

二阶张量描述的物理性质主分量的数值解法及其微机程序

陈春荣 赵新乐 齐丽梅

(长春光机学院)

摘要: 本文介绍数值法求解二阶张量描述的晶体某物理性质的主轴方向及主分量数值,并给出微机BASIC程序。

一、前 言

人们在确定用二阶张量描述晶体的某物理性质的主轴及主分量时,通常都是用仪器先定向来确定主轴方向,然后再加工样品,再沿主轴方向测出其主分量的值。这种方法不但工艺过程复杂,而且影响精度,还需具备较精密的定向、加工、测试仪器。

为了解决上述问题,人们在不断改进测试方法的同时,还在寻求用数值计算法来确定主轴方向及主分量的值。过去由于数值法的计算工作相当繁琐,不易被人们采用,但在当今计算机普遍使用的时代,数值法又将重新被重视起来。本文介绍的数值解法及给出的微机程序,只需要我们粗测几个数据,送入事先编好的微机程序中,在APPLE II微机中运行很快地得出主轴方向及主分量的数值,简便易行而且精度很高。

二、基本原理及其公式

这里介绍的数值解法,就是用矩阵法由粗测值来解任意坐标系中对称二阶张量的6个独立分量,同时引入最小二乘法优选,使误差取其最小。最后用逐步逼近法来确定主轴及主分量。

下面以热膨胀系数(α_{ij})为例来说明该方法的基本原理及其公式。

1. 由粗测值求 α_{ij}

在事先不知道有关晶体主轴的任何情况下,将晶体样品切成立方体,取其三个棱边为直角坐标系的三个坐标轴方向(任意坐标轴),然后分别取沿三个棱方向的方向余弦(1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 1)和四个体对角线方向的方向余弦: $\frac{\sqrt{3}}{3}(-1, 1, 1)$, $\frac{\sqrt{3}}{3}(1, -1, 1)$, $\frac{\sqrt{3}}{3}(1, 1, -1)$, $\frac{\sqrt{3}}{3}(1, 1, 1)$ 共7个方向测量。假定测得热膨胀系数值为:

$$\begin{array}{cccccccc} M_1, & M_2, & M_3, & M_4, & M_5, & M_6, & M_7 \\ 10, & 6, & 3, & 3, & 13/3, & 17/3, & 37/3 \times 10^{-3}(\text{C}^\circ)^{-1}, \end{array}$$

任意给定方向的热膨胀 M 与坐标系中各分量的关系为:

$$M = l_i l_j \alpha_{ij} \quad (i, j = 1, 2, 3)$$

展开此式:

$$M = l_1^2 \alpha_{11} + l_2^2 \alpha_{22} + l_3^2 \alpha_{33} + 2l_2 l_3 \alpha_{23} + 2l_3 l_1 \alpha_{31} + 2l_1 l_2 \alpha_{12}$$

每沿一个方向 \bar{l} 测得一个 M 值, 得到一个六元一次方程, 只要用 6 个方向测出 6 个 M 值就可列出六元一次方程组, 用矩阵表示:

$$\begin{pmatrix} M_1 \\ M_2 \\ \vdots \\ M_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_1^{(1)2} & l_2^{(1)2} & l_3^{(1)2} & 2l_2^{(1)}l_3^{(1)} & 2l_3^{(1)}l_1^{(1)} & 2l_1^{(1)}l_2^{(1)} & \alpha_{11} \\ l_1^{(2)2} & l_2^{(2)2} & l_3^{(2)2} & 2l_2^{(2)}l_3^{(2)} & 2l_2^{(2)}l_1^{(2)} & 2l_3^{(2)}l_1^{(2)} & \alpha_{22} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \alpha_{33} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \alpha_{23} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \alpha_{31} \\ l_1^{(6)2} & l_2^{(6)2} & l_3^{(6)2} & 2l_2^{(6)}l_3^{(6)} & 2l_3^{(6)}l_1^{(6)} & 2l_1^{(6)}l_2^{(6)} & \alpha_{12} \end{pmatrix}$$

缩写成:

$$(M) = (a) (\alpha)$$

其中 (a) 为方程组的系数矩阵, l 的上标表示不同方向的测量序号。

由于测量时总有误差, 沿某一方向 \bar{l} 测得的 M 值并不是真实值, 而是 $M + V$, 其中 V 为误差。为了使计算得更准确些, 测量次数应多于未知数 α_{ij} 的个数, 以便组合测量结果求出测量的最优值, 这样就需引入“最小二乘法”。

沿上述 7 个方向测量值考虑误差后把方程改写为:

$$\begin{aligned} V_1 &= l_{(1)2} \alpha_{11} + l_2^{(1)2} \alpha_{22} + l_3^{(1)2} \alpha_{33} + 2l_2^{(1)}l_3^{(1)} \alpha_{23} + 2l_3^{(1)}l_1^{(1)} \alpha_{31} + 2l_1^{(1)}l_2^{(1)} \alpha_{12} - M_1 \\ V_2 &= l_1^{(2)2} \alpha_{11} + l_2^{(2)2} \alpha_{22} + l_3^{(2)2} \alpha_{33} + 2l_2^{(2)}l_3^{(2)} \alpha_{23} + 2l_3^{(2)}l_1^{(2)} \alpha_{31} \\ &\quad + 2l_1^{(2)}l_2^{(2)} \alpha_{12} - M_2 \\ &\dots \dots \dots \\ V_7 &= l_1^{(7)2} \alpha_{11} + l_2^{(7)2} \alpha_{22} + l_3^{(7)2} \alpha_{33} + \dots \dots \dots + 2l_1^{(7)}l_2^{(7)} \alpha_{12} - M_7 \end{aligned}$$

即

$$V_p = a_{p,n} \alpha_n - M_p \quad \begin{cases} p = 1, 2, \dots, 7 \\ n = 1, 2, \dots, 6 \end{cases} \quad (1)$$

其中 $a_{p,n}$ 为系数矩阵 (7×6) , α_n 为 α_{ij} 的简化下标分量。写成矩阵表示:

$$(V) = (a) (\alpha) - (M) \quad (2)$$

若从 7 个方程中选 6 个为一组构成方程组, 有 C_7^6 种取法。若令误差为 0, 则每组的 6 个 α_n 值都不相同。“最小二乘法”指出, 这 6 个 α_n 值应这样选择, 使得 $V_1^2 + V_2^2 + \dots + V_7^2$ 为最小值时是合适的。由极值条件应满足下式:

$$V_p \frac{\partial V_p}{\partial \alpha_n} = 0 \quad (3)$$

由 (1) 式得

$$V_p \alpha_n = 0 \quad (4)$$

再由 (2) 式和 (4) 式消去 V_p , 并将 (1) 式中求和下标 n 改写为 k , 得到

$$(\alpha_{pk}\alpha_k - M_p)\alpha_{pk} = 0$$

或

$$(a_i)_{z,p}(\alpha_{pk}\alpha_k - M_p) = 0 \tag{5}$$

其中 (a_i) 为 (α) 的转置矩阵 (6×7) ，进一步改写：

$$\begin{aligned} (a_i)(\alpha)(\alpha) - (a_i)(M) &= 0 \\ \alpha &= ((a_i)(\alpha))^{-1}(a_i)(M) \end{aligned} \tag{6}$$

这样就可由 $(a_{i,1 \times 6})$ 矩阵， $(M(6))$ 列矩阵算出 (α) 的 6 个独立分量。
由前面假定的粗测 M 值，计算得

$$(\alpha) = \begin{pmatrix} 10 \\ 6 \\ 3 \\ 3 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix}$$

并且已经用最小二乘法将测量的误差处理到最小值。

2. 逐步逼近法求主轴和主分量

前面所求的 (α) 中各分量是任意坐标系中的热膨胀系数。下面用逐步逼近法来确定主轴方向，进而确定主分量。

由晶体物理性质知道，在晶体中单位温升时沿某一 \vec{l} 方向由于热膨胀引起的位移为：

$$(u_1) = (\alpha)(l_1)$$

位移 (u_1) 实际上就是单位温升时的应变，因此利用应变曲面（也就是热膨胀系数曲面）的矢经法线的性质，可由 \vec{l}_1 求出 \vec{u}_1 的方向，再由该二阶曲面中心作另一个新的单位向量 \vec{l}_2 。得到 $\vec{l}_2 \parallel \vec{u}_1$ 。再利用示性面求出 \vec{u}_2 的方向，再作 $\vec{l}_3 \parallel \vec{u}_2$ ，……依此类推。若二阶示性面是椭

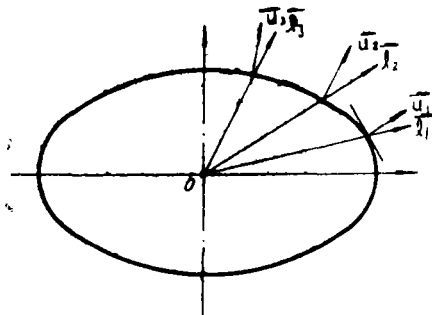


图1 逐步逼近法求主轴

球面，那么沿主轴方向将有 $\vec{l} \parallel \vec{u}$ ，则矢量 \vec{l} 与 \vec{u} 必然同时收敛于主轴（如图 1 所示），从而确定出主轴方向。

(1) 求最大主膨胀系数

如果 \vec{l}_1 方向 (由前面假定知该方向粗测值最大) 就是立方体样品的 \vec{x}_1 方向, 再将前面 (6) 式中计算的 (α) 列矩阵写成 (3×3) 矩阵, 则 (u_1) 为:

$$(u_1) \times 10^5 = \begin{pmatrix} 10 & 4 & 3 \\ 4 & 6 & 2 \\ 3 & 2 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 10 \\ 4 \\ 3 \end{pmatrix}$$

$$(u_2) \times 10^5 = \begin{pmatrix} 10 & 4 & 3 \\ 4 & 6 & 2 \\ 3 & 2 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 10 \\ 4 \\ 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 125 \\ 70 \\ 47 \end{pmatrix}$$

.....

依此类推, 反复继续乘下去, 得出一系列 \vec{l}_{i+1} 与 \vec{u}_i 的数值, 最后再归一化就可看出 \vec{u} 与 \vec{l} 的方向余弦收敛性。

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 0.895 \\ 0.358 \\ 0.266 \end{pmatrix} \rightarrow \dots \rightarrow \begin{pmatrix} 0.806 \\ 0.499 \\ 0.322 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 0.803 \\ 0.500 \\ 0.319 \end{pmatrix}$$

这一组方向余弦是最短轴方向与之相对应的最大主膨胀系数

$$\begin{aligned} (\alpha) &= 10^{-5} \times \begin{pmatrix} 10 & 4 & 3 \\ 4 & 6 & 2 \\ 3 & 2 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0.803 \\ 0.500 \\ 0.319 \end{pmatrix} \\ &= 10^{-5} \times \begin{pmatrix} 10.99 \\ 6.85 \\ 4.37 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

其数值为

$$\alpha_{\max} = 13.67 \times 10^{-5} (\text{C})^{-1}$$

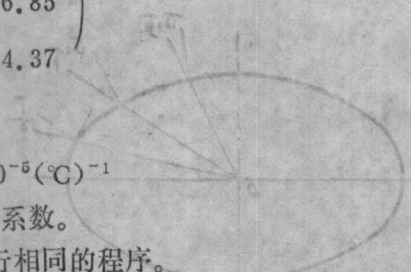
(2) 求最小主膨胀系数。

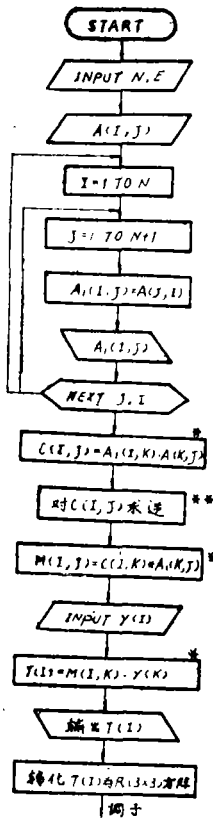
可用 $(\alpha)^{-1}$ 矩阵来进行相同的程序。

(3) 椭球面的居中主轴方向由最短轴的方向和最轴的方向的矢积得出。

以上数值解法对二阶张量描述的物理性质都适用。对于具体问题只需稍加改动即可。

三、微机程序框图





输入 $A(7 \times 6)$ 矩阵

转置 $A(6 \times 7)$ 矩阵为 $A_1(6 \times 7)$ 矩阵

$$C(6 \times 6) = A_1(6 \times 7) * A(7 \times 6)$$

对 $C(6 \times 6)$ 矩阵求逆为 $C^{-1}(6 \times 6)$

$$M(6 \times 7) = C^{-1}(6 \times 6) * A_1(6 \times 7)$$

输入 7 个粗测数据，定义为矩 $Y(7)$

$$列阵 T(6) = M(6 \times 7) * Y(7)$$

($T_{(i)}$ 为任意坐标系热膨胀系数的 6 个独立分量)

$T_{(i)}$ 转为 $R(3 \times 3)$ 方阵

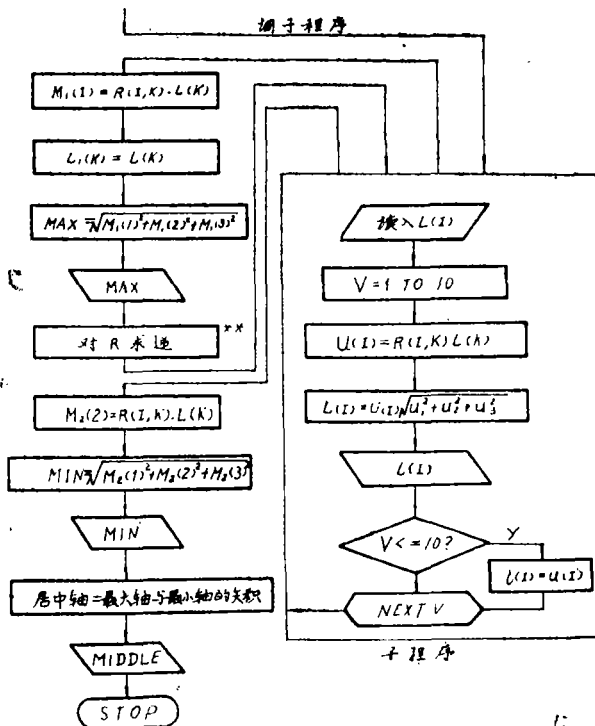


图 1 总框图

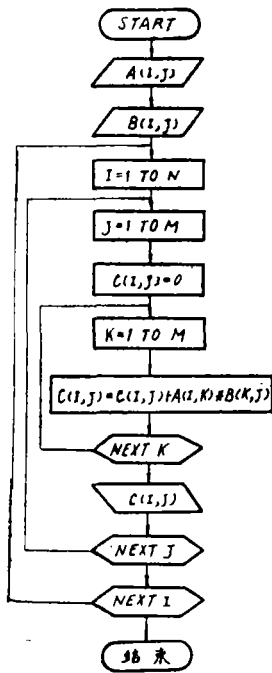


图2 求矩阵乘积程序框图

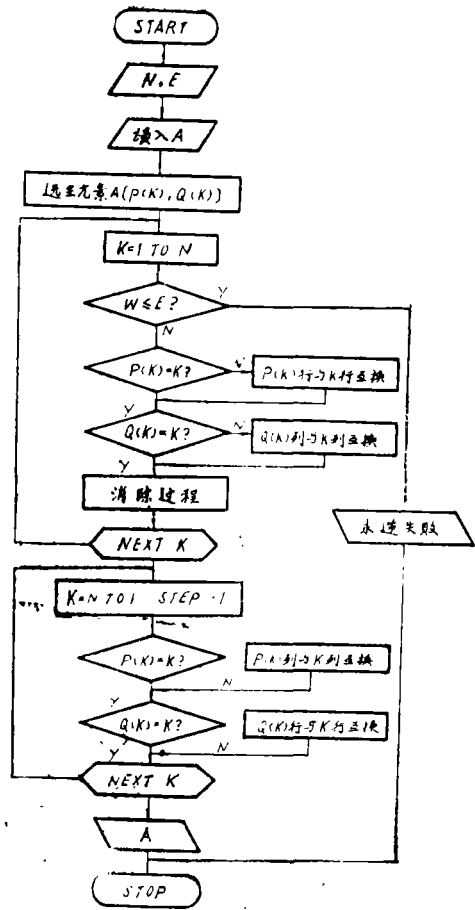


图3 求逆矩阵框图

四、结 果

该微机 BASIC 程序执行结果精度很高, 可达 $10^{-10} (^{\circ}\text{C})^{-1}$, 我们利用大型计算机运算进行比较, 结果完全一致。

如果逐步逼近法的循环次数越多则精度越高。

A Numerical Solving Process of Crystal Second-Order Tensor and the Program

Chen Chunrong Zhao Xinle

Abstract

This paper introduces a numerical method used to solve the principal axis direction and the values of principal component in analysis of some physical properties of crystal. The related BASIC program is given.