

Poznámka. Za referenční bod můžeme vzít například těžiště nebo střed opsané koule.

Definice 40. Označme $\mathcal{K}'_0 = \{C \in \mathcal{K}'(\mathbb{R}^d) : c(C) = o\}$ systém neprázdných konvexních kompaktních množin s referenčním bodem v počátku.

3.5 Náhodná mozaika

Jedním z často používaných geometrických modelů je tzv. náhodná mozaika (Okabe a kol. (2000), Schneider a Weil (2008), Chiu a kol. (2013)). Jde o lokálně konečné rozdělení eukleidovského prostoru na disjunktní podmnožiny. V případě dvourozměrného prostoru jde o rozdělení na mnohoúhelníky, ve trojrozměrném prostoru pak o rozdělení na mnohostěny. Pomocí tohoto modelu můžeme modelovat například struktury materiálů.

Definice 41. Necht $D \subseteq \mathbb{R}^d$. Označme \mathcal{K} systém všech konvexních kompaktních podmnožin množiny D . Dále označme \mathcal{K}' systém všech neprázdných konvexních kompaktních podmnožin množiny D , tedy $\mathcal{K}' = \mathcal{K} \setminus \{\emptyset\}$. Stejně jako v definici 40 označme $\mathcal{K}'_0 = \{C \in \mathcal{K}' : c(C) = o\}$.

Definice 42. *Mozaika* definovaná na množině D je spočetný systém $T = \{C_i, i \in \mathcal{I}\}$ množin C_i , které nazýváme *zrna*, splňující:

- i) $\text{int}(C_i) \cap \text{int}(C_j) \neq \emptyset$ pro $i \neq j$,
- ii) $\bigcup_{i \in \mathcal{I}} C_i = D$,
- iii) T je lokálně konečný systém, tedy $|\{i \in \mathcal{I} : C_i \cap B \neq \emptyset\}| < \infty$ pro každou omezenou množinu $B \in \mathcal{B}_0^d$,
- iv) $C_i \in \mathcal{K}'$,

kde $\text{int}(C_i)$ značí vnitřek množiny C_i .

Poznámka. Uvažujeme-li $D = \mathbb{R}^d$, mají zrna C_i tvar konvexního mnohostěnu (Schneider a Weil (2008), lemma 10.1.1.).

Podobně jako u náhodného pole na mříži zavedme pojem sousedství dvou zrn.

Definice 43. Necht \mathcal{H}^{d-1} značí $(d-1)$ -dimenzionální Hausdorffovu míru na \mathbb{R}^d . Řekneme, že zrna C_i a C_j jsou *sousedé*, jestliže $\mathcal{H}^{d-1}(C_i \cap C_j) > 0$, $i \neq j$. Tento případ budeme značit $C_i \sim C_j$, opačný $C_i \not\sim C_j$.

Poznámka. Definice 43 říká, že dvě různá zrna označíme za sousední, jestliže sdílí společnou stěnu. Zrna lze také označit za sousední, sdílejí-li společnou hranu či pouze jeden vrchol.

Definice 44. Necht $\{x_i, i \in \mathcal{I}\}$ je lokálně konečný systém bodů z D (tzv. generátorů), tj. $B \cap D$ obsahuje konečně mnoho x_i pro každou $B \in \mathcal{B}_0^d$. *Voronoiova mozaika* je kolekce zrn C_i definovaných předpisem

$$C_i = \{y \in D, \|y - x_i\| \leq \|y - x_j\| \forall j \in \mathcal{I}\}, \quad i \in \mathcal{I}.$$

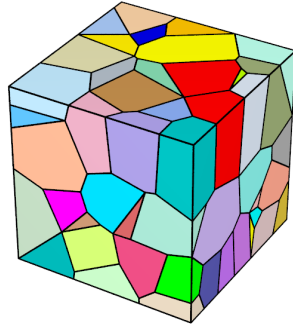
Ke každému generátoru x_i uvažujme navíc váhu $w_i \in \mathbb{R}$ a položme

$$C_i = \{y \in D, \|y - x_i\|^2 - w_i \leq \|y - x_j\|^2 - w_j \forall j \in \mathcal{I}\}, \quad i \in \mathcal{I}.$$

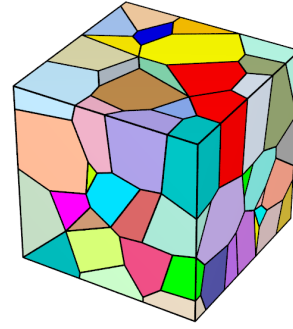
Laguerrova mozaika je kolekce těch zrn C_i , které jsou neprázdné.

Poznámka. Všimněme si, že v definici Laguerrovy mozaiky byla Eukleidova vzdálenost pouze nahrazena tzv. *energetickou vzdáleností*. Energetická vzdálenost bodu y vzhledem k dvojici (x, w) je definována předpisem

$$\text{pow}(y, (x, w)) = \|x - y\|^2 - w.$$



(a) Voronoiova mozaika.



(b) Laguerrova mozaika.

Obrázek 3.2: Porovnání Voronoiovy a Laguerrovy mozaiky se stejnými generátory.

Poznámka. Na obrázku 3.2 je vykreslena Voronoiova a Laguerrova mozaika na množině $D = [0, 100] \times [0, 100] \times [0, 100] \subseteq \mathbb{R}^3$ pro stejných 100 generátorů, které jsou generovány rovnoměrně na množině D s příslušnými vahami w_i generovanými rovnoměrně na intervalu $(0, 10)$. Na rozdíl od Voronoiovy mozaiky nemusí pro Laguerrovu mozaiku ze všech generátorů vzniknout zrno.

Definice 45. Označme \mathbb{T} množinu všech mozaik na D . Tuto množinu můžeme opatřit σ -algebrou \mathcal{T} , která je generovaná množinami

$$\left\{ \{C_i\} \in \mathbb{T} : \bigcup_i \partial C_i \cap K \neq \emptyset \right\}, \quad K \in \mathcal{K},$$

kde ∂ značí hranici množiny.

Nyní můžeme zavést pojem náhodné mozaiky.

Definice 46. *Náhodnou mozaiku* definujeme jako jednoduchý bodový proces $\sum_i \delta_{\Xi_i}$ na \mathcal{K}' takový, že $\{\Xi_i\} \in \mathbb{T}$.

Poznámka. Náhodná mozaika je speciální případ procesu konvexních částic. Můžeme ji také definovat jako náhodný element s hodnotami v prostoru $(\mathbb{T}, \mathcal{T})$ viz Schneider a Weil (2008), podkapitola 10.1, nebo Chiu a kol. (2013), podkapitola 9.1.

Poznámka. Příkladem náhodné mozaiky je Voronoiova mozaika generovaná atomy jednoduchého bodového procesu na D . Náhodnou Laguerrovu mozaiku můžeme obdržet z kótovaného bodového procesu na $D \times \mathbb{R}$, ve kterém ke každému atomu bodového procesu generátorů asociujeme váhu jako jeho kótu.

3.6 Náhodná kótovaná mozaika

Přiřadíme-li, podobně jako u bodových procesů, jednotlivým zrnům náhodné mozaiky kóty, hovoříme o náhodné kótované mozaice.

Definice 47. Mějme \mathbb{M} prostor kót. *Náhodnou kótovanou mozaiku* $\Xi_m = \sum_{i \in \mathcal{I}} \delta_{(\Xi_i, M_i)}$ definujeme jako jednoduchý bodový proces na prostoru $\mathcal{K}' \times \mathbb{M}$ takový, jehož projekce $\sum_{i \in \mathcal{I}} \delta_{\Xi_i}$ na prostor \mathcal{K}' je náhodná mozaika na D .

Poznámka. Náhodná kótovaná mozaika je speciální případ kótovaného procesu konvexních částic na \mathbb{R}^d (Schneider a Weil (2008), podkapitola 4.1).

Poznámka. Kóty mohou být nejen kategorické či reálné, např. objem zrna, sfericita, počet sousedních zrn, ale mohou být mnohem složitější, např. orientace zrna, tenzor napětí a deformace.

Definice 48. Necht pro $z \in \mathbb{R}^d$ značí t_z operátor posunutí definovaný předpisem

$$t_z \mu(A \times L) = \mu((A - z) \times L), \quad \mu \in \mathcal{N}(\mathcal{K}' \times \mathbb{M}), \quad A \in \mathcal{B}(\mathcal{K}'), \quad L \in \mathcal{B}(\mathbb{M}),$$

kde $A - z = \{C - z, C \in A\}$ a $C - z = \{x - z, x \in C\}$. Řekneme, že náhodná kótovaná mozaika Ξ_m je *stacionární*, jestliže má stejné rozdělení jako $t_z \Xi_m$ pro každé $z \in \mathbb{R}^d$.

3.6.1 Modely kótování

Analogicky k modelům kótovaných bodových procesů můžeme definovat modely náhodných kótovaných mozaik.

Definice 49. Náhodnou kótovanou mozaiku $\Xi_m = \sum_{i \in \mathcal{I}} \delta_{(\Xi_i, M_i)}$ nazveme *nezávisle kótovanou*, jestliže kóty $\{M_i\}$ jsou nezávislé stejně rozdělené náhodné elementy s hodnotami v \mathbb{M} a zároveň nezávislé na náhodné mozaice $\Xi = \sum_{i \in \mathcal{I}} \delta_{\Xi_i}$.

Definice 50. Náhodnou kótovanou mozaiku $\Xi_m = \sum_{i \in \mathcal{I}} \delta_{(\Xi_i, M_i)}$ nazveme *podmíněně nezávisle kótovanou*, jestliže podmíněně při náhodné mozaice $\Xi = \sum_{i \in \mathcal{I}} \delta_{\Xi_i}$ jsou $\{M_i\}$ nezávislé náhodné elementy s hodnotami v \mathbb{M} a rozdělení kóty M_i závisí pouze na příslušném zrně Ξ_i .

Poznámka. Nezávisle kótovaná náhodná mozaika je rovněž podmíněně nezávisle kótovaná.

3.6.2 Charakteristiky náhodné kótované mozaiky

Podobně jako u kótovaných bodových procesů uvedeme některé charakteristiky popisující náhodné kótované mozaiky.

Větu 7 můžeme pro náhodné kótované mozaiky přepsat následovně.

Věta 9. Necht Ξ_m je stacionární náhodná kótovaná mozaika. Potom existuje $\lambda \in (0, \infty)$ a pravděpodobnostní míra \mathbb{Q}_m na $\mathcal{K}'_0 \times \mathbb{M}$ tak, že

$$\mathbb{E} \sum_i f(\Xi_i, M_i) = \lambda \int_{\mathcal{K}'_0 \times \mathbb{M}} \int_{\mathbb{R}^d} f(K + x, m) \, dx \, \mathbb{Q}_m(d(K, m)),$$

kde f je libovolná nezáporná měřitelná funkce.

Důkaz. Viz Schneider a Weil (2008), věta 4.1.1. □

Definice 51. Intenzitou náhodné kótované mozaiky nazýváme konstantu λ z předchozí věty. Pravděpodobnostní míru \mathbb{Q}_m nazýváme *stacionární rozdělení zrna a jeho kóty kótované mozaiky* Ξ_m . Marginální rozdělení $P_m(\cdot) = \mathbb{Q}_m(\mathcal{K}'_0 \times \cdot)$ nazveme *stacionární rozdělení kót* a náhodný element s rozdělením P_m nazveme *typickou kótou*.

Definice 52. Pro náhodnou kótovanou mozaiku $\Xi_m = \sum_{i \in \mathcal{I}} \delta_{(\Xi_i, M_i)}$ definujeme *faktoriální momentovou míru* $\alpha_m^{(2)}$ předpisem

$$\begin{aligned} \alpha_m^{(2)}(B_1 \times B_2 \times K_1 \times K_2 \times L_1 \times L_2) &= \mathbb{E} \sum_{i, j \in \mathcal{I}}^{\neq} \mathbf{1}\{\Xi_i \sim \Xi_j\} \mathbf{1}\{M_i \in L_1, M_j \in L_2\} \\ &\quad \mathbf{1}\{c(\Xi_i) \in B_1, c(\Xi_j) \in B_2\} \mathbf{1}\{\Xi_i - c(\Xi_i) \in K_1, \Xi_j - c(\Xi_j) \in K_2\} \end{aligned}$$

pro libovolné $B_1, B_2 \in \mathcal{B}^d$, $K_1, K_2 \in \mathcal{B}(\mathcal{K}'_0)$, $L_1, L_2 \in \mathcal{B}(\mathbb{M})$.

Poznámka. Označme $\alpha^{(2)}(\cdot \times \cdot) = \alpha_m^{(2)}(\cdot \times \cdot \times \mathcal{K}'_0 \times \mathcal{K}'_0 \times \mathbb{M} \times \mathbb{M})$. Potom míra $\alpha_m^{(2)}(\cdot \times \cdot \times K_1 \times K_2 \times L_1 \times L_2)$ je absolutně spojitá vzhledem k míře $\alpha^{(2)}$. Z Radonovy–Nikodymovy věty (věta 4) existuje Radonova–Nikodymova derivace. Potom z věty o desintegraci (věta 5) plyne následující věta.

Důsledek 3. Necht $\alpha^{(2)}$ je σ -konečná. Potom existuje jádro $(x, y) \mapsto P_{xy}$ tak, že

$$\alpha_m^{(2)}(B_1 \times B_2 \times K_1 \times K_2 \times L_1 \times L_2) = \int_{B_1 \times B_2} P_{xy}(K_1 \times K_2 \times L_1 \times L_2) \alpha^{(2)}(d(x, y)) \quad (3.4)$$

pro libovolné $B_1, B_2 \in \mathcal{B}^d$, $K_1, K_2 \in \mathcal{B}(\mathcal{K}'_0)$, $L_1, L_2 \in \mathcal{B}(\mathbb{M})$.

Definice 53. Míru P_{xy} z důsledku 3 nazveme *rozdělení sousedních zrn s kótami* s referenčními body v x a y .

Poznámka. Rozdělení P_{xy} může být chápáno jako podmíněné rozdělení $(\Xi_i - c(\Xi_i), \Xi_j - c(\Xi_j), M_i, M_j)$ za podmínky, že Ξ_i a Ξ_j jsou sousední zrna s kótami M_i a M_j a mají referenční body v x a y .

Poznámka. Pro stacionární náhodnou kótovanou mozaiku je míra P_{xy} invariantní vůči diagonálním posunům, tedy $P_{xy} = P_{oh}$ pro libovolné $x, y \in \mathbb{R}^d$, $y - x = h \in \mathbb{R}^d$.

Navíc platí, že i $\alpha^{(2)}$ je invariantní vůči těmto posunům, tedy $\alpha^{(2)}(B_1 \times B_2) = \alpha^{(2)}((B_1 + x) \times (B_2 + x))$, $B_1, B_2 \in \mathcal{B}^d$, $x \in \mathbb{R}^d$. Z toho plyne následující věta.

Věta 10. *Mějme stacionární náhodnou kótovanou mozaiku Ξ_m s intenzitou λ . Potom existuje míra ν na \mathbb{R}^d taková, že*

$$\alpha_m^{(2)}(B_1 \times B_2 \times K_1 \times K_2 \times L_1 \times L_2) = \lambda \int_{B_1} \int_{B_2 - x} P_{xy}(K_1 \times K_2 \times L_1 \times L_2) \nu(dy) dx \quad (3.5)$$

pro libovolné $B_1, B_2 \in \mathcal{B}^d$, $K_1, K_2 \in \mathcal{B}(\mathcal{K}'_0)$, $L_1, L_2 \in \mathcal{B}(\mathbb{M})$.

Důkaz. Podle Daley a Vere-Jones (2008), lemma 12.1.IV, existuje míra ν taková, že

$$\alpha^{(2)}(B_1 \times B_2) = \lambda \int_{B_1} \nu(B_2 - x) dx.$$

Nyní stačí použít důsledek 3. □

3.6.3 Charakteristiky náhodné mozaiky s kótami z prostoru reprezentující orientace

Dále se omezíme pouze na prostor \mathbb{R}^3 . Za prostor kót \mathbb{M} vezmeme prostor reprezentující orientace zrn (můžeme uvažovat prostor Eulerových úhlů, \mathbb{S}_+^3 či $SO(3)$) a uvažujme disorientaci ζ mezi dvěma zrny, tedy minimální úhel misorientace mezi jejich orientacemi, z podkapitoly 2.1.5. Uvedeme zde charakteristiky pro náhodné mozaiky s těmito kótami (Pawlas a kol., 2020).

Poznámka. O pravděpodobnostní hustotě disorientace za rozdělení P_{xy} z definice 53 pojednává García a Vaudin (2007) či Beausir a kol. (2009).

Definice 54. Mějme stacionární náhodnou kótovanou mozaiku Ξ_m . *Střední disorientaci* dvou nezávislých typických kót definujeme předpisem

$$\bar{\Delta} = \int_{\mathbb{M}} \int_{\mathbb{M}} \zeta(m_1, m_2) P_m(dm_1) P_m(dm_2).$$

Distribuční funkci disorientace dvou nezávislých typických kót pak definujeme jako

$$\bar{F}(\beta) = \int_{\mathbb{M}} \int_{\mathbb{M}} \mathbf{1}\{\zeta(m_1, m_2) \leq \beta\} P_m(dm_1) P_m(dm_2)$$

pro $\beta \in [0, \beta_{\max}]$.

Poznámka. Číslo β_{\max} udává maximální možnou hodnotu disorientace mezi orientacemi zrn. Pro kubickou krystalovou soustavu je $\beta_{\max} \doteq 62,8^\circ$.

Poznámka. Předpoklad stacionarity v definici 54 lze nahradit předpokladem nezávisle kótované mozaiky s kótami rozdělenými podle P_m .

Při výpočtu disorientace se můžeme omezit pouze na sousední zrna a úhly disorientace navíc vážít. To dává vzniknout následující definici.

Definice 55. Mějme funkci vah w definovanou na $\mathcal{K}' \times \mathcal{K}'$ splňující $w(K_1, K_2) = 0$ pro K_1, K_2 takové, že $\mathcal{H}^2(K_1 \cap K_2) = 0$ a označme $Q_{oh}(\cdot \times \cdot) = P_{oh}(\cdot \times \cdot \times \mathbb{M} \times \mathbb{M})$. *Střední váženou disorientaci* sousedních zrn pak definujeme jako

$$\Delta = \frac{1}{\bar{w}} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathcal{K}'_0 \times \mathcal{K}'_0 \times \mathbb{M} \times \mathbb{M}} w(K_1, h + K_2) \zeta(m_1, m_2) P_{oh}(d(K_1, K_2, m_1, m_2)) \nu(dh), \quad (3.6)$$

kde

$$\bar{w} = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathcal{K}'_0 \times \mathcal{K}'_0} w(K_1, h + K_2) Q_{oh}(d(K_1, K_2)) \nu(dh).$$

Váženou distribuční funkci disorientace sousedních zrn definujeme jako

$$F(\beta) = \frac{1}{\bar{w}} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathcal{K}'_0 \times \mathcal{K}'_0 \times \mathbb{M} \times \mathbb{M}} w(K_1, h + K_2) \mathbf{1}\{\zeta(m_1, m_2) \leq \beta\} P_{oh}(d(K_1, K_2, m_1, m_2)) \nu(dh) \quad (3.7)$$

pro $\beta \in [0, \beta_{\max}]$.

Tvrzení 11. *Uvažujme stacionární náhodnou kótovanou mozaiku $\Xi_m = \sum_{i \in \mathcal{I}} \delta_{(\Xi_i, M_i)}$. Předpokládejme, že pozorujeme zrna s referenčními body v omezené množině D . Necht*

$$\Delta_0 = \frac{\sum_{i,j} w(\Xi_i, \Xi_j) \zeta(M_i, M_j) \mathbf{1}\{c(\Xi_i) \in D\}}{\sum_{i,j} w(\Xi_i, \Xi_j) \mathbf{1}\{c(\Xi_i) \in D\}},$$

$$F_0(\beta) = \frac{\sum_{i,j} w(\Xi_i, \Xi_j) \mathbf{1}\{\zeta(M_i, M_j) \leq \beta\} \mathbf{1}\{c(\Xi_i) \in D\}}{\sum_{i,j} w(\Xi_i, \Xi_j) \mathbf{1}\{c(\Xi_i) \in D\}}.$$

Statistiky Δ_0 , resp. $F_0(\beta)$, jsou podílově nestrannými odhady charakteristik Δ (3.6), resp. $F(\beta)$ (3.7), tedy

$$\Delta = \frac{\mathbb{E} \left[\sum_{i,j} w(\Xi_i, \Xi_j) \zeta(M_i, M_j) \mathbf{1}\{c(\Xi_i) \in D\} \right]}{\mathbb{E} \left[\sum_{i,j} w(\Xi_i, \Xi_j) \mathbf{1}\{c(\Xi_i) \in D\} \right]},$$

$$F(\beta) = \frac{\mathbb{E} \left[\sum_{i,j} w(\Xi_i, \Xi_j) \mathbf{1}\{\zeta(M_i, M_j) \leq \beta\} \mathbf{1}\{c(\Xi_i) \in D\} \right]}{\mathbb{E} \left[\sum_{i,j} w(\Xi_i, \Xi_j) \mathbf{1}\{c(\Xi_i) \in D\} \right]}.$$

Důkaz. Začneme jmenovatelem obou statistik. Pro jeho střední hodnotu platí

$$\begin{aligned}
& \mathbb{E} \sum_{i,j} w(\Xi_i, \Xi_j) \mathbf{1}\{c(\Xi_i) \in D\} = \\
&= \int_{D \times \mathbb{R}^3 \times \mathcal{K}'_0 \times \mathcal{K}'_0 \times \mathbb{M} \times \mathbb{M}} w(K_1 + x, K_2 + y) \alpha_{\mathbb{m}}^{(2)}(d(x, y, K_1, K_2, m_1, m_2)) \\
&\stackrel{(3.4)}{=} \int_{D \times \mathbb{R}^3} \int_{\mathcal{K}'_0 \times \mathcal{K}'_0 \times \mathbb{M} \times \mathbb{M}} w(K_1 + x, K_2 + y) P_{xy}(d(K_1, K_2, m_1, m_2)) \alpha^{(2)}(d(x, y)) \\
&= \int_{D \times \mathbb{R}^3} \int_{\mathcal{K}'_0 \times \mathcal{K}'_0} w(K_1 + x, K_2 + y) Q_{xy}(d(K_1, K_2)) \alpha^{(2)}(d(x, y)) \\
&\stackrel{(3.5)}{=} \lambda \int_D \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathcal{K}'_0 \times \mathcal{K}'_0} w(K_1 + x, K_2 + y + x) Q_{x(y+x)}(d(K_1, K_2)) \nu(dy) dx \\
&= \lambda |D| \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathcal{K}'_0 \times \mathcal{K}'_0} w(K_1, K_2 + h) Q_{oh}(d(K_1, K_2)) \nu(dh) \\
&= \lambda |D| \bar{w}.
\end{aligned}$$

Podobně pro čítec odhadu Δ_0 platí

$$\begin{aligned}
& \mathbb{E} \sum_{i,j} w(\Xi_i, \Xi_j) \zeta(M_i, M_j) \mathbf{1}\{c(\Xi_i) \in D\} = \\
&= \int_{D \times \mathbb{R}^3 \times \mathcal{K}'_0 \times \mathcal{K}'_0 \times \mathbb{M} \times \mathbb{M}} w(K_1 + x, K_2 + y) \zeta(m_1, m_2) \alpha_{\mathbb{m}}^{(2)}(d(x, y, K_1, K_2, m_1, m_2)) \\
&= \int_{D \times \mathbb{R}^3} \int_{\mathcal{K}'_0 \times \mathcal{K}'_0 \times \mathbb{M} \times \mathbb{M}} w(K_1 + x, K_2 + y) \zeta(m_1, m_2) P_{xy}(d(K_1, K_2, m_1, m_2)) \\
&\hspace{20em} \alpha^{(2)}(d(x, y)) \\
&= \lambda \int_D \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathcal{K}'_0 \times \mathcal{K}'_0 \times \mathbb{M} \times \mathbb{M}} w(K_1, K_2 + h) \zeta(m_1, m_2) P_{oh}(d(K_1, K_2, m_1, m_2)) \nu(dh) dx \\
&= \lambda |D| \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathcal{K}'_0 \times \mathcal{K}'_0 \times \mathbb{M} \times \mathbb{M}} w(K_1, K_2 + h) \zeta(m_1, m_2) P_{oh}(d(K_1, K_2, m_1, m_2)) \nu(dh) \\
&= \lambda |D| \bar{w} \Delta.
\end{aligned}$$

Analogicky pak pro čítec odhadu $F_0(\beta)$ platí

$$\mathbb{E} \sum_{i,j} w(\Xi_i, \Xi_j) \mathbf{1}\{\zeta(M_i, M_j) \leq \beta\} \mathbf{1}\{c(\Xi_i) \in D\} = \lambda |D| \bar{w} F(\beta).$$

Z podílů pak plyne kýžený výsledek. □

V praxi pozorujeme jen konečně mnoho zrn a jejich kót. Může jít o náhodnou kótovanou mozaiku definovanou na omezené množině nebo o výřez náhodné kótované mozaiky definované na celém prostoru.

Definice 56. Mějme náhodnou kótovanou mozaiku $\Xi_{\mathbb{m}} = \sum_{i \in \mathcal{I}} \delta_{(\Xi_i, M_i)}$ definovanou na omezené množině $D \in \mathcal{B}_0^3$. Dále mějme funkci vah w definovanou na prostoru $\mathcal{K}' \times \mathcal{K}'$ splňující $w(\Xi_i, \Xi_j) = 0$ pro $\Xi_i \approx \Xi_j$. *Vážený průměr disorientace* sousedních zrn definujeme předpisem

$$\hat{\Delta} = \frac{\sum_{i,j} w(\Xi_i, \Xi_j) \zeta(M_i, M_j)}{\sum_{i,j} w(\Xi_i, \Xi_j)}.$$

Speciálním případem je při volbě $w(\Xi_i, \Xi_j) = \mathbf{1}\{\Xi_i \sim \Xi_j\}$ *průměrná disorientace* sousedních zrn

$$\hat{\Delta}_b = \frac{\sum_{i,j} \mathbf{1}\{\Xi_i \sim \Xi_j\} \zeta(M_i, M_j)}{\sum_{i,j} \mathbf{1}\{\Xi_i \sim \Xi_j\}}.$$

Váženou empirickou distribuční funkci disorientace sousedních zrn definujeme předpisem

$$\hat{F}(\beta) = \frac{\sum_{i,j} w(\Xi_i, \Xi_j) \mathbf{1}\{\zeta(M_i, M_j) \leq \beta\}}{\sum_{i,j} w(\Xi_i, \Xi_j)}, \quad \beta \in [0, \beta_{\max}].$$

Speciálním případem je při volbě $w(\Xi_i, \Xi_j) = \mathbf{1}\{\Xi_i \sim \Xi_j\}$ *empirická distribuční funkce disorientace* sousedních zrn

$$\hat{F}_b(\beta) = \frac{\sum_{i,j} \mathbf{1}\{\Xi_i \sim \Xi_j\} \mathbf{1}\{\zeta(M_i, M_j) \leq \beta\}}{\sum_{i,j} \mathbf{1}\{\Xi_i \sim \Xi_j\}}, \quad \beta \in [0, \beta_{\max}].$$

Zafixujeme-li mozaiku $\sum_{i \in \mathcal{I}} \delta_{\Xi_i}$, lze $\{M_i\}$ považovat za náhodné pole na mřížce, kde každé zrno odpovídá vrcholu mřížce. Vážený průměr disorientace $\hat{\Delta}$ pak připomíná Gearyho index definovaný předpisem (3.1), ve kterém výraz $(Z_i - Z_j)^2$ udává míru podobnosti mezi pozorováními v sousedních vrcholech. V případě charakteristiky $\hat{\Delta}$ měříme podobnost pomocí disorientace sousedních zrn.

4. Testy nezávislosti

V této kapitole představíme neparametrické testy dvou modelů s nezávislými kótami, a to test nezávislého kótování a test podmíněného nezávislého kótování. Zaměříme se na testování nezávislosti kót v případě, kdy kóty představují krystalografické orientace trojrozměrných zrn.

Prvnímu testu odpovídá nulová hypotéza o nezávisle kótované mozaice. Uvažujme náhodnou mozaiku $\Xi = \sum_{i \in \mathcal{I}} \delta_{\Xi_i}$ a nezávisle stejně rozdělené kóty $\{M_i, i \in \mathcal{I}\}$. Přiřadíme-li zrnům mozaiky kóty bez ohledu na mozaiku, hovoříme o nezávisle kótované mozaice (definice 49). Pro takový model platí $\bar{\Delta} = \Delta$, tedy střední disorientace mezi dvěma zrny se shoduje se střední disorientací mezi sousedními zrny, stejně tak pro příslušné distribuční funkce platí v tomto případě rovnost $\bar{F}(\beta) = F(\beta)$.

Nulová hypotéza druhého testu odpovídá speciálnímu případu podmíněně nezávislého kótování mozaik (speciální případ definice 50). Předpokládejme, že máme náhodnou mozaiku $\Xi = \sum_{i \in \mathcal{I}} \delta_{\Xi_i}$ a podmíněně při Ξ jsou kóty $\{M_i, i \in \mathcal{I}\}$ nezávislé a rozdělení M_i závisí jen na příslušném zrně Ξ_i , speciálně např. jen na jeho objemu $|\Xi_i|$. Uvažujeme tedy navzájem nezávislé kóty M_i , nikoliv však stejně rozdělené. Předpokládejme, že různých rozdělení kót je konečný počet, který označíme N_p . Příslušná rozdělení označme P_1, \dots, P_{N_p} . Uvažujme konečné disjunktní pokrytí množiny $\mathcal{K}' = \bigcup_{k=1}^{N_p} \mathcal{K}'_k$, $\mathcal{K}'_k = \{C \in \mathcal{K}' : |C| \in [t_k, t_{k+1})\}$, kde $0 = t_1 < \dots < t_{N_p+1} = \infty$. Jako nulový model potom bereme náhodnou kótovanou mozaiku $\sum_{i \in \mathcal{I}} \delta_{(\Xi_i, M_i)}$ s tím, že podmíněně při Ξ má kóta M_i rozdělení P_k , pokud $|\Xi_i| \in \mathcal{K}'_k$. Budeme testovat platnost tohoto konkrétního modelu podmíněně nezávisle kótované mozaiky s předepsanými hodnotami N_p a t_1, \dots, t_{N_p+1} .

Pro sestavení testů využijeme myšlenku Monte Carlo postupu, který je založen na generování velkého počtu nezávislých realizací z modelu za platnosti nulové hypotézy. Použijeme dvě různé testové statistiky, jednu číselnou a druhou funkcionální. Příklad číselné testové statistiky lze řešit klasickým Barnardovým testem představeným v Barnard (1963). S případem funkcionální testové statistiky se vypořádáme využitím globálního obálkového testu zavedeného v Myllymäki a kol. (2017).

4.1 Simulační testy

4.1.1 Barnardův Monte Carlo test

Mějme jednorozměrnou testovou statistiku T . Nejprve spočteme tuto statistiku z dat a označíme ji T_1 . Následně provedeme s nezávislých simulací za platnosti nulové hypotézy a spočteme příslušné statistiky, které označíme T_2, \dots, T_{s+1} . Uspořádané hodnoty od nejmenší po největší označíme $T_{(1)} \leq \dots \leq T_{(s+1)}$.

Uvažujme-li test hypotézy na hladině α , určíme q takové, které splňuje

$$\alpha = \frac{2q}{s+1}.$$

Vhodnou volbou s můžeme zaručit, že q je přirozené číslo. Nulovou hypotézu H_0 potom zamítáme, když $T_1 \notin [T_{(q+1)}, T_{(s-q+1)}]$. Za platnosti H_0 jsou T_1, \dots, T_{s+1} zaměnitelné náhodné veličiny, takže každé jejich uspořádání podle velikosti je stejně pravděpodobné. Předpokládáme-li, že ve spočtených testových statistikách nedochází ke shodám, neboli $T_{(1)} < \dots < T_{(s+1)}$, pak nulovou hypotézu zamítáme, pokud T_1 je mezi q nejmenšími nebo q největšími hodnotami, což má za platnosti H_0 pravděpodobnost přesně α . Mů-

žeme také spočítat p -hodnotu tohoto testu jako

$$p = 2 \min\{p_-, p_+\}, \quad (4.1)$$

kde

$$p_- = \frac{1 + \sum_{i=2}^{s+1} \mathbf{1}\{T_i < T_1\}}{s+1}, \quad p_+ = \frac{1 + \sum_{i=2}^{s+1} \mathbf{1}\{T_i > T_1\}}{s+1}.$$

Nulovou hypotézu potom zamítáme, když $p \leq \alpha$. Pokud se T_1 shoduje s některou z hodnot T_2, \dots, T_{s+1} , dostáváme dolní a horní mez pro p -hodnotu testu. Položme

$$\begin{aligned} p_{-,d} &= \frac{1 + \sum_{i=2}^{s+1} \mathbf{1}\{T_i < T_1\}}{s+1}, & p_{-,h} &= \frac{1 + \sum_{i=2}^{s+1} \mathbf{1}\{T_i \leq T_1\}}{s+1}, \\ p_{+,d} &= \frac{1 + \sum_{i=2}^{s+1} \mathbf{1}\{T_i > T_1\}}{s+1}, & p_{+,h} &= \frac{1 + \sum_{i=2}^{s+1} \mathbf{1}\{T_i \geq T_1\}}{s+1}. \end{aligned}$$

Pak

$$p_d = 2 \min\{p_{-,d}, p_{+,d}\} \quad \text{a} \quad p_h = 2 \min\{p_{-,h}, p_{+,h}\}$$

jsou dolní a horní mez pro p -hodnotu testu. Když $p_h \leq \alpha$, zamítáme nulovou hypotézu. Pokud $p_d > \alpha$, nulovou hypotézu nezamítáme. Ve zbývajícím případě $p_d \leq \alpha < p_h$ není jasné, jak se rozhodnout. V našich simulacích problémy se shodou hodnot nenastávají, takže si vystačíme s jednoznačnou p -hodnotou danou vztahem (4.1).

4.1.2 Globální obálkový test

Mějme na rozdíl od předchozího testu funkcionální statistiku $T : I \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ a předpokládejme, že I je interval. Rozdělme I na n podintervalů I_1, \dots, I_n . Průměrné hodnoty statistiky T na jednotlivých podintervalech označme $T(I_1), \dots, T(I_n)$.

Nejprve spočteme statistiku T z dat a označíme ji T_1 . Následně provedeme s nezávislých simulací za platnosti nulové hypotézy a spočteme příslušné statistiky, které označíme T_2, \dots, T_{s+1} .

Pro každé $l = 1, \dots, n$ seřadíme statistiky T_1, \dots, T_{s+1} na každém podintervalu I_l a určíme jejich extrémní pořadí R_i :

$$R_i(I_l) = \min \left\{ \sum_{j=1}^{s+1} \mathbf{1}\{T_j(I_l) \geq T_i(I_l)\}, \sum_{j=1}^{s+1} \mathbf{1}\{T_j(I_l) \leq T_i(I_l)\}, \left\lfloor \frac{s+1}{2} \right\rfloor \right\},$$

$$i = 1, \dots, s+1, \quad l = 1, \dots, n.$$

Znamená to, že nejmenší a největší hodnota mají extrémní pořadí 1, druhá nejmenší a druhá největší mají extrémní pořadí 2 atd. Mezi hodnotami $T_j(I_l)$ můžou nastávat shody. Všimněme si, že v tom případě volíme $R_i(I_l)$ jako maximální pořadí. To lze nahradit pořadím průměrným. V takovém případě bychom $R_i(I_l)$ určovali pomocí vzorce

$$\begin{aligned} R_i(I_l) &= \min \left\{ \sum_{j=1}^{s+1} \mathbf{1}\{T_j(I_l) > T_i(I_l)\}, \sum_{j=1}^{s+1} \mathbf{1}\{T_j(I_l) < T_i(I_l)\} \right\} \\ &\quad + \frac{1}{2} \left(1 + \sum_{j=1}^{s+1} \mathbf{1}\{T_j(I_l) = T_i(I_l)\} \right), \quad i = 1, \dots, s+1, \quad l = 1, \dots, n. \end{aligned}$$

Potom pro každou statistiku T_i spočteme, jak často (tedy pro kolik podintervalů I_l) bylo dosaženo k -té extrémní pořadí

$$R_i(I_l) = k, \quad l = 1, \dots, n, \quad k = 1, \dots, \lfloor s+1/2 \rfloor.$$

Počet jednotlivých pořadí je reprezentován vektory

$$\mathbf{N}_i = (N_{i1}, \dots, N_{i\lfloor s+1/2 \rfloor}), \quad N_{ik} = \sum_{j=1}^n \mathbf{1}\{R_i(I_j) = k\}, \quad i = 1, \dots, s+1.$$

Vektory $\mathbf{N}_1, \dots, \mathbf{N}_{s+1}$ pak mezi sebou seřadíme následovně:

$$\mathbf{N}_i \prec \mathbf{N}_j \Leftrightarrow \exists K \leq \lfloor s+1/2 \rfloor : N_{ik} = N_{jk} \quad \forall k < K, \quad N_{iK} > N_{jK}.$$

Stejnou relaci uspořádání uvažujeme mezi příslušnými statistikami, tedy pro každé $i \neq j$ je

$$T_i \prec T_j \Leftrightarrow \mathbf{N}_i \prec \mathbf{N}_j.$$

Pro $i = j$ dodefinujeme $T_i \prec T_i$. Na základě tohoto řazení potom uspořádáme statistiky T_1, \dots, T_{s+1} .

Díky takovému seřazení funkcí můžeme spočítat, kolik statistik T_i spočtených ze simulací je extrémnějších než datová statistika T_1 a také spočítat p -hodnotu testu podle následujícího tvrzení.

Tvrzení 12. *Mějme zaměnitelné funkcionální statistiky T_1, \dots, T_{s+1} takové, že*

$$\mathbb{P}(T_i \prec T_j \quad \text{nebo} \quad T_j \prec T_i) = 1, \quad \forall i \neq j.$$

Nechť

$$p = \frac{1}{s+1} \left(1 + \sum_{i=2}^{s+1} \mathbf{1}\{T_i \prec T_1\} \right). \quad (4.2)$$

Test, který zamítá nulovou hypotézu, když $p \leq \alpha$, má hladinu významnosti $\frac{\lfloor \alpha(s+1) \rfloor}{s+1}$. Je-li $\alpha(s+1)$ přirozené číslo, jedná se o přesný test (dosahuje přesně hladiny α).

Důkaz. Toto tvrzení je celkem jednoduché, ale obsahuje podstatu principu Monte Carlo testování, a proto zde předvedeme jeho důkaz, který lze nalézt v Myllymäki a kol. (2017), lemma 1.

Pořadí testové statistiky T_i je

$$R_i^* = \sum_{j=1}^{s+1} \mathbf{1}\{T_j \prec T_i\}, \quad i = 1, \dots, s+1.$$

Z předpokladu tvrzení plyne, že tato pořadí jsou navzájem různá skoro jistě. Navíc R_1^*, \dots, R_{s+1}^* jsou zaměnitelné náhodné veličiny, což implikuje

$$\mathbb{P}(R_i^* = k) = \frac{1}{s+1}, \quad k = 1, \dots, s+1, \quad i = 1, \dots, s+1.$$

Jev $\{p \leq \alpha\}$ je ekvivalentní jevu $\{R_1^* \leq \alpha(s+1)\}$ a jeho pravděpodobnost je

$$\sum_{k=1}^{\lfloor \alpha(s+1) \rfloor} \mathbb{P}(R_1^* = k) = \frac{\lfloor \alpha(s+1) \rfloor}{s+1}.$$

□

Testu popsanému v tvrzení 12 se říká *globální obálkový test*. Speciálně se jedná o globální obálkový test na základě extrémní délky pořadí, zkráceně *erl*. Počet simulací se doporučuje volit $s \geq 1999$. V našem případě uvažujeme $s = 1999$ a $\alpha = 0,05$. Jedná se tedy o přesný test.

4.2 Postup testování

Pro testování použijeme dva typy testů, a to test s jednorozměrnou a test s funkcionální testovou statistikou s různými volbami váhové funkce. Data za platnosti nulové hypotézy generujeme pomocí principu náhodné realokace.

4.2.1 Náhodná realokace

Uvažujme, že náhodná mozaika $\Xi = \sum_{i \in \mathcal{I}} \delta_{\Xi_i}$ je pevně daná. Indexová množina \mathcal{I} je konečná a počet prvků označme $n = |\mathcal{I}|$. Princip náhodné realokace spočívá v tom, že vygenerujeme nové kóty pomocí permutací původních kót $\{M_i, i \in \mathcal{I}\}$. Mějme testovou statistiku, která se dá vyjádřit jako funkce náhodné kótované mozaiky, tedy $T = T(\sum_{i \in \mathcal{I}} \delta_{(\Xi_i, M_i)})$. Následující tvrzení zdůvodňuje použití náhodné realokace pro testování nezávislého kótování.

Tvrzení 13. *Nechť $\Xi_m = \sum_{i \in \mathcal{I}} \delta_{(\Xi_i, M_i)}$ je nezávisle kótovaná náhodná mozaika. Označme $T_1 = T(\Xi_m)$ a*

$$T_l = T\left(\sum_{i \in \mathcal{I}} \delta_{(\Xi_i, M_{\pi_l(i)})}\right), \quad l = 2, \dots, s+1,$$

kde π_2, \dots, π_{s+1} jsou nezávislé náhodné permutace množiny \mathcal{I} . Potom T_1, \dots, T_{s+1} jsou zaměnitelné.

Důkaz. Protože kóty jsou nezávislé stejně rozdělené a nezávislé na Ξ , je sdružené rozdělení $\{M_{\pi(i)}, i \in \mathcal{I}\}$ stejné jako $\{M_i, i \in \mathcal{I}\}$ pro libovolnou permutaci π , a tudíž T_1, \dots, T_{s+1} mají stejné rozdělení.

Dodefinujme π_1 jako identickou permutaci. Nyní uvažujme permutaci σ množiny $\{1, \dots, s+1\}$. Nechť $\pi_{\sigma(1)}^{-1}$ je inverzní permutace k $\pi_{\sigma(1)}$. Potom $\pi_{\sigma(1)}^{-1} \pi_{\sigma(1)} = \pi_1$ a $\pi_{\sigma(1)}^{-1} \pi_{\sigma(2)}, \dots, \pi_{\sigma(1)}^{-1} \pi_{\sigma(s+1)}$ jsou nezávislé náhodné permutace. Odtud již dostaneme, že sdružená rozdělení (T_1, \dots, T_{s+1}) a $(T_{\sigma(1)}, \dots, T_{\sigma(s+1)})$ splývají. \square

V případě zamítnutí nulové hypotézy nezávislého kótování jsme prokázali, že mozaika je kótovaná závisle. O způsobu kótování to však nic neříká. Zamítnutí může být způsobeno závislostmi mezi kótami nebo tím, že kóty závisí na zrnech.

Při testu hypotézy podmíněného nezávislého kótování, představené na začátku kapitoly, na rozdíl od testu nezávislého kótování nepermutujeme kóty v rámci celé mozaiky, nýbrž po částech dle nulové hypotézy. Zrna rozdělíme do tzv. *permutačních skupin* podle objemů. Náhodné permutace pak realizujeme pouze v rámci těchto skupin. Opět zformulujeme odpovídající tvrzení, které zaručí oprávněnost použití simulačních testů při tomto způsobu náhodné realokace.

Tvrzení 14. *Nechť $\Xi_m = \sum_{i \in \mathcal{I}} \delta_{(\Xi_i, M_i)}$ je podmíněně nezávisle kótovaná náhodná mozaika. Předpokládejme, že $\mathcal{I} = \bigcup_{k=1}^{N_p} \mathcal{I}_k$ je sjednocení po dvou disjunktních množin a podmíněně při $\Xi = \sum_{i \in \mathcal{I}} \delta_{\Xi_i}$ mají pro každé $k = 1, \dots, N_p$ kóty $\{M_i, i \in \mathcal{I}_k\}$ stejné rozdělení P_k . Nechť $\pi_2^{(k)}, \dots, \pi_{s+1}^{(k)}$ jsou nezávislé náhodné permutace množiny \mathcal{I}_k pro každé $k = 1, \dots, N_p$. Označme $T_1 = T(\Xi_m)$ a*

$$T_l = T\left(\sum_{k=1}^{N_p} \sum_{i \in \mathcal{I}_k} \delta_{(\Xi_i, M_{\pi_l^{(k)}(i)})}\right), \quad l = 2, \dots, s+1.$$

Potom T_1, \dots, T_{s+1} jsou zaměnitelné.

Důkaz. Můžeme postupovat stejně jako při důkazu tvrzení 13 jen s tím rozdílem, že nyní využijeme toho, že podmíněně při Ξ permutace v rámci skupiny \mathcal{I}_k nemění sdružené rozdělení příslušných kót, které je dáno součinem měř P_k . □

Pokud nezávisle na Ξ jsou všechna rozdělení P_k , $k = 1, \dots, N_p$, stejná, máme model nezávislého kótování. Znamená to, že v případě zamítnutí nulové hypotézy o podmíněně nezávislém kótování zamítáme také hypotézu o nezávisle kótované mozaice.

4.2.2 Jednorozměrná testová statistika

První typ testu využívá Barnardův Monte Carlo test s volbou $s = 1999$. Za testovou statistiku vezmeme váženou průměrnou disorientaci sousedních zrn z definice 56

$$\hat{\Delta} = \frac{\sum_{i,j} w(\Xi_i, \Xi_j) \zeta(M_i, M_j)}{\sum_{i,j} w(\Xi_i, \Xi_j)},$$

kde uvážíme dvě váhové funkce

$$w_b(\Xi_i, \Xi_j) = \mathbf{1}\{\Xi_i \sim \Xi_j\}, \quad (4.3)$$

$$w_v(\Xi_i, \Xi_j) = \frac{\min\{|\Xi_i|, |\Xi_j|\}}{\max\{|\Xi_i|, |\Xi_j|\}} \mathbf{1}\{\Xi_i \sim \Xi_j\}. \quad (4.4)$$

Lemma 15. *Pro nezávisle kótovanou náhodnou mozaiku $\Xi_m = \sum_{i \in \mathcal{I}} \delta_{(\Xi_i, M_i)}$ jsou $\hat{\Delta}_1, \dots, \hat{\Delta}_{s+1}$ zaměnitelné a mají střední hodnotu rovnu $\bar{\Delta}$.*

Důkaz. Zaměnitelnost plyne z tvrzení 13. Díky nezávislosti je podmíněná střední hodnota $\hat{\Delta}_1$ při daném $\sum_{i \in \mathcal{I}} \delta_{\Xi_i}$ rovna

$$\frac{\sum_{i,j \in \mathcal{I}} w(\Xi_i, \Xi_j) \int_{\mathbb{M}} \int_{\mathbb{M}} \zeta(m_1, m_2) P_m(dm_1) P_m(dm_2)}{\sum_{i,j \in \mathcal{I}} w(\Xi_i, \Xi_j)} = \bar{\Delta}.$$

Poznamenejme, že podmíněně při Ξ_m mají $\hat{\Delta}_2, \dots, \hat{\Delta}_{s+1}$ diskrétní rozdělení dané pravděpodobnostmi

$$\mathbb{P} \left(\hat{\Delta}_l = \frac{\sum_{i,j \in \mathcal{I}} w(\Xi_i, \Xi_j) \zeta(M_{\pi(i)}, M_{\pi(j)})}{\sum_{i,j \in \mathcal{I}} w(\Xi_i, \Xi_j)} \middle| \Xi_m \right) = \frac{1}{n!}, \quad l = 2, \dots, s+1,$$

pro každou permutaci π množiny \mathcal{I} . Podmíněná střední hodnota je pak rovna

$$\mathbb{E}(\hat{\Delta}_l | \Xi_m) = \frac{1}{n(n-1)} \sum_{i,j \in \mathcal{I}}^{\neq} \zeta(M_i, M_j),$$

což je empirický odhad $\bar{\Delta}$. Nepodmíněná střední hodnota je $\bar{\Delta}$. □

Test s testovou statistikou

$$\hat{\Delta}_b = \frac{\sum_{i,j} w_b(\Xi_i, \Xi_j) \zeta(M_i, M_j)}{\sum_{i,j} w_b(\Xi_i, \Xi_j)} \quad (4.5)$$

budeme označovat avg_b , avg_v pak test s testovou statistikou

$$\hat{\Delta}_v = \frac{\sum_{i,j} w_v(\Xi_i, \Xi_j) \zeta(M_i, M_j)}{\sum_{i,j} w_v(\Xi_i, \Xi_j)}. \quad (4.6)$$

Test probíhá následovně. Nejprve spočteme z dat $\hat{\Delta}_1$. Následně vygenerujeme 1999 náhodných permutací kót na zrnech při pevné mozaice a spočteme $\hat{\Delta}_2, \dots, \hat{\Delta}_{2000}$. Nakonec spočteme p -hodnotu testu podle předpisu (4.1). Nulová hypotéza je zamítnuta, když $\hat{\Delta}_1$ je mezi 50 největšími nebo 50 nejmenšími hodnotami $\hat{\Delta}_1, \dots, \hat{\Delta}_{2000}$.

4.2.3 Funkcionální testová statistika

Druhý typ testu je postaven na globálním obálkovém testu s volbou $s = 1999$. Jako testovou statistiku zvolíme váženou empirickou distribuční funkci disorientace sousedních zrn \hat{F} z definice 56:

$$\hat{F}(\beta) = \frac{\sum_{i,j} w(\Xi_i, \Xi_j) \mathbf{1}\{\zeta(M_i, M_j) \leq \beta\}}{\sum_{i,j} w(\Xi_i, \Xi_j)}, \quad \beta \in [0, \beta_{\max}],$$

kde budeme stejně jako u jednorozměrného testu volit dvě váhové funkce w_b a w_v .

Lemma 16. *Pro nezávisle kótovanou náhodnou mozaiku $\Xi_m = \sum_{i \in \mathcal{I}} \delta_{(\Xi_i, M_i)}$ jsou $\hat{F}_1, \dots, \hat{F}_{s+1}$ zaměnitelné a mají střední hodnotu rovnu \bar{F} .*

Důkaz. Zaměnitelnost plyne z tvrzení 14 a střední hodnotu získáme z předpokladu nezávislého kótování podobně jako v důkazu lemmatu 15. □

Test s testovou statistikou

$$\hat{F}_b(\beta) = \frac{\sum_{i,j} w_b(\Xi_i, \Xi_j) \mathbf{1}\{\zeta(M_i, M_j) \leq \beta\}}{\sum_{i,j} w_b(\Xi_i, \Xi_j)} \quad (4.7)$$

budeme označovat erl_b , test s testovou statistikou

$$\hat{F}_v(\beta) = \frac{\sum_{i,j} w_v(\Xi_i, \Xi_j) \mathbf{1}\{\zeta(M_i, M_j) \leq \beta\}}{\sum_{i,j} w_v(\Xi_i, \Xi_j)} \quad (4.8)$$

pak erl_v .

Test probíhá následovně. Nejprve spočteme z dat empirickou distribuční funkci \hat{F}_1 . Poté, stejně jako u jednorozměrného testu, vygenerujeme 1999 náhodných permutací orientací na zrnek při pevné mozaice a spočteme empirické distribuční funkce $\hat{F}_2, \dots, \hat{F}_{s+1}$. Nakonec spočteme p -hodnotu testu podle předpisu (4.2). Nulová hypotéza je zamítnuta, když \hat{F}_1 je mezi 100 nejextrémnějšími funkcemi.

Pro určení pořadí podle postupu z podkapitoly 4.1.2 jsme interval $I = [0, \beta_{\max}]$ rozdělili na $k = 51$ stejně velkých podintervalů I_1, \dots, I_k , na kterých jsme váženou empirickou distribuční funkci vyhodnocovali.

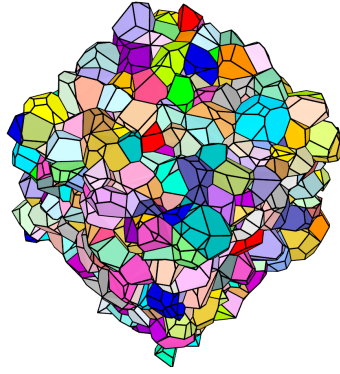
4.3 Simulační studie

Sílu zmíněných testů budeme zkoumat na nasimulovaných datech na dvou simulačních mozaikách $\Xi = \sum_{i \in \mathcal{I}} \delta_{\Xi_i}$ definovaných na omezené podmnožině $D \subseteq \mathbb{R}^3$.

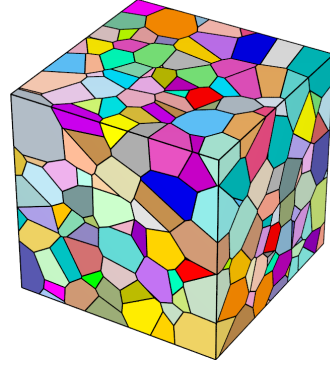
Za první mozaiku zvolíme výběr zrn z Laguerrovy mozaiky, získané při rekonstrukci reálných dat (viz kapitola 5), jejichž těžiště leží v krychli o hraně $40 \mu\text{m}$, čemuž odpovídá 977 zrn. Tento výřez je vykreslen na obrázku 4.1a.

Druhou mozaikou je Voronoiova mozaika s 500 zrny, jejichž generátory jsou rovnoměrně rozděleny v krychli o hraně 40. Tato mozaika byla vygenerována pomocí softwaru Neper (Quey a kol., 2011) a je vykreslena na obrázku 4.1b.

Obě mozaiky jsou realizacemi náhodné mozaiky s odlišnou volbou omezené množiny $D \subseteq \mathbb{R}^3$. Při generování orientací i testování nulových hypotéz budeme tyto mozaiky uvažovat jako pevné, přičemž při každém testu provedeme 1000 simulací orientací. Bude nás vždy zajímat, jaké je procento případů z těchto 1000 opakování, ve kterých zamítneme nulovou hypotézu.



(a) Laguerrova mozaika s 977 zrny.



(b) Voronoiova mozaika s 500 zrny.

Obrázek 4.1: Simulační mozaiky.

4.3.1 Nezávislé kótování

V této části budeme zkoumat sílu testů nulové hypotézy o nezávislém kótování mozaik uvedených výše. Představíme dva modely závisle kótovaných mozaik a výsledky testů pro simulace na obou simulačních mozaikách.

Rovnoměrný bílý šum

Definice 57. Posloupnost $\{\varepsilon_i, i \in \mathcal{I}\}$ kvaternionů orientací z rovnoměrného rozdělení nazveme *rovnoměrný bílý šum*.

Rovnoměrný bílý šum můžeme získat převodem Eulerových úhlů z rovnoměrného rozdělení na kvaterniony. Tento převod lze nalézt v příloze B nebo Rowenhorst a kol. (2015). Eulerovy úhly $\varphi_1, \phi, \varphi_2$ z rovnoměrného rozdělení můžeme generovat následovně (Morawiec (2004), podkapitola 5.3.1). Úhly φ_1 a φ_2 vygenerujeme náhodně z rovnoměrného rozdělení na intervalu $[0, 2\pi)$. Následně vygenerujeme $\cos \phi$ náhodně z rovnoměrného rozdělení na intervalu $(-1, 1]$.

Volba fundamentální zóny

Jak jsme již zmínili v kapitole 2, Eulerův prostor můžeme pro kubickou soustavu rozdělit na 24 ekvivalentních podprostorů, tzv. fundamentální zóny. Při průměrování více orientací může být žádoucí brát orientace ze stejné fundamentální oblasti. My zvolíme následující zónu, odvozenou v Böhlke a kol. (2006):

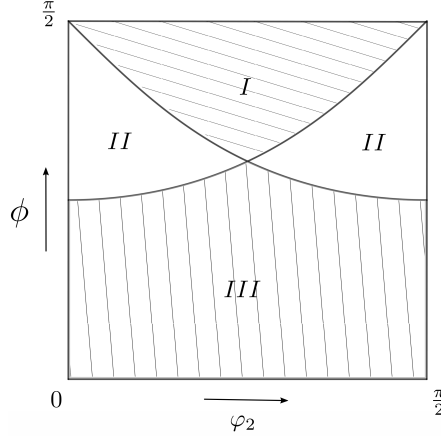
$$\begin{aligned} \varphi_1 \in [0, 2\pi), \quad \varphi_2 \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right), \quad \phi \in \left[\phi_0, \frac{\pi}{2}\right], \\ \phi_0 = \arccos \min \left(\frac{\cos \varphi_2}{\sqrt{1 + \cos^2 \varphi_2}}, \frac{\sin \varphi_2}{\sqrt{1 + \sin^2 \varphi_2}} \right). \end{aligned} \quad (4.9)$$

Na obrázku 4.2 je tato oblast označena jako I .

Poznámka. Rovnoměrný bílý šum $\{\varepsilon_i, i \in \mathcal{I}\}$ z tohoto prostoru generujeme tak, že na ε_i aplikujeme kvaterniony symetrie kubické soustavy (viz příloha A) a následně uvažujeme pouze orientace, jejichž vyjádření pomocí Eulerových úhlů se nachází v oblasti (4.9).

Model WMA

Jedním z modelů závislých kót je modifikovaný MA model, ve kterém generujeme závislé posloupnosti kvaternionů orientace. Oproti všeobecně zavedenému MA modelu



Obrázek 4.2: Řezy fundamentálními zónami přes φ_1 pro kubickou krystalovou soustavu.

jednotlivé členy posloupnosti navíc normujeme, neboť orientaci popisují výhradně kvaterniony jednotkové, klasický MA model by tedy neměl smysl.

Definice 58. Necht $\{\tilde{\varepsilon}_i, i \in \mathcal{I}\}$ je rovnoměrný bílý šum z fundamentální zóny (4.9). Potom definujeme posloupnost kót $\{\tilde{M}_i, i \in \mathcal{I}\}$ (kvaternionů orientací) zrn předpisem

$$\tilde{M}_i = \frac{\sum_{j \in \mathcal{I}} w(\Xi_i, \Xi_j) \tilde{\varepsilon}_j}{\|\sum_{j \in \mathcal{I}} w(\Xi_i, \Xi_j) \tilde{\varepsilon}_j\|}, \quad i \in \mathcal{I}, \quad (4.10)$$

kde $w(\Xi_i, \Xi_j)$ je funkce vah splňující $w(\Xi_i, \Xi_j) = 0$ pro $\Xi_i \approx \Xi_j$. Tento model nazveme *model vážených klouzavých součtů* (WMA).

Kromě vah lze také měnit míru korelace mezi zrny. Toho můžeme docílit následujícím způsobem.

Definice 59. Mějme $\{\tilde{M}_i, i \in \mathcal{I}\}$ WMA model. Dále mějme $\{\varepsilon_i, i \in \mathcal{I}\}$ rovnoměrný bílý šum z fundamentální zóny (4.9) nezávislý na $\{\tilde{M}_i, i \in \mathcal{I}\}$ a zvolme $\theta \in [0, 1]$. Potom definujeme posloupnost kót $\{M_i, i \in \mathcal{I}\}$ (kvaternionů orientací) zrn předpisem

$$M_i = \begin{cases} \tilde{M}_i & \text{s pravděpodobností } \theta, \\ \varepsilon_i & \text{s pravděpodobností } 1 - \theta. \end{cases}$$

Tento model nazveme *smíšený model vážených klouzavých součtů* (MWMA).

Parametr θ určuje velikost závislé části kót, a tedy i míru korelace mezi nimi. S rostoucím θ tedy roste míra korelace mezi kótami zrn. Pro $\theta = 0$ generujeme nezávislé rovnoměrné kóty, zatímco pro $\theta = 1$ závislé kóty definované předpisem (4.10).

Poznámka. Uvažujme váhové funkce w_b a w_v definované výše předpisy (4.3) a (4.4). Dále uvažujme funkci vah w_a definovanou vztahem

$$w_a(\Xi_i, \Xi_j) = \sqrt{\mathcal{H}^2(\Xi_i \cap \Xi_j)} \mathbf{1}\{\Xi_j \sim \Xi_i\},$$

tedy jako odmocninu z plochy stěny, kterou sousední zrna sdílejí. Potom příslušné modely MWMA s těmito volbami váhových funkcí budeme značit MWMA_b , MWMA_v a MWMA_a .

Definice 60. Předpokládejme, že nezávislé bílé šumy $\{\varepsilon_i, i \in \mathcal{I}\}$ a $\{\tilde{\varepsilon}_i, i \in \mathcal{I}\}$ jsou naopak z celého prostoru orientací a uvažujme váhovou funkci w_b . Potom model z definice 59 označíme jako MWMA_G .

Na obrázku 4.3 jsou vykresleny grafy závislosti procentuálního počtu zamítání nulové hypotézy na parametru θ pro modely $MWMA_b$, $MWMA_v$ a $MWMA_a$ pro obě simulační mozaiky. Porovnáme-li pro Laguerrovu mozaiku výsledky pro model $MWMA_G$ (obrázek 4.3a), u kterého nedbáme na volbu fundamentální zóny, a pro model $MWMA_b$ (obrázek 4.3b), vidíme, že korelace mezi zrny jsou silnější v případě modelu $MWMA_b$, neboť pro volbu orientací ze stejné fundamentální zóny je procentuální zamítání nulové hypotézy už pro parametr $\theta = 0,5$ v případě avg_b testu 99,8 a v případě erl_b 100, zatímco pro první případ (obr. 4.3a) takových hodnot nikdy nedosahujeme. To může být způsobeno tím, že závislosti zůstávají více zachovány v případě průměrování v rámci stejné fundamentální zóny, zatímco průměrování přes celý prostor může závislosti zeslabovat. Dále budeme v případě modelu $MWMA$ uvažovat výhradně orientace ze stejné fundamentální zóny dané předpisem (4.9).

Pro hodnotu parametru $\theta = 0$ zamítáme nulovou hypotézu pro Laguerrovu mozaiku v 4,9 % případech pro avg_b a v 4,4 % pro erl_b . V případě Voronoiovy mozaiky jsou tyto hodnoty 5,0 % v případě avg_b a 4,7 % v případě erl_b . Jelikož se pro tuto hodnotu θ jedná o test nezávislosti na nezávislých datech, měla by se hodnota procentuálního zamítání nulové hypotézy pohybovat kolem předepsané hladiny testu, což je v našem případě 5 %. Hladina testu je tedy dodržena.

Podíváme-li se na obrázek 4.3, vypadají na první pohled všechny výsledky pro obě mozaiky velmi podobně. Ze všech tří modelů je nicméně v případě modelu $MWMA_b$ nárůst procentuálního zamítání pro Laguerrovu mozaiku nejrychlejší. Rozdíl mezi simulačními mozaikami je pro některé modely také patrný. V případě modelu $MWMA_v$ se výsledky pro Laguerrovu mozaiku liší od Voronoiovy maximálně o 9 %. Největší rozdíl mezi simulačními mozaikami je v případě modelu $MWMA_a$, kde pro Voronoiovu mozaiku zamítáme nulovou hypotézu až v o 30 % případů méně než pro Laguerrovu mozaiku pro stejnou hodnotu parametru θ .

Z výsledků všech uvedených testů můžeme usuzovat, že oba zvolené testy (avg_b a erl_b) jsou citlivé na změnu parametru θ , kterým kontrolujeme sílu závislostí mezi kóty. Zdá se, že pro tento model je o něco lepší erl_b test.

Model WAR

Druhým modelem závislých kót (orientací) je modifikovaný AR model, u kterého modifikace stejně jako u předchozího WMA modelu spočívá v normalizaci kvaternionu orientace.

Definice 61. Necht opět $\{\varepsilon_i, i \in \mathcal{I}\}$ je rovnoměrný bílý šum z fundamentální zóny (4.9) a $\rho \in \mathbb{R}$. Potom definujeme posloupnost kót $\{M_i, i \in \mathcal{I}\}$ (kvaternionů orientací) zrn předpisem

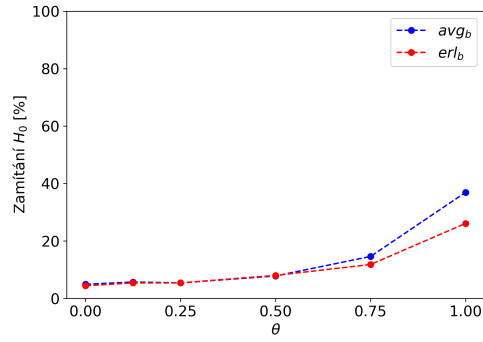
$$M_i = \frac{\rho \sum_{j \in \mathcal{I}} w(\Xi_i, \Xi_j) M_j + \varepsilon_i}{\|\rho \sum_{j \in \mathcal{I}} w(\Xi_i, \Xi_j) M_j + \varepsilon_i\|}, \quad i \in \mathcal{I}, \quad (4.11)$$

kde w je opět funkce vah splňující $w(\Xi_i, \Xi_j) = 0$ pro $\Xi_i \approx \Xi_j$. Pokud řešení soustavy rovnic existuje, nazveme model definovaný předpisem (4.11) *vážený autoregresní model WAR*.

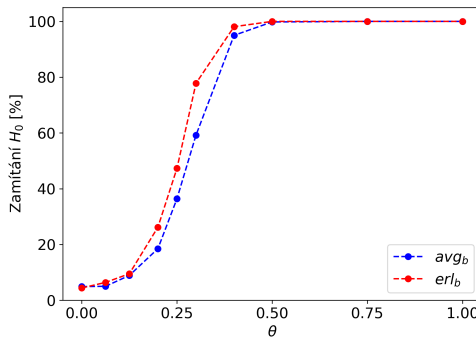
Koeficient ρ určuje míru korelace kót. Pro volbu $\rho = 0$ dostaneme model nezávislých kót.

Poznámka. Uvažujme opět váhové funkce w_b , w_v a w_a . Příslušné modely WAR označme WAR_b , WAR_v a WAR_a .

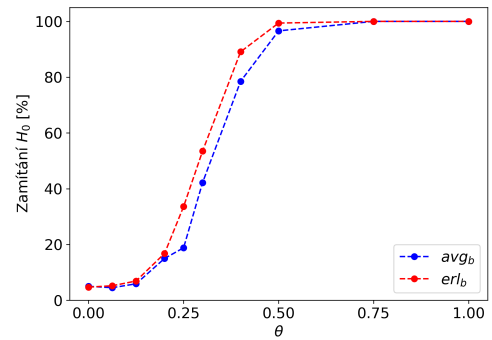
Definice 62. Mějme $\{\varepsilon_i, i \in \mathcal{I}\}$ rovnoměrný bílý šum, který není ze stejné fundamentální zóny, ale z celého prostoru orientací, a uvažujme váhovou funkci w_b . Potom model z definice 61 označíme jako WAR_G .



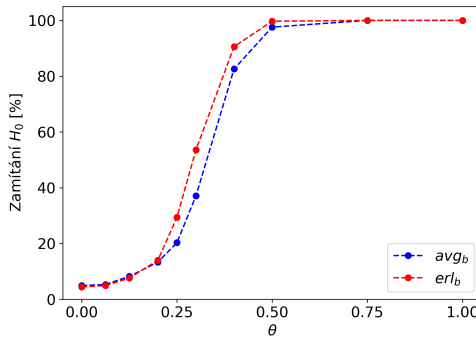
(a) $MWMA_G$ pro Laguerrovu mozaiku.



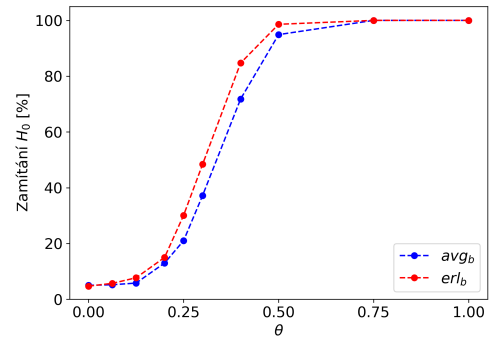
(b) $MWMA_b$ pro Laguerrovu mozaiku.



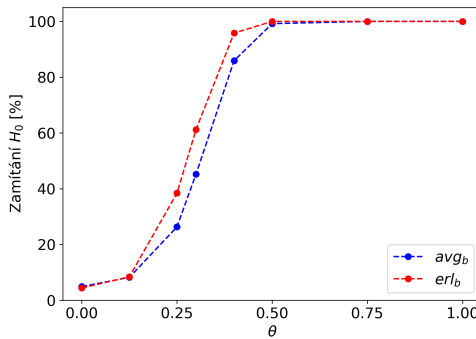
(c) $MWMA_b$ pro Voronoiovu mozaiku.



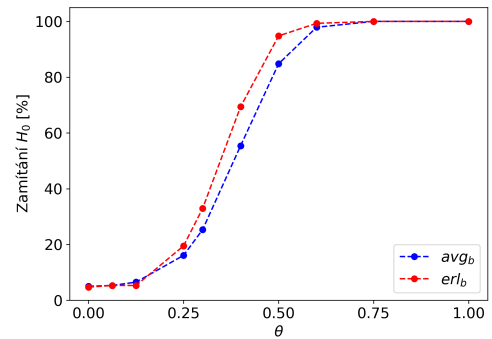
(d) $MWMA_v$ pro Laguerrovu mozaiku.



(e) $MWMA_v$ pro Voronoiovu mozaiku.



(f) $MWMA_a$ pro Laguerrovu mozaiku.



(g) $MWMA_a$ pro Voronoiovu mozaiku.

Obrázek 4.3: Závislost procentuálního zamítání hypotézy nezávislého kótování pro modely $MWMA_G$, $MWMA_b$, $MWMA_v$ a $MWMA_a$.

Na rozdíl od modelu MWMA je přiřazení těchto orientací komplikovanější, neboť jde o nelineární úlohu. Označme $n = |\mathcal{I}|$. Potom můžeme vztah (4.11) zapsat maticově jako

$$N_{\mathbf{M}}\mathbf{M} = \rho W\mathbf{M} + \boldsymbol{\varepsilon},$$

kde \mathbf{M} je matice typu $n \times 4$, $W = (W_{ij})_{i,j \in \mathcal{I}} = (w(\Xi_i, \Xi_j))_{i,j \in \mathcal{I}}$ je matice vah, $\boldsymbol{\varepsilon}$ je matice typu $n \times 4$ s řádky ε_i a

$$N_{\mathbf{M}} = \begin{pmatrix} \|(\rho W\mathbf{M} + \boldsymbol{\varepsilon})_{1:}\| & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \|(\rho W\mathbf{M} + \boldsymbol{\varepsilon})_{2:}\| & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & \|(\rho W\mathbf{M} + \boldsymbol{\varepsilon})_{n:}\| \end{pmatrix},$$

kde $(\rho W\mathbf{M} + \boldsymbol{\varepsilon})_i$ značí i -tý řádek matice $\rho W\mathbf{M} + \boldsymbol{\varepsilon}$.

Posloupnost závislých kvaternionů orientace zrn potom získáme vyřešením rovnice $f(\mathbf{M}) = 0$, kde f je funkce definovaná předpisem

$$f(\mathbf{M}) = N_{\mathbf{M}}\mathbf{M} - \rho W\mathbf{M} - \boldsymbol{\varepsilon}.$$

Rovnici řešíme Newtonovou-Krylovovou metodou (Knoll a Keyes, 2004) s počátečním odhadem

$$M_i^0 = \frac{(\mathbb{I}_n - \rho W) \varepsilon_i}{\|(\mathbb{I}_n - \rho W) \varepsilon_i\|}, \quad i \in \mathcal{I},$$

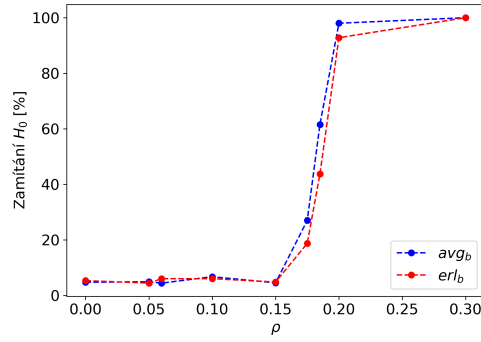
kde \mathbb{I}_n značí jednotkovou matici typu $n \times n$. Jde o iterační metodu, jejímž cílem je nalezení dobré aproximace řešení. Dochází tedy pouze k odhadu řešení soustavy (4.11).

Stejně jako v předchozím MWMA modelu se ukazuje, že korelace jsou silnější v případě, kdy se omezujeme na stejnou fundamentální zónu (4.9) (viz obrázek 4.4b), než když generujeme orientace z celého prostoru Eulerových úhlů (obrázek 4.4a). V prvním případě zamítáme téměř ve 100 % případů již pro hodnotu parametru $\rho = 0,05$, zatímco při průměrování přes celý prostor dosahujeme takových výsledků až pro hodnotu $\rho = 0,2$. Pro zbylé testy se tedy omezíme na generování ze stejné fundamentální zóny.

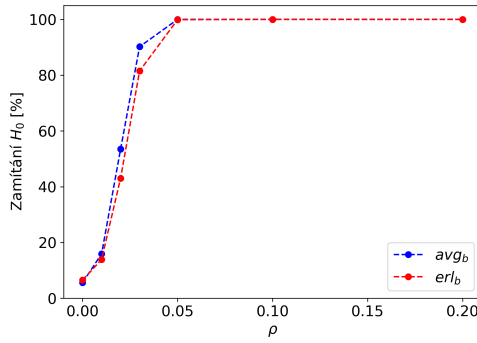
Na obrázku 4.4 jsou vykresleny grafy závislostí procentuálního počtu zamítání nulové hypotézy na parametru ρ pro modely WAR_b , WAR_v a WAR_a pro obě simulační mozaiky. Při hodnotě parametru $\rho = 0$ testujeme opět nulovou hypotézu o nezávislosti kót na nezávislých orientacích. Hodnota procentuálního počtu zamítání nulové hypotézy by se v tomto případě měla tedy pohybovat kolem stanovené hladiny 5 %. V případě Laguerrovy mozaiky je tato hodnota 5,6 % pro avg_b test a 6,5 % pro test erl_b . V případě Voronoiovy mozaiky je tato hodnota 5,0 % pro avg_b test a 4,2 % pro test erl_b . Hladina testu je tedy více méně dodržena.

Pro Voronoiovu mozaiku jsou zde vykresleny výsledky pro model WAR_b se zápornými hodnotami parametru ρ . Vidíme, že výsledky jsou velmi podobné těm pro kladné hodnoty a můžeme se tedy omezit na kladné hodnoty parametru ρ .

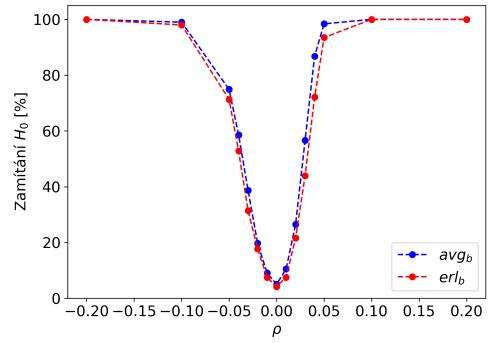
Pro modely WAR_b a WAR_v zamítáme ve 100 % případů pro obě mozaiky nejpozději pro hodnotu parametru $\rho = 0,1$, nicméně můžeme si všimnout pomalejšího nárůstu procentuálního zamítání v případě modelu WAR_v oproti WAR_b . Nejpomalejší nárůst pozorujeme v případě modelu WAR_a . Tyto rozdíly jsou způsobeny hodnotami váhových funkcí. Čím vyšších hodnot nabývá váhová funkce, tím nižší je hodnota parametru ρ . Funkce w_b nabývá pouze hodnot 0 a 1, neboť jde o binární funkci. Jelikož je váhová funkce w_v dána podíly objemů dvou zrn, nabývá tato funkce hodnot z intervalu $[0, 1]$. Největších hodnot nabývá váhová funkce w_a . Histogramy hodnot funkcí w_v a w_a pro obě simulační mozaiky jsou vykresleny na obrázku 4.5.



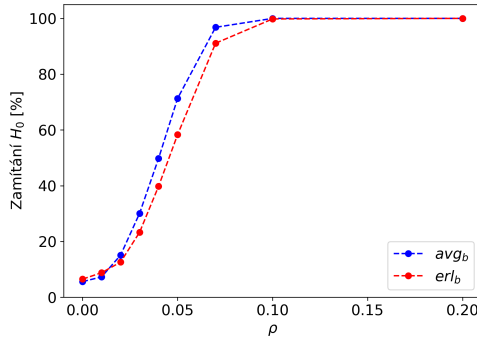
(a) WAR_G pro Laguerrovu mozaiku.



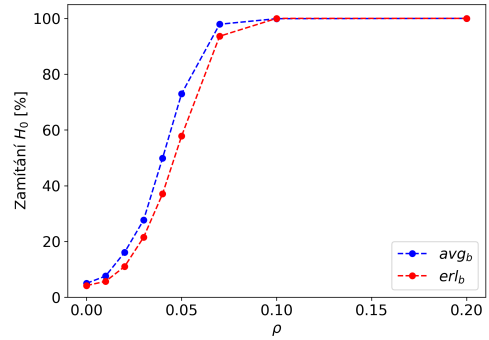
(b) WAR_b pro Laguerrovu mozaiku.



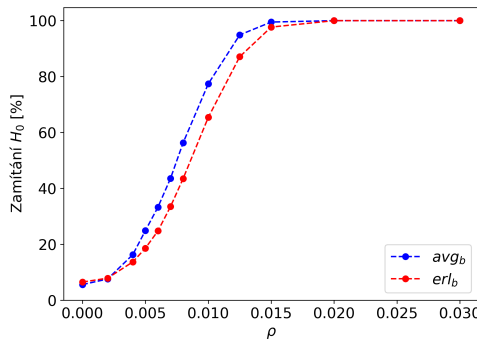
(c) WAR_b pro Voronoiovu mozaiku.



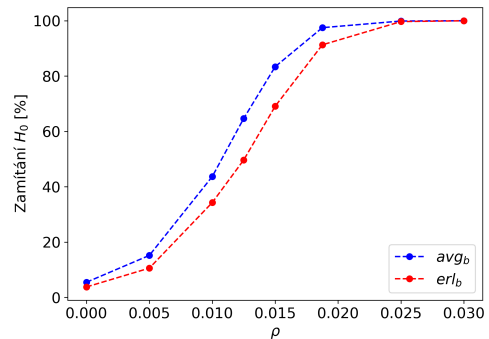
(d) WAR_v pro Laguerrovu mozaiku.



(e) WAR_v pro Voronoiovu mozaiku.

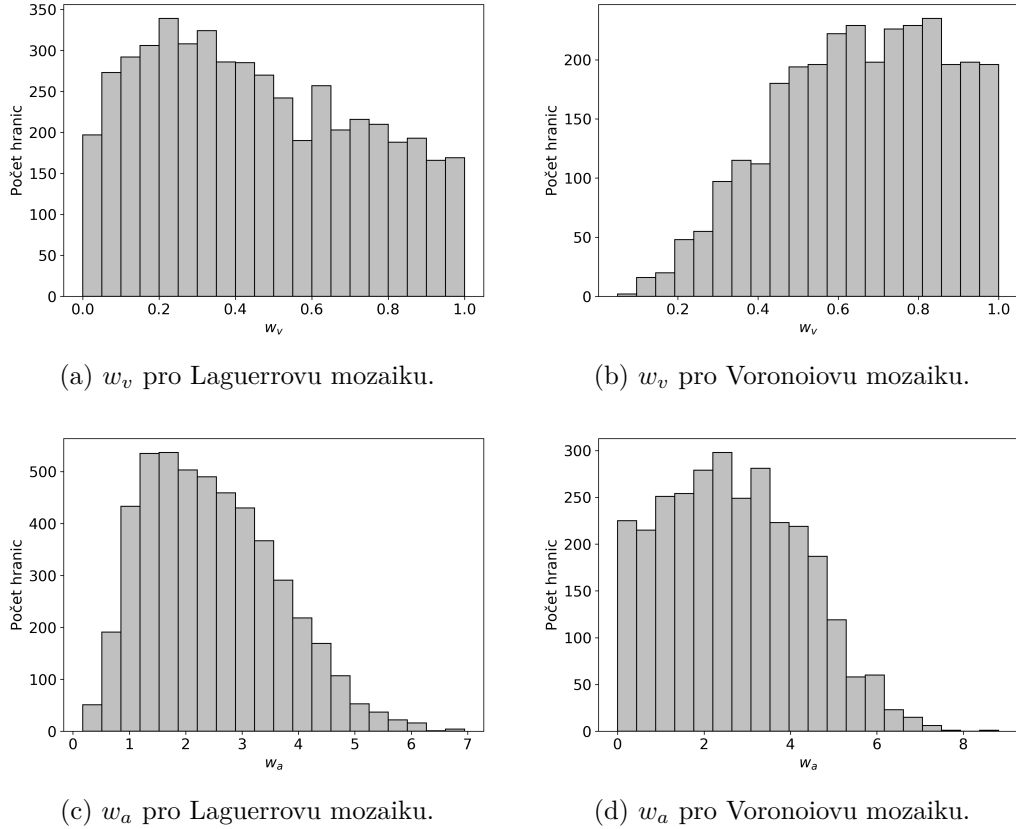


(f) WAR_a pro Laguerrovu mozaiku.



(g) WAR_a pro Voronoiovu mozaiku.

Obrázek 4.4: Závislost procentuálního zamítání hypotézy nezávislého kótování pro modely WAR_G , WAR_b , WAR_v a WAR_a .



Obrázek 4.5: Histogramy hodnot váhových funkcí w_v a w_a pro sousední zrna.

Stejně jako u modelu MWMA se zdá, že oba testy jsou citlivé na změnu parametru ρ , kterým kontrolujeme sílu závislosti mezi kótami. Oproti modelu MWMA se ale zdá, že v tomto případě o něco lépe funguje test avg_b .

4.3.2 Podmíněně nezávislé kótování

V této části budeme zkoumat sílu testů nulové hypotézy o podmíněně nezávislém kótování mozaik uvedených dříve. V nulové hypotéze předpokládáme, že podmíněně rozdělení kóty M_i při dané mozaice závisí na objemu $|\Xi_i|$ příslušného zrna. Přitom uvažujeme, že různých podmíněných rozdělení kót P_1, \dots, P_{N_p} je konečný počet.

Pro podrobnější popis zavedme nejprve pojem empirického kvantilu.

Definice 63. Mějme náhodný výběr (X_1, \dots, X_n) a označme příslušný uspořádaný výběr $X_{(1)} \leq \dots \leq X_{(n)}$. Dále pro $k \in [0, 1]$ označme

$$p_k = \begin{cases} kn, & \text{pokud } kn \in \mathbb{N}, \\ \lfloor kn \rfloor + 1, & \text{jinak.} \end{cases}$$

Potom definujeme k -tý empirický kvantil u_k jako $u_k = X_{(p_k)}$.

Uvažujme objemy zrn dané mozaiky $\{|\Xi_i|, i \in \mathcal{I}\}$ a příslušné empirické kvantily u_k . Při testu nulové hypotézy rozdělíme zrna do N_p přibližně stejně velkých skupin $\mathcal{K}'_1, \dots, \mathcal{K}'_{N_p}$ podle objemů na základě empirických kvantilů následujícím způsobem

$$\Xi_i \in \mathcal{K}'_k, \quad \text{jestliže } |\Xi_i| \in [u_{k-1}, u_k), \quad k = 1, \dots, N_p, \quad i \in \mathcal{I}.$$

Při realizaci náhodných permutací se na tyto skupiny omezíme a orientace na zrnech permutujeme odděleně pouze v rámci těchto skupin.

Představíme také dva modely, které slouží jako alternativní hypotéza testu. V prvním budeme uvažovat, že různých podmíněných rozdělení orientací je konečný počet N_o . Jde tedy o diskrétní závislost. Druhým uvažovaným modelem je pak spojitá závislost.

Ukážeme výsledky čtyř typů testů, a to avg_b , erl_b , avg_v a erl_v . V případě modelu diskrétní závislosti zvolíme dvě různé hodnoty N_o a různá rozdělení orientací.

Diskrétní závislost

V případě generování orientací v rámci diskrétní závislosti rozdělíme zrna do N_o přibližně stejně velkých skupin podle objemu zrna na základě empirických kvantilů analogicky rozdělení do N_p skupin uvedeném výše. Jednotlivým skupinám přiřadíme rozdělení orientací P_1, \dots, P_{N_o} .

Volby rozdělení orientací pro $N_o = 3$ a $N_o = 5$ jsou uvedeny v tabulkách 4.1 a 4.3, kde $\theta \in [0, 2\pi)$ a $\eta \in [0, 1]$ jsou parametry, které slouží k regulaci rozptylu rozdělení orientací. Symbol $\mathcal{R}(x, y)$ značí rovnoměrné rozdělení na intervalu (x, y) .

Střední disorientaci mezi jednotlivými skupinami označme

$$\bar{\Delta}_{ij} = \int_{\mathbb{M}} \int_{\mathbb{M}} \zeta(m_1, m_2) P_i(dm_1) P_j(dm_2), \quad i, j = 1, \dots, N_o.$$

V tabulkách 4.2 a 4.4 jsou uvedeny empirické odhady $\hat{\Delta}_{ij}$ středních disorientací $\bar{\Delta}_{ij}$ pro různé volby parametrů, kde

$$\hat{\Delta}_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{N^2} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \zeta(M_k^i, M_l^j), & i \neq j, \\ \frac{1}{N(N-1)} \sum_{k=1}^N \sum_{l \neq k} \zeta(M_k^i, M_l^j), & i = j, \end{cases}$$

kde M_1^i, \dots, M_N^i jsou nezávislé orientace generované z rozdělení P_i . Volíme $N = 1000$. Jednotkou tohoto odhadu je v tomto případě úhlový stupeň, značíme [deg]. Parametry θ a η jsou voleny tak, aby disorientace v rámci jednotlivých skupin byly podobné.

Tabulka 4.1: Volby Eulerových úhlů pro $N_o = 3$.

	φ_1	$\cos(\phi)$	φ_2
P_1	$\mathcal{R}(0, \theta)$	$\sqrt{2}/2$	0
P_2	0	$\mathcal{R}(-\eta, \eta)$	0
P_3	$\mathcal{R}(0, \theta)$	$\sqrt{3}/2$	$\pi/4$

Na obrázku 4.6 jsou vykresleny grafy závislostí procentuálního počtu zamítnutých nulových hypotéz na počtu permutačních skupin pro první volbu orientací uvedených v tabulce 4.1.

Snadno si všimneme, že pro oba testy záleží na volbě váhové funkce pro testovou statistiku. Vidíme, že zvolené volby váhové funkce dávají opačně extrémní hodnoty pro případy, kdy N_p není násobkem N_o . Zatímco testy s váhovou funkcí w_v většinou zamítají nulovou hypotézu, že mozaika je nezávisle kótovaná podmíněně při N_p skupinách podle objemů zrn, testy s váhovou funkcí w_b téměř pořád tuto hypotézu nezamítají. Použitím váhové funkce w_v jsme tedy schopni rozeznat, kdy počet skupin není v nulové hypotéze

Tabulka 4.2: Odhad střední disorientace mezi skupinami uvedenými v tabulce 4.1.

$\theta = \pi/32, \eta = 0,05$				$\theta = \pi/6, \eta = 0,25$			
	P_1	P_2	P_3		P_1	P_2	P_3
P_1	1,9	43,7	45,9	P_1	9,7	41,0	40,7
P_2		1,9	51,3	P_2		9,9	42,9
P_3			1,9	P_3			9,9

Tabulka 4.3: Volby Eulerových úhlů pro $N_o = 5$.

	φ_1	$\cos(\phi)$	φ_2
P_1	$\pi/4$	$\mathcal{R}(-\eta, \eta)$	$3\pi/4$
P_2	$\mathcal{R}(0, \theta)$	$\sqrt{2}/2$	0
P_3	0	$\mathcal{R}(-\eta, \eta)$	0
P_4	$\mathcal{R}(0, \theta)$	$1/2$	$\pi/4$
P_5	$\mathcal{R}(0, \theta)$	1	$\pi/4$

Tabulka 4.4: Odhad střední disorientace mezi skupinami uvedenými v tabulce 4.3 s volbou $\theta = \pi/32$ a $\eta = 0,05$.

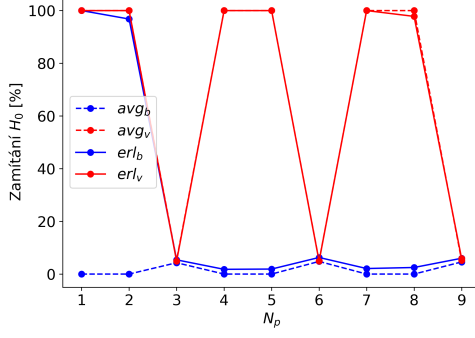
	P_1	P_2	P_3	P_4	P_5
P_1	1,9	47,8	61,7	42,6	45,1
P_2		1,9	43,7	46,2	61,5
P_3			1,9	53,1	42,3
P_4				1,9	59,7
P_5					1,9

zvolen správně. U této volby přiřazujeme větší váhu podobně velkým zrnům, jejichž orientace jsou si blízké. Pro testy s váhovou funkcí w_b usuzujeme, že nefungují v tomto případě optimálně.

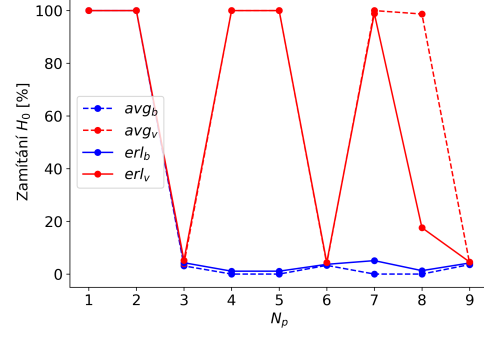
V případech, kdy N_p je násobkem N_o , se hodnota procentuálního zamítání pohybuje kolem 5% pro všechny typy testů pro obě mozaiky, což odpovídá předepsané hladině testu, neboť v takové situaci platí nulová hypotéza.

Na obrázku 4.7 jsou vykresleny stejné typy grafů, ale pro druhou volbu orientací uvedených v tabulce 4.1. Jak vidíme v tabulce 4.2, disorientace v rámci stejných skupin jsou vyšší než při první volbě a mezi různými skupinami naopak menší. Čekali bychom, že pro takový model budeme pro $N_p \neq kN_o$, $k \in \mathbb{Z}$ zamítat méně, což se pro vyšší hodnoty N_p naplňuje.

Na obrázku 4.8 jsou vykresleny grafy závislostí procentuálního počtu zamítnutých nulových hypotéz na počtu permutačních skupin pro volbu orientací uvedených v tabulce 4.3.

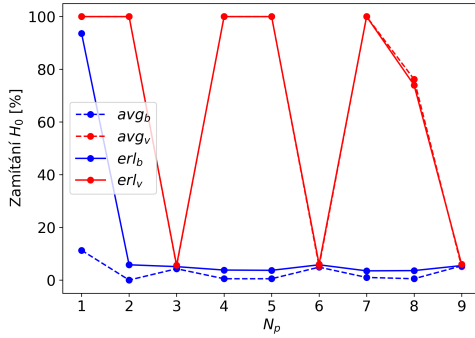


(a) Laguerrova mozaika.

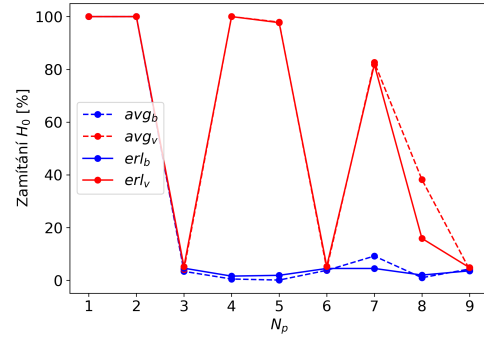


(b) Voronoiova mozaika.

Obrázek 4.6: Závislost procentuálního počtu zamítání nulové hypotézy o podmíněně nezávislém kótování mozaik pro $N_o = 3$ s volbou $\theta = \pi/32$ a $\eta = 0,05$.



(a) Laguerrova mozaika.



(b) Voronoiova mozaika.

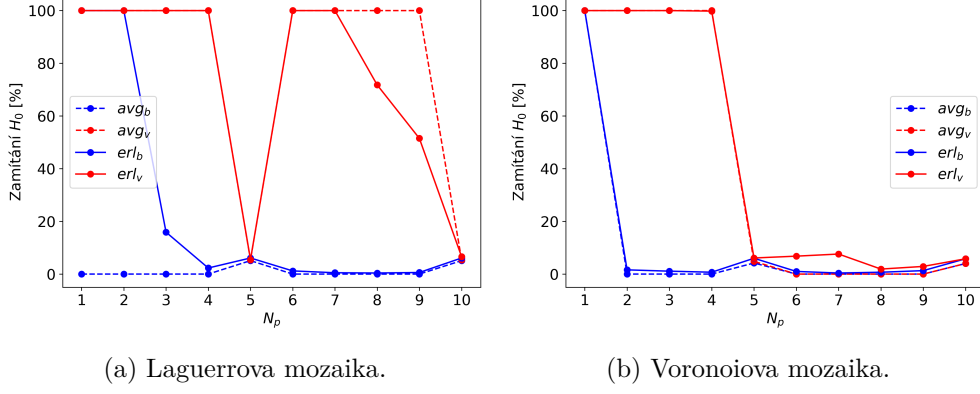
Obrázek 4.7: Závislost procentuálního počtu zamítání nulové hypotézy o podmíněně nezávislém kótování mozaik pro $N_o = 3$ s volbou $\theta = \pi/6$ a $\eta = 0,25$.

Na rozdíl od případu, kdy jsme uvažovali pouze 3 skupiny orientací, se výsledky pro Laguerrovu a Voronoiovu mozaiku liší. V případě Laguerrovy mozaiky jsou výsledky podobné jako u 3 skupin a opět velmi záleží na volbě váhové funkce v testové statistice obou typů testu. Pro Voronoiovu pro $N_p > N_o$ nepřesahuje procentuální počet zamítání nulové hypotézy 10 %. Tento rozdíl může být způsobený počtem zrn v mozaice, či rozdělením objemů zrn v mozaice. Histogramy relativních objemů V_r zrn pro obě mozaiky jsou vykresleny na obrázku 4.9, kde relativní objem i -tého zrna uvažujeme jako

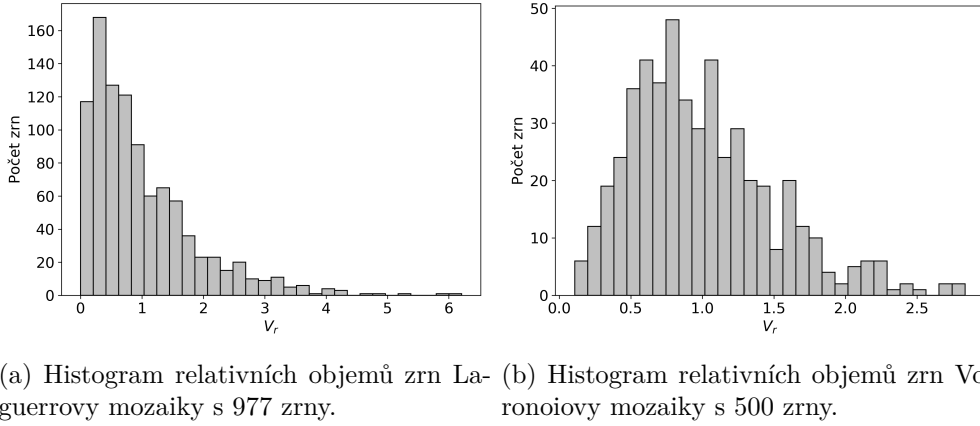
$$V_r^i = |\mathcal{I}| \frac{|\Xi_i|}{\sum_{i \in \mathcal{I}} |\Xi_i|}.$$

Histogram relativních objemů u Laguerrovy mozaiky (obrázek 4.9a) je zešíkmený doleva, více než 60 % zrn má objem menší než průměrný objem. Podobné chování rozdělení relativních objemů je u polykrystalických mikrostruktur obvyklé, viz např. Groeber a kol. (2008). U Voronoiovy mozaiky (obrázek 4.9b) je tvar histogramu více symetrický.

Nicméně v případech, kdy N_p je násobkem N_o , se opět hodnota procentuálního zamítání pro obě mozaiky pohybuje kolem předepsané hladiny testu. Pro $N_p = 1$ testujeme, zda není mozaika nezávisle kótovaná. Není tedy překvapující, že pro tuto hodnotu nulovou hypotézu převážně zamítáme.



Obrázek 4.8: Závislost procentuálního počtu zamítání nulové hypotézy o podmíněně nezávislém kótování mozaik pro $N_0 = 5$ s volbou $\theta = \pi/32$ a $\eta = 0,05$.



Obrázek 4.9: Histogramy relativních objemů zrn.

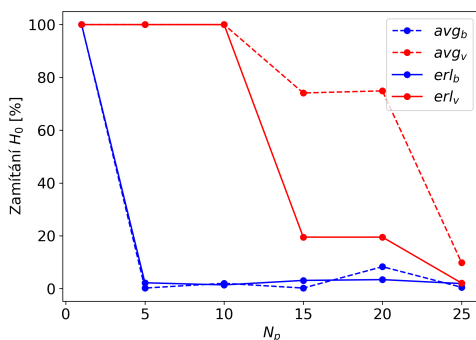
Spojité závislost

Uvažujeme-li spojitou závislost, generujeme orientaci i -tého zrna Ξ_i pomocí Eulerových úhlů jako

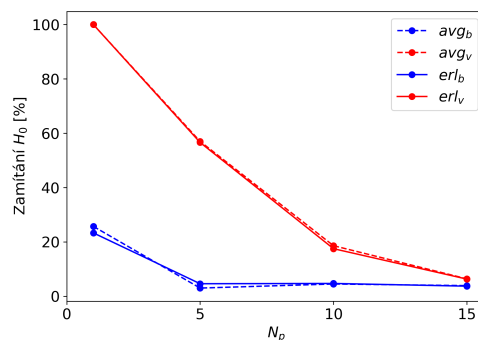
$$\varphi_1 = 0, \quad \varphi_2 = \frac{\pi}{4}, \quad \cos \phi \sim \mathcal{R}(\max\{0, \vartheta|\Xi_i| - \iota\}, \min\{1, \vartheta|\Xi_i| + \iota\}),$$

kde $|\Xi_i|$ opět značí objem zrna a ϑ a ι jsou parametry kontrolující závislost. Parametr ϑ volíme z intervalu $[0, \vartheta_{\max}]$, kde $\vartheta_{\max} = 1/\max_{i \in \mathcal{I}} |\Xi_i|$. Tato volba zaručuje, že úhel ϕ je generován na intervalu $(0, \pi/2)$. V případě $\vartheta = 0$ je závislost ovlivněná tímto parametrem nejslabší a s rostoucí hodnotou ϑ roste. Pro parametr ι je závislost naopak pro $\iota = 0$ nejsilnější a s rostoucí hodnotou ι slábne.

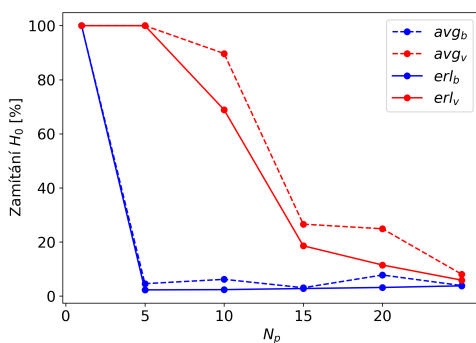
Na obrázku 4.10 jsou vykresleny grafy závislostí procentuálního počtu zamítání v závislosti na počtu permutačních skupin N_p pro Voronoiovu mozaiku pro různé volby parametrů ϑ a ι . Vidíme, že výsledky testů závisí na volbě váhové funkce. Pro funkci w_b klesá procentuální zamítání mnohem rychleji než pro funkci w_v , nicméně v obou případech výsledky odpovídají intuici, že s rostoucím počtem permutačních skupin se nulovou hypotézou blížíme skutečnému modelu.



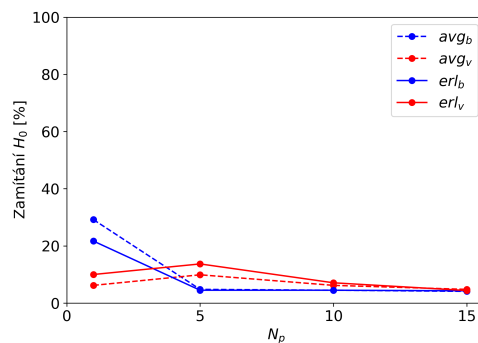
(a) $\vartheta = \vartheta_{\max}$ a $\iota = 0,05$.



(b) $\vartheta = \vartheta_{\max}$ a $\iota = 0,25$.



(c) $\vartheta = \vartheta_{\max}/2$ a $\iota = 0,05$.



(d) $\vartheta = \vartheta_{\max}/2$ a $\iota = 0,25$.

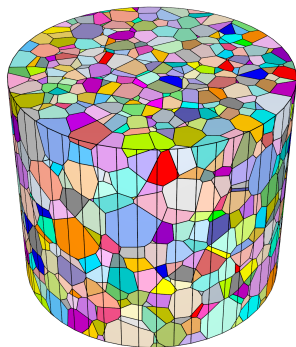
Obrázek 4.10: Závislost procentuálního počtu zamítání nulové hypotézy o podmíněně nezávislém kótování mozaik pro model spojitě závislosti pro Voronoiovu mozaiku.

5. Aplikace na reálná data

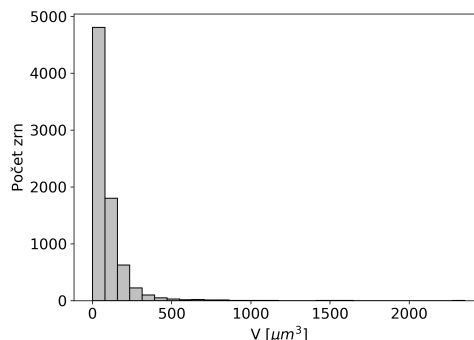
Výše uvedené nástroje můžeme využít pro analýzu reálných dat. Aplikujeme je na reálná data anizotropního superelastického materiálu Nitinol (NiTi) (Sedmák a kol., 2016) s kubickou krystalovou strukturou. Jde o slitinu s tvarovou pamětí.

Materiál byl obousměrně namáhán ve směru osy ND (ve směru délky drátu) a hodnoty fyzikálních veličin (jako orientace zrn, tenzor napětí a deformace) byly měřeny pomocí metody 3D-XRD (viz podkapitola 1.3). Na obrázku 1.7 je vykreslen výsledek měření s barevnou škálou odpovídající normálovému napětí σ_{zz} . Jelikož tato metoda nepodává tak velký rozsah informací (např. neznáme sousední zrna), byl materiál zrekonstruován Laguerrovou mozaikou metodou popsanou v Petrich a kol. (2019) tak, aby co možná nejlépe odpovídala těžiště a velikosti jednotlivých zrn. O kvalitě této rekonstrukce pojednává článek Heller a kol. (2020).

Data získána metodou 3D-XRD dávají informaci o polohách těžišť zrn, objemech zrn, orientacích krystalové mřížky jednotlivých zrn a tenzoru napětí. Celkem jde o 8063 zrn. Zrekonstruovaná Laguerrova mozaika ve válci o průměru $50 \mu\text{m}$ a s výškou $100 \mu\text{m}$, obsahující 7685 zrn, je zobrazena na obrázku 5.1. Jak jsme uvedli v podkapitole 3.5, v případě Laguerrovy mozaiky nemusí ze všech generátorů vzniknout zrno. Z tohoto důvodu je počet zrn zrekonstruované mozaiky nižší než v případě reálných dat. Na obrázku 5.2 je vykreslen histogram objemů zrn pro tuto mozaiku.



Obrázek 5.1: Laguerrova mozaika pro rekonstrukci dat NiTi.



Obrázek 5.2: Histogram objemů zrn Laguerrovy mozaiky.

5.1 Náhodné pole

Pomocí metody 3D-XRD na reálných datech získáme pro každé zrno průměrné hodnoty jednotlivých složek tenzoru deformace a tenzoru napětí. Zrekonstruovaná mozaika poskytuje podrobnější zkoumání těchto hodnot. Tu totiž můžeme proložit konečnou sítí čtyřstěnů, které nazveme *elementy*. Těch je v našem případě 1 555 401. Numerická simulace pak metodou konečných prvků počítá deformační odezvu na vnější namáhání v každém elementu mozaiky. Tenzor napětí se určí z Hookova zákona (1.1), přičemž elastické konstanty je třeba přepočítat pro každé zrno kvůli různé orientaci zrn. Výsledné hodnoty tenzoru napětí se pak pro elementy v rámci jednoho zrna liší. Více podrobností a diskuzi volby elastických konstant lze nalézt v (Heller a kol., 2020).

Jednotlivé složky tenzoru napětí můžeme považovat za realizaci stacionárního náhodného pole $\{Z(x) : x \in D\}$. Předpokládejme, že polohy těžišť elementů jsou pevné a slouží jako body, ve kterých je náhodné pole pozorováno. Jelikož je počet elementů velmi velký, můžeme zvolit náhodné síto těchto elementů o menším rozsahu a pracovat

pouze s těmito pozorováními.

Chceme-li zkoumat prostorové závislosti tenzoru napětí jednotlivých zrn, zajímá nás jeho variogram $2\gamma(h)$. Argument h je trojrozměrný vektor a můžeme ho vyjádřit jako $h = ru$, kde $r = \|h\|$ a $\|u\| = 1$. Při vykreslení odhadu variogramu nás bude zajímat několik různých směrů u . Odhad $\gamma(ru)$ uvažujeme pro r z intervalu $(0, r_{\max}]$, který rozdělíme na k podintervalů stejné délky. Středů těchto podintervalů jsou $r_l = (l - \frac{1}{2}) \frac{r_{\max}}{k}$, $l = 1, \dots, k$. Definujeme $h_l = r_l u$ a

$$H_l = \left\{ h \in \mathbb{R}^3 : \|h\| \in \left((l-1) \frac{r_{\max}}{k}, l \frac{r_{\max}}{k} \right], \frac{h}{\|h\|} \cdot u \geq \cos \frac{\pi}{36} \right\}, \quad l = 1, \dots, k, \quad (5.1)$$

kde $a \cdot b$ značí skalární součin vektorů a a b . Ve skupině H_l uvažujeme vektory, jejichž velikost se od $r_l = \|h_l\|$ liší maximálně o polovinu délky podintervalů intervalu $(0, r_{\max}]$ a které svírají se směrem u úhel maximálně 5° . Nyní můžeme spočítat odhad variogramu podle vzorce (3.2) pro různé volby u . Pro srovnání budeme uvažovat i situaci, ve které nezávisí na volbě směru. Využijeme-li opět rozdělení na podintervalů, tak izotropní verze empirického variogramu je

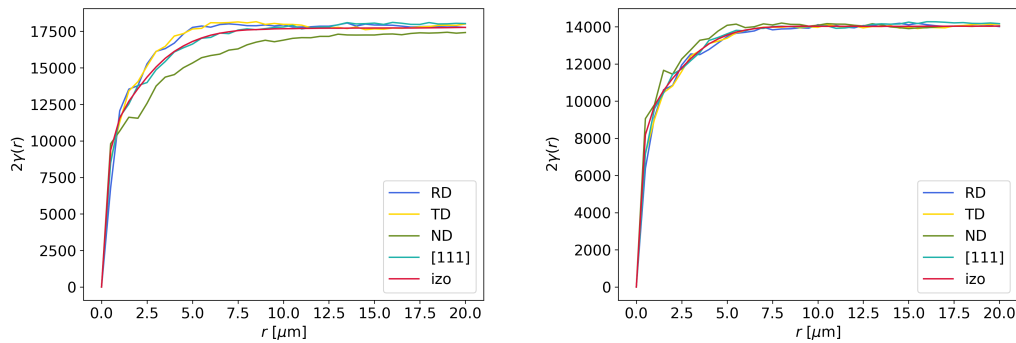
$$2\hat{\gamma}(r_l) = \frac{1}{|N(r_l)|} \sum_{N(r_l)} (Z(x_i) - Z(x_j))^2, \quad (5.2)$$

kde $N(r_l) = \left\{ (x_i, x_j) : \|x_i - x_j\| \in \left((l-1) \frac{r_{\max}}{k}, l \frac{r_{\max}}{k} \right], i, j = 1, \dots, n \right\}$ a n značí počet elementů. V případě náhodného síta, které jsme zvolili, je $n = 307983$.

Na obrázku 5.3 jsou vykresleny empirické odhady variogramu (3.2) pro normálové napětí σ_{zz} (odlišujeme globální a lokální) v různých směrech válce, a to RD = [100], TD = [010], ND = [001] a směru [111], který představuje preferenční orientaci zrn, která se v naměřených datech vyskytuje (viz obrázky 2.5 a 2.7). Pro porovnání je zde také červeně vykreslena izotropní verze empirického variogramu (5.2), u které nezávisí na volbě směru a značíme ji „izo“.

V případě globálního napětí vidíme, že ve směru osy ND, což je směr namáhání, dochází k nárůstu hodnot pomaleji než v ostatních směrech, ve kterých se hodnoty variogramu ustalují pro vzdálenost zhruba $8 \mu\text{m}$. Pro představu průměrný poloměr zrna je přibližně $4 \mu\text{m}$. V případě směru osy ND se hodnota dosahu variogramu (viz definice 13) pohybuje zhruba až kolem $15 \mu\text{m}$. Hodnoty normálového napětí σ_{zz} mají tedy tendenci se více ovlivňovat ve směru osy namáhání zhruba ob sousední zrno, zatímco v ostatních směrech se ovlivňují pouze sousední zrna.

Podíváme-li se na empirický odhad variogramu pro lokální napětí (obrázek 5.3b) vidíme, že dosah variogramu je ve všech směrech stejný, a to opět zhruba $8 \mu\text{m}$.



(a) Globální napětí.

(b) Lokální napětí.

Obrázek 5.3: Empirický odhad variogramu pro normálové napětí σ_{zz} .

5.2 Kótovaný bodový proces

Těžiště zrn experimentálních dat můžeme považovat za realizaci stacionárního bodového procesu na omezené množině $D \in \mathcal{B}_0^3$. Uvažujeme-li navíc objem zrna V_i jako kótu příslušného těžiště, jedná se o realizaci stacionárního kótovaného bodového procesu $\Phi_m = \sum_{i \in \mathcal{I}} \delta_{(X_i, V_i)}$ s kótami z prostoru $\mathbb{M} = \mathbb{R}^+$ a $n = |\mathcal{I}| = 8063$.

Chceme-li, podobně jako u náhodného pole, zkoumat prostorové závislosti objemů zrn, zajímá nás korelační funkce kót $\kappa_t(h)$, nebo její normalizovaná verze $k_t(h)$. Speciálně se zaměříme na Stoyanovu korelační funkci kót $k_{mm}(h)$. Při vykreslení odhadu budeme postupovat podobně jako v případě odhadu variogramu. Argument h můžeme opět vyjádřit jako $h = ru$, kde $r = \|h\|$ a $\|u\| = 1$. Odhad $k_{mm}(ru)$ uvažujeme pro r z intervalu $(0, r_{\max}]$, který rozdělíme na k podintervalů stejné délky se středy $r_l = (l - \frac{1}{2}) \frac{r_{\max}}{k}$, $l = 1, \dots, k$. Definujeme $h_l = r_l u$ a uvažujeme H_l definované předpisem (5.1). Stejně jako v případě variogramu, uvažujeme ve skupině H_l vektory, jejichž velikost se od $r_l = \|h_l\|$ liší maximálně o polovinu délky podintervalů intervalu $(0, r_{\max}]$ a které svírají se směrem u úhel maximálně 5° . Nyní můžeme spočítat odhad $k_{mm}(h)$ podle vzorce (3.3) pro různé volby u . Pro srovnání budeme opět uvažovat i situaci, ve které nezávisí na volbě směru. Využijeme-li rozdělení na podintervaly, tak izotropní verze odhadu Stoyanovy korelační funkce kót je

$$\widehat{k_{mm}}(r_l) = \frac{\widehat{\kappa_{mm}}(r_l)}{(\widehat{\mu})^2}, \quad (5.3)$$

kde

$$\widehat{\mu} = \frac{1}{\Phi_m(D \times \mathbb{M})} \sum_{(X_i, V_i) \in \text{supp } \Phi_m} V_i \mathbf{1}\{X_i \in D\},$$

$$\widehat{\kappa_{mm}}(r_l) = \frac{\sum_{(X_i, V_i), (X_j, V_j) \in (\text{supp } \Phi_m) \cap (D \times \mathbb{M})} V_i V_j \mathbf{1}\{X_i - X_j \in N(r_l)\}}{\sum_{(X_i, V_i), (X_j, V_j) \in (\text{supp } \Phi_m) \cap (D \times \mathbb{M})} \mathbf{1}\{X_i - X_j \in N(r_l)\}}, \quad l = 1, \dots, k,$$

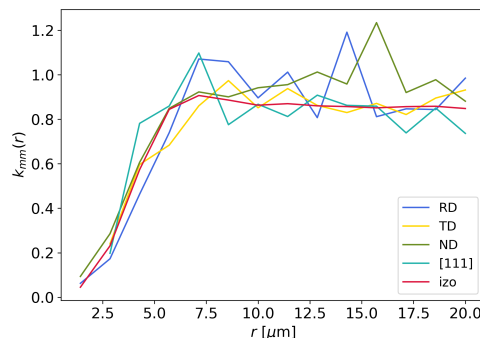
kde $N(r_l) = \left\{ h : \|h\| \in \left((l-1) \frac{r_{\max}}{k}, l \frac{r_{\max}}{k} \right], i, j = 1, \dots, n \right\}$.

V případě těchto dat vychází hodnota $\widehat{\mu}$, tedy průměrný objem zrna, zhruba $\widehat{\mu} \doteq 86,6 \mu\text{m}$. Na obrázku 5.4 je vykreslen odhad Stoyanovy korelační funkce kót podle vzorce (3.3), tedy s volbou $t(m_1, m_2) = m_1 m_2$, stejně jako u variogramu pro různé volby u . Červeně je zde opět vykreslena izotropní verze tohoto odhadu (5.3), kterou značíme „izo“. Vidíme, že korelační funkce se ustalují ve všech směrech zhruba kolem hodnoty $r = 8 \mu\text{m}$, což je stejná vzdálenost jako v případě variogramů na obrázku 5.3. Dosah interakcí je tedy zhruba stejný jako střední průměr zrna. Z toho můžeme usuzovat, že vliv mezi objemy sousedních zrn je zanedbatelný. Pro menší vzdálenosti jsou objemy negativně korelovány, což odpovídá tomu, že v blízkosti velkého zrna se vyskytují spíše menší zrna.

5.3 Kótovaná mozaika

Připojíme-li k zrnům zrekonstruované mozaiky naměřené orientace, můžeme na výsledek nahlížet jako na realizaci náhodné kótované mozaiky $\Xi_m = \sum_{i \in \mathcal{I}} \delta_{(\Xi_i, M_i)}$ a $n = |\mathcal{I}| = 7685$. Pak můžeme aplikovat testy nezávislého kótování uvedené v kapitole 4.

Na obrázku 5.5 je pro porovnání vykreslena empirická distribuční funkce disorientace sousedních zrn \widehat{F}_b z definice 56 a odhad \widehat{F} distribuční funkce disorientace \overline{F} dvou



Obrázek 5.4: Odhad Stoyanovy korelační funkce kót pro objemy zrn.

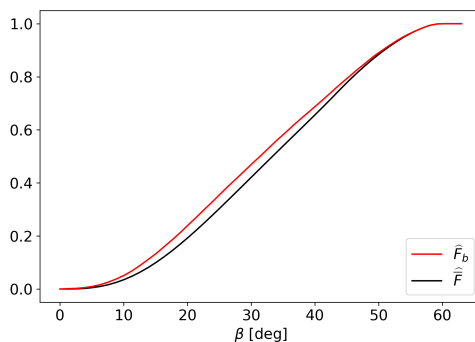
libovolných zrn z definice 54, kde

$$\widehat{F}(\beta) = \frac{1}{n^2} \sum_{i,j \in \mathcal{I}}^{\neq} \mathbf{1}\{\zeta(M_i, M_j) \leq \beta\}, \quad \beta \in [0, \beta_{\max}].$$

Průměrná disorientace sousedních zrn je $\widehat{\Delta}_b \doteq 34,3^\circ$, zatímco empirický odhad střední disorientace mezi libovolnými zrny je $\widehat{\Delta} \doteq 36,6^\circ$, kde

$$\widehat{\Delta} = \frac{1}{n(n-1)} \sum_{i,j \in \mathcal{I}}^{\neq} \zeta(M_i, M_j).$$

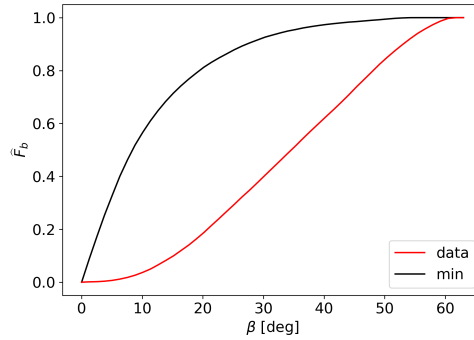
Z toho usuzujeme, že orientace mají nejspíše tendenci být rozmístěny na zrnech tak, aby průměrná disorientace sousedních zrn byla menší než mezi libovolnými dvěma zrny.



Obrázek 5.5: Odhad distribuční funkce \overline{F} (černě) a empirická distribuční funkce \widehat{F}_b (červeně) pro reálná data.

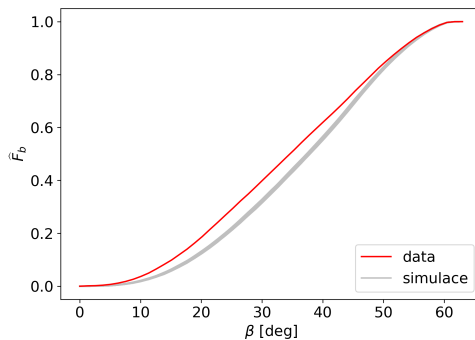
Nemůžeme ovšem říci, že orientace jsou na zrnech rozmístěny tak, aby byla minimalizována střední disorientace Δ mezi zrny, neboť přeuspořádáme-li orientace na zrnech tak, aby odhad $\widehat{\Delta}_b$ byl pro daná data co nejmenší, dostaneme hodnotu odhadu $\widehat{\Delta}_b \doteq 17,6^\circ$, což je téměř poloviční úhel než v případě naměřených dat. Na obrázku 5.6 jsou pro porovnání vykresleny empirické distribuční funkce \widehat{F}_b pro naměřená data a pro přeuspořádané orientace tak, aby byla minimalizována průměrná disorientace $\widehat{\Delta}_b$ mezi sousedními zrny. Tuto funkci značíme „min“.

Na obrázku 5.7a jsou vykresleny empirické distribuční funkce disorientací sousedních zrn. Červeně je vykreslena funkce pro orientace z dat tak, jak byla naměřena, a šedivě jsou vykresleny funkce pro zpermutované kóty (1999 permutací). Vidíme, že datová funkce je velmi extrémní vzhledem k simulačním.

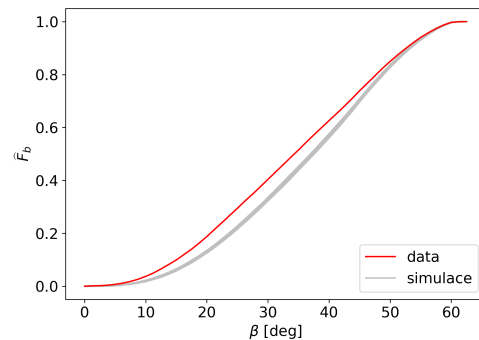


Obrázek 5.6: Empirická distribuční funkce \hat{F}_b pro naměřená data (červeně) a pro přeuspořádané orientace (černě) minimalizující $\hat{\Delta}_b$.

Provedeme-li test nezávislého kótování, vychází p -hodnota 0,0005 pro erl_b test a 0,001 pro avg_b test. V obou případech tedy zamítáme nulovou hypotézu o nezávislém kótování.



(a) Test nezávislého kótování.



(b) Test podmíněně nezávislého kótování pro $N_p = 100$.

Obrázek 5.7: Empirická distribuční funkce disorientace \hat{F}_b (červeně) při testech nezávislosti na reálných datech.

Jelikož zamítáme hypotézu o nezávislém kótování, nemůžeme při modelování této struktury oddělit modelování zrn a kót, ale musíme brát v úvahu závislosti. Samotný výsledek testu nic neříká o charakteristice těchto závislostí. Globální obálkový test ovšem umožňuje grafickou interpretaci výsledku. Obrázek 5.7a indikuje, že hypotéza je zamítnuta, protože sousední zrna mají tendenci mít podobnější orientace než v případě, kdy by orientace byly přiřazeny náhodně. V datech se tedy projevuje přítomnost pozitivních korelací mezi orientacemi sousedních zrn.

Aplikujeme-li test podmíněně nezávislého kótování uvedený výše, vychází pro hodnoty $N_p = 2, \dots, 10, 100, 500, 1000$ p -hodnoty 0,001 pro avg_b a avg_v a 0,0005 pro erl_b a erl_v testy. I v tomto případě tedy zamítáme nulovou hypotézu. Důvodem mohou být komplikovanější závislosti orientací na vlastnostech mozaiky nebo závislosti mezi orientacemi zrn. Obrázek 5.7b indikuje stejný důvod zamítnutí nulové hypotézy jako v případě testu nezávislého kótování. Vidíme, že obrázky 5.7a a 5.7b vypadají téměř identicky.

Závěr

Zabývali jsme se studiem náhodné kótované mozaiky s kótami popisujícími orientace zrn. Nově jsme definovali charakteristiky této struktury modifikací charakteristik jednodušších modelů. Dokázali jsme, že ve stacionárním případě jsou přirozené výběrové odhady podílově nestranné (tvrzení 11). Hlavním výsledkem této práce je sestavení a studium dvou typů testů, a to testu nezávislého kótování a testu podmíněně nezávislého kótování, které mohou být dále využívány při analýze vlastností daných mikrostruktur. Ukázali jsme, že navržené testy dodržují předepsanou hladinu testu (tvrzení 13 a 14, lemma 15 a 16).

Kromě testů jsme také představili nové modely závisle kótovaných mozaik, které nám posloužily jako alternativa k nulové hypotéze při zkoumání síly zmíněných testů. V simulační studii jsme zjistili, že test nezávislosti je citlivý na míru korelace mezi kótami, a přesvědčili jsme se, že skutečně dodržuje předepsanou hladinu. V případě testu podmíněně nezávislého kótování jsme narazili na situace, kdy test nefungoval optimálně, neboť nulová hypotéza byla zamítána méně často, než bylo třeba.

Po aplikaci uvedených testů na zrekonstruovanou mozaiku reálné mikrostruktury materiálu NiTi jsme dospěli k závěru, že při modelování tohoto materiálu nelze oddělit modelování zrn a jejich orientací, ale je třeba uvažovat prostorové závislosti. O kvantifikaci této závislosti ovšem ze závěrů testů nic nevíme a je zde tedy prostor pro další zkoumání.

Seznam použité literatury

- BACHMANN, F., HIELSCHER, R. a SCHAEUBEN, H. (2010). Texture analysis with MTEX – free and open source software toolbox. *Solid State Phenomena*, **160**, 63–68.
- BARNARD, G. A. (1963). Discussion on Professor Bartlett's paper. *Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Methodological)*, **25**(2), 281–296.
- BEAUSIR, B., FRESSENGEAS, C., GURAO, N. P., TÓTH, L. S. a SUWAS, S. (2009). Spatial correlation in grain misorientation distribution. *Acta Materialia*, **57**(18), 5382–5395.
- BÖHLKE, T., HAUS, U.-U. a SCHULZE, V. (2006). Crystallographic texture approximation by quadratic programming. *Acta Materialia*, **54**(5), 1359–1368.
- BUNGE, H. J. (1982). *Texture Analysis in Materials Science: Mathematical Methods*. Butterworths, London.
- CHIU, S. N., STOYAN, D., KENDALL, W. S. a MECKE, J. (2013). *Stochastic Geometry and Its Applications, 3rd Edition*. John Wiley & Sons, Chichester.
- CHO, J.-H., ROLLETT, A. D. a OH, K. H. (2005). Determination of a mean orientation in electron backscatter diffraction measurements. *Metallurgical and Materials Transactions A*, **36**(12), 3427–3438.
- DALEY, D. J. a VERE-JONES, D. (2003). *An Introduction to the Theory of Point Processes, Volume I: Elementary Theory and Methods*. Springer-Verlag, New York.
- DALEY, D. J. a VERE-JONES, D. (2008). *An Introduction to the Theory of Point Processes, Volume II: General Theory and Structure*. Springer-Verlag, New York.
- ENGLER, O. a RANDLE, V. (2010). *Introduction to Texture Analysis: Macrotexture, Microtexture, and Orientation Mapping, Second Edition*. CRC Press, Boca Raton.
- GARCÍA, R. E. a VAUDIN, M. D. (2007). Correlations between the crystallographic texture and grain boundary character in polycrystalline materials. *Acta Materialia*, **55**(17), 5728–5735.
- GROEBER, M., GHOSH, S., UCHIC, M. D. a DIMIDUK, D. M. (2008). A framework for automated analysis and simulation of 3D polycrystalline microstructures. Part 1: Statistical characterization. *Acta Materialia*, **56**(6), 1257–1273.
- HALMOS, P. R. (1950). *Measure Theory*. Springer, New York.
- HELLER, L., KARAFIÁTOVÁ, I., PETRICH, L., PAWLAS, Z., SHAYANFARD, P., BENEŠ, V., SCHMIDT, V. a ŠITTNER, P. (2020). Numerical microstructure model of NiTi wire reconstructed from 3D-XRD data. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. doi: 10.1088/1361-651X/ab89c1.
- HUMBERT, M., GEY, N., MULLER, J. a ESLING, C. (1996). Determination of a mean orientation from a cloud of orientations. Application to electron back-scattering pattern measurements. *Journal of Applied Crystallography*, **29**(6), 662–666.
- JULIAN, M. M. (2014). *Foundations of Crystallography with Computer Applications, 2nd Edition*. CRC Press, Boca Raton.

- KNOLL, D. a KEYES, D. (2004). Jacobian-free Newton–Krylov methods: a survey of approaches and applications. *Journal of Computational Physics*, **193**(2), 357–397.
- MORAWIEC, A. (2004). *Orientations and Rotations*. Springer-Verlag, Berlin.
- MYLLYMÄKI, M., MRKVIČKA, T., GRABARNIK, P., SEIJO, H. a HAHN, U. (2017). Global envelope tests for spatial processes. *Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Statistical Methodology)*, **79**, 318–404.
- NEWHAM, R. E. (2005). *Properties of Materials: Anisotropy, Symmetry, Structure*. Oxford University Press, Oxford.
- OKABE, A., BOOTS, B., SUGIHARA, K., CHIU, S. N. a KENDALL, D. G. (2000). *Spatial Tessellations: Concepts and Applications of Voronoi Diagrams, 2nd Edition*. John Wiley & Sons, Chichester.
- PALAIS, B., PALAIS, R. a RODI, S. (2009). A disorienting look at Euler's theorem on the axis of a rotation. *American Mathematical Monthly*, **116**(10), 892–909.
- PAWLAS, Z., KARAFIÁTOVÁ, I. a HELLER, L. (2020). Random tessellations marked with crystallographic orientations. *Zasláno do Spatial Statistics*.
- PETRICH, L., STANĚK, J., WANG, M., WESTHOFF, D., HELLER, L., ŠITTNER, P., KRILL, C. E., BENEŠ, V. a SCHMIDT, V. (2019). Reconstruction of grains in polycrystalline materials from incomplete data using Laguerre tessellations. *Microscopy and Microanalysis*, **25**(3), 743–752.
- POULSEN, H. (2004). *Three-Dimensional X-Ray Diffraction Microscopy*. Springer-Verlag, Berlin.
- QUEY, R., DAWSON, P. a BARBE, F. (2011). Large-scale 3D random polycrystals for the finite element method: Generation, meshing and remeshing. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **200**(17-20), 1729–1745.
- RANDLE, V. (2006). 'Five-parameter' analysis of grain boundary networks by electron backscatter diffraction. *Journal of Microscopy*, **222**(2), 69–75.
- RATAJ, J. (2006). *Bodové procesy*. Karolinum, Praha.
- ROE, R.-J. (1965). Description of crystallite orientation in polycrystalline materials. III. General solution to pole figure inversion. *Journal of Applied Physics*, **36**(6), 2024–2031.
- ROWENHORST, D., ROLLETT, A. D., ROHRER, G. S., GROEBER, M., JACKSON, M., KONIJNENBERG, P. J. a GRAEF, M. D. (2015). Consistent representations of and conversions between 3D rotations. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, **23**(8), 083501.
- SCHNEIDER, R. a WEIL, W. (2008). *Stochastic and Integral Geometry*. Springer-Verlag, Berlin.
- SEDMÁK, P., PILCH, J., HELLER, L., KOPEČEK, J., WRIGHT, J., SEDLÁK, P., FROST, M. a ŠITTNER, P. (2016). Grain-resolved analysis of localized deformation in nickel-titanium wire under tensile load. *Science*, **353**(6299), 559–562.
- STANĚK, J., KOPEČEK, J., KRÁL, P., KARAFIÁTOVÁ, I., SEITL, F. a BENEŠ, V. (2020). Comparison of segmentation of 2D and 3D EBSD measurements in polycrystalline materials. *Zasláno do Metallic Materials*.

- STOYAN, D. (1984). On correlations of marked point processes. *Mathematische Nachrichten*, **116**(1), 197–207.
- ŠEDIVÝ, O., BENEŠ, V., PONÍŽIL, P., KRÁL, P. a SKLENIČKA, V. (2013). Quantitative characterization of microstructure of pure copper processed by ECAP. *Image Analysis & Stereology*, **32**, 65–75.
- VALVODA, V., POLCAROVÁ, M. a LUKÁČ, P. (1992). *Základy strukturní analýzy*. Karolinum, Praha.

Seznam obrázků

1.1	Typy elementární buňky.	4
1.2	Mřížové parametry.	5
1.3	Millerovy indexy pro ekvivalentní směry $\langle 100 \rangle$	5
1.4	Zobrazení n -četných os v krychli.	6
1.5	Rozložení složek tenzoru napětí.	7
1.6	Měkké a tvrdé směry deformace.	7
1.7	Výsledek měření globálního normálového napětí σ_{zz} metodou 3D-XRD pro NiTi materiál.	8
2.1	Referenční souřadný systém a systém zrna.	9
2.2	Osa a úhel misorientace mezi dvěma zrny.	10
2.3	Sférické souřadnice.	16
2.4	Typy sítí pro stereografickou projekci a equal-area projekci s krokem 10°	16
2.5	Pólové obrazce založené na equal-area projekci pro tři krystalografické směry. Obrazce jsou určeny pomocí odhadu odf z dat naměřených pro NiTi materiál.	17
2.6	Projekce sférických trojúhelníků pro kubickou soustavu.	17
2.7	Inverzní pólový obrazec určený pomocí odhadu odf z dat naměřených pro NiTi materiál.	17
2.8	Řezy odhadem odf podle φ_2 po 15°	18
3.1	Teoretický variogram pro sférický model.	20
3.2	Porovnání Voronoiovy a Laguerrovy mozaiky se stejnými generátory.	29
4.1	Simulační mozaiky.	41
4.2	Řezy fundamentálními zónami přes φ_1 pro kubickou krystalovou soustavu.	42
4.3	Závislost procentuálního zamítání hypotézy nezávislého kótování pro modely MWMA _G , MWMA _b , MWMA _v a MWMA _a	44
4.4	Závislost procentuálního zamítání hypotézy nezávislého kótování pro modely WAR _G , WAR _b , WAR _v a WAR _a	46
4.5	Histogramy hodnot váhových funkcí w_v a w_a pro sousední zrna.	47
4.6	Závislost procentuálního počtu zamítání nulové hypotézy o podmíněně nezávislém kótování mozaik pro $N_o = 3$ s volbou $\theta = \pi/32$ a $\eta = 0,05$	50
4.7	Závislost procentuálního počtu zamítání nulové hypotézy o podmíněně nezávislém kótování mozaik pro $N_o = 3$ s volbou $\theta = \pi/6$ a $\eta = 0,25$	50
4.8	Závislost procentuálního počtu zamítání nulové hypotézy o podmíněně nezávislém kótování mozaik pro $N_o = 5$ s volbou $\theta = \pi/32$ a $\eta = 0,05$	51
4.9	Histogramy relativních objemů zrn.	51
4.10	Závislost procentuálního počtu zamítání nulové hypotézy o podmíněně nezávislém kótování mozaik pro model spojitě závislosti pro Voronoiovu mozaiku.	52
5.1	Laguerrova mozaika pro rekonstrukci dat NiTi.	53
5.2	Histogram objemů zrn Laguerrovy mozaiky.	53
5.3	Empirický odhad variogramu pro normálové napětí σ_{zz}	54
5.4	Odhad Stoyanovy korelační funkce kót pro objemy zrn.	56
5.5	Odhad distribuční funkce \bar{F} (černě) a empirická distribuční funkce \hat{F}_b (červeně) pro reálná data.	56

5.6	Empirická distribuční funkce \hat{F}_b pro naměřená data (červeně) a pro přeuspořádané orientace (černě) minimalizující $\hat{\Delta}_b$	57
5.7	Empirická distribuční funkce disorientace \hat{F}_b (červeně) při testech nezávislosti na reálných datech.	57

A. Operátory symetrie pro krychlovou krystalovou soustavu

Kvaterniony symetrie

$$s^1 = (1, 0, 0, 0)$$

$$s^2 = (0, 1, 0, 0)$$

$$s^3 = (0, 0, 1, 0)$$

$$s^4 = (0, 0, 0, 1)$$

$$s^5 = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$$

$$s^6 = \left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right)$$

$$s^7 = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$$

$$s^8 = \left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right)$$

$$s^9 = \left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$$

$$s^{10} = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right)$$

$$s^{11} = \left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$$

$$s^{12} = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right)$$

$$s^{13} = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0, 0\right)$$

$$s^{14} = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, 0, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0\right)$$

$$s^{15} = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, 0, 0, \frac{1}{\sqrt{2}}\right)$$

$$s^{16} = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}, 0, 0\right)$$

$$s^{17} = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, 0, -\frac{1}{\sqrt{2}}, 0\right)$$

$$s^{18} = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, 0, 0, -\frac{1}{\sqrt{2}}\right)$$

$$s^{19} = \left(0, \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0\right)$$

$$s^{20} = \left(0, -\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0\right)$$

$$s^{21} = \left(0, 0, \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}\right)$$

$$s^{22} = \left(0, 0, -\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}\right)$$

$$s^{23} = \left(0, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0, \frac{1}{\sqrt{2}}\right)$$

$$s^{24} = \left(0, -\frac{1}{\sqrt{2}}, 0, \frac{1}{\sqrt{2}}\right)$$

Matrice symetrie

$$\begin{aligned} M^1 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & M^2 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} & M^3 &= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \\ M^4 &= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & M^5 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} & M^6 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ M^7 &= \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & M^8 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} & M^9 &= \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ M^{10} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} & M^{11} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} & M^{12} &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ M^{13} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} & M^{14} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & M^{15} &= \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ M^{16} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} & M^{17} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & M^{18} &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ M^{19} &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} & M^{20} &= \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} & M^{21} &= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ M^{22} &= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} & M^{23} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & M^{24} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

B. Převody mezi popisy orientace

Definice 64. Definujeme funkci $\text{atan2} : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow [0, 2\pi)$ předpisem

$$\text{atan2}(y, x) = \begin{cases} \arctan\left(\frac{y}{x}\right), & x > 0, y \geq 0, \\ \arctan\left(\frac{y}{x}\right) + \pi, & x < 0, \\ \arctan\left(\frac{y}{x}\right) + 2\pi, & x > 0, y < 0, \\ \frac{\pi}{2}, & x = 0, y > 0, \\ \frac{3\pi}{2}, & x = 0, y < 0, \\ 0, & x = 0, y = 0. \end{cases}$$

Eulerovy úhly \longleftrightarrow Kvaternion

Eulerovy úhly \rightarrow Kvaternion

$$\begin{aligned} q_0 &= \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) \cos\left(\frac{\varphi_1 + \varphi_2}{2}\right), & q_1 &= -\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \cos\left(\frac{\varphi_1 - \varphi_2}{2}\right), \\ q_2 &= -\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \sin\left(\frac{\varphi_1 - \varphi_2}{2}\right), & q_3 &= -\cos\left(\frac{\phi}{2}\right) \sin\left(\frac{\varphi_1 + \varphi_2}{2}\right) \end{aligned}$$

Eulerovy úhly \leftarrow Kvaternion

Označme $\chi = \sqrt{(q_0^2 + q_3^2)(q_1^2 + q_2^2)} = \frac{\sin \phi}{2}$. Potom rozlišme tři případy:

$\chi > 0$:

$$\begin{aligned} \varphi_1 &= \text{atan2}(-q_0q_2 + q_1q_3, -q_0q_1 - q_2q_3), \\ \phi &= \arccos(q_0^2 + q_3^2 - q_1^2 - q_2^2), \\ \varphi_2 &= \text{atan2}(q_0q_2 + q_1q_3, -q_0q_1 + q_2q_3), \end{aligned}$$

$q_0^2 + q_3^2 = 0$:

$$\varphi_1 = \text{atan2}(2q_1q_2, q_1^2 - q_2^2), \quad \phi = \pi, \quad \varphi_2 = 0,$$

$q_1^2 + q_2^2 = 0$:

$$\varphi_1 = \text{atan2}(-2q_0q_3, q_0^2 - q_3^2), \quad \phi = 0, \quad \varphi_2 = 0.$$

Eulerovy úhly \longleftrightarrow Matice orientace

Eulerovy úhly \rightarrow Matice orientace

Označme $C = \cos \phi$, $S = \sin \phi$ a $c_i = \cos \varphi_i$, $s_i = \sin \varphi_i$ pro $i = 1, 2$. Potom

$$G = \begin{pmatrix} c_1 c_2 - s_1 s_2 C & s_1 c_2 + c_1 s_2 C & s_2 S \\ -c_1 s_2 - s_1 c_2 C & -s_1 s_2 + c_1 c_2 C & c_2 S \\ s_1 S & -c_1 S & C \end{pmatrix}.$$

Eulerovy úhly \leftarrow Matice orientace

Rozlišme tři případy:

$G_{33} \in (-1, 1)$:

$$\varphi_1 = \text{atan2}(G_{31}, -G_{32}), \quad \phi = \arccos(G_{33}), \quad \varphi_2 = \text{atan2}(G_{13}, G_{23}),$$

$G_{33} = 1$:

$$\varphi_1 = \arccos(G_{11}), \quad \phi = 0, \quad \varphi_2 = 0,$$

$G_{33} = -1$:

$$\varphi_1 = \arccos(G_{11}), \quad \phi = \pi, \quad \varphi_2 = 0.$$

Kvaternion \longleftrightarrow Matice orientace

Kvaternion \rightarrow Matice orientace

$$G = \begin{pmatrix} q_0^2 + q_1^2 - q_2^2 - q_3^2 & 2(q_1 q_2 - q_0 q_3) & 2(q_1 q_3 + q_0 q_2) \\ 2(q_1 q_2 + q_0 q_3) & q_0^2 - q_1^2 + q_2^2 - q_3^2 & 2(q_2 q_3 - q_0 q_1) \\ 2(q_1 q_3 - q_0 q_2) & 2(q_2 q_3 + q_0 q_1) & q_0^2 - q_1^2 - q_2^2 + q_3^2 \end{pmatrix}.$$

Kvaternion \leftarrow Matice orientace

$$q_0 = \frac{1}{2} \sqrt{1 + G_{11} + G_{22} + G_{33}},$$

$$q_1 = \begin{cases} \frac{1}{2} \sqrt{1 + G_{11} - G_{22} - G_{33}}, & G_{32} \geq G_{23}, \\ -\frac{1}{2} \sqrt{1 + G_{11} - G_{22} - G_{33}}, & G_{32} < G_{23}, \end{cases}$$

$$q_2 = \begin{cases} \frac{1}{2} \sqrt{1 - G_{11} + G_{22} - G_{33}}, & G_{13} \geq G_{31}, \\ -\frac{1}{2} \sqrt{1 - G_{11} + G_{22} - G_{33}}, & G_{13} < G_{31}, \end{cases}$$

$$q_3 = \begin{cases} \frac{1}{2} \sqrt{1 - G_{11} - G_{22} + G_{33}}, & G_{21} \geq G_{12}, \\ -\frac{1}{2} \sqrt{1 - G_{11} - G_{22} + G_{33}}, & G_{21} < G_{12}. \end{cases}$$

Osa a úhel rotace \longleftrightarrow Matice orientace

Osa a úhel rotace \rightarrow Matice orientace

Označme $s = \sin \omega$ a $c = \cos \omega$. Potom

$$G = \begin{pmatrix} c + (1-c)n_1^2 & (1-c)n_1n_2 - sn_3 & (1-c)n_1n_3 + sn_2 \\ (1-c)n_1n_2 + sn_3 & c + (1-c)n_2^2 & (1-c)n_2n_3 - sn_1 \\ (1-c)n_1n_3 - sn_2 & (1-c)n_2n_3 + sn_1 & c - (1+c)n_3^2 \end{pmatrix}.$$

Osa a úhel rotace \leftarrow Matice orientace

$$\omega = \arccos \left(\frac{G_{11} + G_{22} + G_{33} - 1}{2} \right),$$
$$\mathbf{n} = \begin{cases} (0, 0, 1), & \text{když } \omega = 0, \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{G_{11} + 1}, \sqrt{G_{22} + 1}, \sqrt{G_{33} + 1} \right), & \text{když } \omega = \pi, \\ \frac{1}{2s} \left(G_{32} - G_{23}, G_{13} - G_{31}, G_{21} - G_{12} \right), & \text{jinak,} \end{cases}$$

kde $s = \sin \omega$.

Osa a úhel rotace \longleftrightarrow Kvaternion

Osa a úhel rotace \rightarrow Kvaternion

$$q = \left(\cos \frac{\omega}{2}, \mathbf{n} \sin \frac{\omega}{2} \right)$$

Osa a úhel rotace \leftarrow Kvaternion

Označme

$$s = \frac{1}{\sqrt{q_1^2 + q_2^2 + q_3^2}}.$$

Potom

$$\omega = 2 \arccos(q_0),$$
$$\mathbf{n} = \begin{cases} (0, 0, 1), & \text{když } q_0 = 1, \\ (sq_1, sq_2, sq_3), & \text{jinak.} \end{cases}$$