

Thesen zur Dissertation:
„Statistics for individual crystallographic
orientation measurements“

Karl Gerald van den Boogaart

1 Statistik für Orientierungsmessungen und ihre Aufgaben

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit der Entwicklung statistischer Methoden für die Auswertung kristallographischer Orientierungsdaten aus EBSP-Messungen (EBSP=electron back scatter pattern). Dabei werden die Kristallorientierungen auf einem regelmäßigen Messraster an einer präparierten Querschnittsfläche eines Vielkristalls gemessen. Die Verteilung kristallographischer Orientierungen bezeichnet man auch als Textur. Orientierungen unterscheiden sich in zwei Aspekten wesentlich von anderen üblichen Daten. Sie entsprechen als Linksnebenklassen der Drehgruppe $SO(3)$ keinem der üblichen Skalenniveaus und erfüllen aus physikalischen Gründen im Allgemeinen nicht die in der Statistik üblichen Unabhängigkeitsvoraussetzungen. Insbesondere folgende statistische Aufgaben werden von der vorliegenden Dissertation gelöst:

- Unverzerrte Schätzung der in der Texturanalyse wichtigen Größen und Angabe von Schätzverfahren für die Schätzvarianz: C -Koeffizienten, Tensoren physikalischer Eigenschaften, Volumenanteile von Texturkomponenten, Texturindex (ohne Varianzschätzung). Übliche Verfahren erwiesen sich zum Teil als verzerrt und sind bisher sämtlich ohne die Berechnung von Schätzvarianzen ausgekommen.
- Bestimmung der Anzahl von Orientierungsmessungen, die benötigt werden, um eine dieser Größen mit vorgegebener Genauigkeit schätzen zu können.
- Statistische Untersuchungen der Kerndichteschätzung für Orientierungsdichtefunktion (ODF) aus Orientierungsmessungen: Bestimmung der Verzerrung, Schätzung der Schätzvarianz, Berechnung von Konfidenzintervallen und Konfidenzbändern für die geglättete ODF.
- Tests auf Textureigenschaften: Test auf Symmetrie, Test auf Gleichverteilung (als Spezialfall eines allgemeineren Anpassungstests) u.a.

- Entwicklung einer Varianzanalyse für Texturdaten. Mit Hilfe der in dieser Arbeit vorgestellten kristallographischen Exponentialfamilie lassen sich verschiedenste phänomenologische Modelle für die Abhängigkeit der Textur von den Parametern des Produktionsprozesses formulieren, vergleichen und statistisch überprüfen. Dieses von mir Texturregression genannte Verfahren umfasst neben einer vollständigen Schätz- und Testtheorie auch verschiedene diagnostische Verfahren, wie z.B. ein entropiebasiertes Anpassungsmaß. Die Besonderheiten von Orientierungsdaten: Verzerrung durch symmetrische Messfehler, nicht reelles Skalenniveau, Symmetrie, abhängige Messungen konnten dabei in die Theorie integriert werden.
- Statistische Analyse der Abhängigkeiten zwischen benachbarten Körnern. Räumliche Abhängigkeit konnte in das Texturregressionmodell als zusätzliche Modellierungsmöglichkeit integriert werden und so den gleichen statistischen Schlußweisen zugänglich gemacht werden. Die zugehörigen Algorithmen sind jedoch wesentlich rechenintensiver.
- Stochastische Simulation von Orientierungsdaten, die in ihrer Verteilung und räumlichen Abhängigkeiten gemessenen Daten entsprechen. Dabei werden für vorgegebene Mikrostrukturen mittels eines Gibbs-Samplers Orientierungen simuliert, die einem angepaßten Texturregressionsmodell entsprechen.
- Verfahren zum Schließen von der Textur auf den Entstehungsprozess: Diskriminanzanalyse für Texturen dient der Unterscheidung von Bildungsprozessen aus der beobachteten Textur; inverse Regression erlaubt es von der Textur auf einen mehrdimensionalen reellen Parameter des Bildungsprozesses zu schließen, falls eine entsprechende Abhängigkeit besteht und durch ein Texturregressionsmodell ausreichend gut beschrieben werden kann.

2 Methoden der Orientierungsstatistik

2.1 Das Skalenniveau einer kristallographischen Orientierung

Die kristallographische Orientierung, wie sie mit EBSP gemessen wird, kann als Linksnebenklasse der Rotationsgruppe $SO(3)$ im R^3 beschrieben werden. Diese mathematische Struktur ist zu keinem üblichen Skalenniveau auch nur homöomorph und bietet einige Besonderheiten: Verschiedene Symmetriebegriffe, die dieses Skalenniveau kennt, sind wichtig für die Texturinterpretation; selbst symmetrische Messfehler beschädigen im Allgemeinen die Erwartungstreue linearer Schätzer; die zugrundeliegende Gruppe ist nicht kommutativ.

Um mit diesen Besonderheiten umgehen zu können werden an Stelle von Momenten die in der Texturanalyse eingeführten C -Koeffizienten verwendet. Sie bieten eine einfache Möglichkeit zur Verzerrungskorrektur und spiegeln die Symmetrie- und Gruppeneigenschaften gut wieder, da sie auf den charakteristischen Darstellungen der $SO(3)$ basieren.

2.2 Varianzschätzung bei räumlicher Abhängigkeit

Zur Schätzung der Schätzvarianz aus den korrelierten Beobachtungen wurden zwei unabhängige stochastische Modelle der Abhängigkeit entwickelt, die sich ergänzen. Der erste Ansatz bezieht sich auf die Idee stochastisch unabhängig orientierter Körner und erlaubt es direkt aus Kenntnissen über die Mikrostruktur Aussagen über den Schätzfehler zu machen. Der zweite Ansatz verwendet als einzige Voraussetzung eine bekannte maximale Reichweite der stochastischen Abhängigkeit und kann daher auch für Messungen mit weitgehend unbekanntem Abhängigkeitsstrukturen verwendet werden.

2.3 Kristallographische Exponentialfamilien und Regression für Texturen

Angepasst an das Skalenniveau werden spezielle Verteilungsfamilien definiert, die ich als kristallographische Exponentialfamilien bezeichne. Basierend auf den Ideen der generalisierten linearen Modelle und der Markovschen Zufallfelder lassen sich auf der Grundlage dieser Familien statistische Modelle definieren, die die Besonderheiten der Orientierungsdaten berücksichtigen und sich gut in bekannte statistische Theorien einfügen und daher mächtige statistische Werkzeuge für Orientierungsdaten zugänglich machen. Die nötigen Verzerrungskorrekturen lassen sich leicht in diesen Ansatz hinein übertragen. Um mit der räumlichen Abhängigkeit der Beobachtungen umgehen zu können, wurde ein Test entwickelt, der es erlaubt die geschätzten Varianzen zu verwenden.

Dieser Ansatz führt zu einem allgemeinen Konstruktionsprinzip für Abhängigkeitsmodelle für Texturen, das in seiner Funktionalität der Varianzanalyse und der multiplen Regression vergleichbar ist. In der Arbeit wird aufgezeigt wie diese Modelle genutzt werden können, um konkrete Fragestellungen als solche Modelle zu formulieren und mittels der angegebenen statistischen Verfahren zu beantworten.