

Косовцев



Т. И. Бухарова Д. И. Николаев  
Т. И. Савелова

066-87

И  
594

**ПРИМЕНЕНИЕ ГАУССОВСКИХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ НА  $SO(3)$   
ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОЛИКРИСТАЛЛОВ**

**МОСКВА 1987**

Министерство высшего и среднего специального  
образования СССР

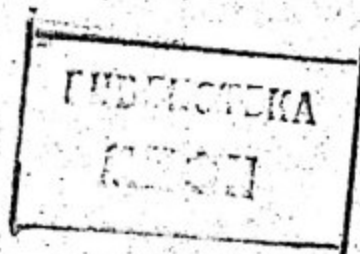
Московский ордена Трудового Красного Знамени  
инженерно-физический институт

Т.И.Бухарова Д.И.Николаев Т.И.Савелова

ПРИМЕНЕНИЕ ГАУССОВСКИХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ НА  $SO(3)$   
ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОЛИКРИСТАЛЛОВ

БИБЛИОТЕННАЯ  
ОСНД  
ИНФУ АН СС СР

Препринт 066-87



Утверждено  
редсоветом института

Москва 1987

Бухарова Т.И., Николаев Д.И., Савелова Т.И. Применение гауссовских распределений на  $SO(3)$  для вычисления физических свойств поликристаллов. - М.: Препринт/МИФИ, 066-87 . - 20 с.

Рассматривается задача нахождения физических свойств поликристаллических материалов, описываемых тензорами 2-го и 4-го рангов, с помощью функции распределения зерен по ориентациям ФРО.

В настоящей работе рассматривается задача нахождения физических свойств поликристаллических материалов, описываемых тензорами 2-го и 4-го рангов, с помощью функции распределения зерен по ориентациям (ФРО). Возможность использования ФРО для расчета физических свойств поликристаллов путем усреднения соответствующих свойств монокристаллов имеется, например, в [1-3].

В связи с неединственностью решения задачи восстановления ФРО по измеренным экспериментально полюсным фигурам (ПФ) [4] мы рассматриваем ФРО, полученную путем аппроксимации гауссовскими распределениями на  $SO(3)$ , удовлетворяющими условиям центральной предельной теоремы на группе вращений трехмерного пространства [5].

В первой части работы рассматриваются решения уравнения теплопроводности на сфере  $S^{n-1}$  в  $R^n$ ,  $n > 2$ . Здесь получена интерпретация кругового гауссовского распределения (КГР) на  $S^{n-1}$  в  $R^n$  как фундаментального решения уравнения теплопроводности. Как частный случай, мы получаем КГР на  $SO(3)$  ( $n = 4$ ) и на сфере  $S^2$  в  $R^3$  ( $n = 3$ ). Далее рассматривается решение задачи Коши для уравнения теплопроводности на  $S^{n-1}$  в  $R^n$  с помощью фундаментального решения.

Во второй части приводится аналитическое описание ФРО в виде суммы КГР на  $SO(3)$  с некоторыми "центрами", при этом ПФ соответственно представляются в виде суммы КГР на  $S^2$  [6,7].

Далее дается описание физических свойств поликристаллов гексагональной и кубической симметрий через соответствующие свойства монокристаллов с помощью тензоров 2-го и 4-го рангов через коэффициенты разложения ФРО по шаровым функциям. При этом ФРО записывается в виде суммы КГР на  $SO(3)$ , в результате чего искомые физические свойства выражаются через коэффициенты разложения КГР по характерам представлений  $SO(3)$ . Полученные в работе выражения могут быть использованы для вычисления таких свойств поликристаллов, как теплопроводность, электропроводность, линейное расширение, магнитная восприимчивость, упругие свойства и т.д.

## I. Решение уравнения теплопроводности на $S^{n-1}$ в $R^n$

Рассматривается решение задачи Коши для уравнения теплопроводности на сфере  $S^{n-1}$  в  $R^n$ . Для этого вводится понятие фун-

даментального решения на сфере  $S^{n-1}$ , изучаются его свойства. Фундаментальное решение совпадает с гауссовским распределением, полученным в [8] при изучении Броуновского движения вращения сферы  $S^2$  в  $R^3$ . Данный подход позволяет выписать в явном виде гауссовское распределение на окружности  $SO(2)$ , двумерной сфере  $S^2$  в  $R^3$ , на группах  $SU(2)$  и  $SO(3)$ .

### 1.1. Фундаментальное решение и его свойства

Рассмотрим уравнение

$$\frac{1}{\sin^{n-2} \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin^{n-2} \vartheta \frac{\partial f}{\partial \vartheta} \right) = \frac{1}{R} \frac{\partial f}{\partial t}, \quad (1)$$

где  $f = f(\vartheta, t)$ ,  $\vartheta \in [0, \pi]$ ,  $R > 0$ ,  $t > 0$ .

Определение. Решение уравнения (1)  $f_{n-1}(\vartheta, t) \equiv F_{n-1}(u, t)$ ,  $u = \cos \vartheta$ , обладающее свойствами

$$S_{n-1} \int_0^\pi f_{n-1}(\vartheta, t) \sin^{n-2} \vartheta d\vartheta = 1, \quad f_{n-1}(\vartheta, 0) = \delta(\vartheta) / S_{n-1}, \quad S_{n-1} = 2\pi^{n/2} / \Gamma(n/2),$$

называется фундаментальным решением. Имеем соотношение (см. работу [8]):

$$f_{n-1}(\vartheta, t) \equiv F_{n-1}(u, t) = (2\rho S_{n-1})^{-1} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+2\rho) \exp\{-\ell(\ell+2\rho)Rt\} \cdot C_{\ell}^{\rho}(u), \quad (2)$$

где  $\rho = (n-2)/2 > 0$ ,  $C_{\ell}^{\rho}(u)$  - многочлены Гегенбаузера [10]. Из (1) имеем при  $n = 2$ :

$$F_1(u, t) = (2\pi)^{-1} \sum_{\ell=0}^{\infty} 2\ell \exp\{-\ell^2 Rt\} C_{\ell}^0(u) = \pi^{-1} \sum_{\ell=0}^{\infty} \exp\{-\ell^2 Rt\} \cdot \cos \ell \vartheta$$

-гауссовское распределение на окружности  $SO(2)$ , полученное в [9] из центральной предельной теоремы. При  $n = 3$  из (2) находим:

$$F_2(u, t) = (4\pi)^{-1} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \exp\{-\ell(\ell+1)Rt\} \cdot P_{\ell}(u) \quad (3)$$

-гауссовское распределение на сфере  $S^2$  в  $R^3$ , здесь  $P_{\ell}(u)$  - полиномы Лежандра. Если  $n = 4$ , то из (2) получаем гауссовское распределение на  $S^3$  в  $R^4$  или на группе  $SU(2)$ :

$$F_3(u, t) = (4x^2)^{-1} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \exp\{-\ell(\ell+1)Rt\} \frac{\sin(\ell+1)v}{\sin v}, \quad v \in [0, 2\pi]. \quad (4)$$

Соответственно при переходе от  $SU(2)$  к  $SO(3)$  берем четные  $\ell = 2m$ ,  $m = 0, 1, \dots$  в соотношении (4) и находим круговое гауссовское распределение на  $SO(3)$ :

$$\tilde{F}_3(u, t) = (2x^2)^{-1} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \exp\{-\ell(\ell+1)4Rt\} \frac{\sin(\ell+1)\tilde{v}}{\sin(\tilde{v}/2)}, \quad \tilde{v} = 2v. \quad (5)$$

Отметим, что гауссовское распределение (5) получено в [5] из центральной предельной теоремы для группы вращений  $SO(3)$ .

Теорема 1. Фундаментальное решение  $f_{n-1}(v; t)$  уравнения (1) неотрицательно, бесконечно дифференцируемо при  $t > 0$ .

Доказательство. Для доказательства дифференцируемости функции (2) воспользуемся формулой для вычисления производных многочленов Гегенбауэра ([10], с. 454). В результате получаем равенство:

$$\frac{d^k F_{n-1}(u, t)}{du^k} = \frac{2^k \Gamma(p+k)}{\rho S_{n-1}} \sum_{\ell=k}^{\infty} (\ell+p) \exp\{-\ell(\ell+2p)Rt\} \cdot C_{\ell-k}^{\rho+k},$$

следовательно, функция  $F_{n-1}(u, t)$  (2) дифференцируема при  $k = 1, 2, \dots$ ,  $t > 0$ . Для доказательства того, что  $F_{n-1}(u, t) \geq 0$  при  $t > 0$ ,  $v \in [0, \pi]$  предположим противное. Пусть  $F_{n-1}(u, t) < 0$  при  $t = \bar{t} > 0$ . Обозначим  $\min_u F_{n-1}(u, \bar{t}) = d < 0$ ,  $u = \cos v$  в точке  $v = \bar{v} \in [0, \pi]$  (аналогично обстоит дело с максимумом функции). Следовательно, из уравнения (1),  $\frac{\partial F_{n-1}}{\partial t} \Big|_{v=\bar{v}} \geq 0$ . Так как  $F_{n-1}(u, t) \Big|_{t=0} = 0$ ,  $u \neq 1$ ,  $\frac{\partial F_{n-1}}{\partial t} \Big|_{v=\bar{v}} > 0$ , то  $F_{n-1}(u, \bar{t}) \Big|_{v=\bar{v}} < 0$  невозможно. Если  $\bar{v} = 0$ , то в этом случае имеем  $C_{\ell}^{\rho}(1) = \frac{\Gamma(\ell+2\rho)}{\ell! \Gamma(2\rho)} > 0$  при  $\ell = 0, 1, 2, \dots$ . Следовательно,  $F_{n-1}(1, t) < 0$  не может быть. Аналогично при  $\bar{v} = \pi$   $F_{n-1}(-1, t) < 0$  невозможно, так как из начальных условий  $F_{n-1}(-1, 0) = 0$ , то при  $t \rightarrow 0+$   $F_{n-1}(-1, t) = S_{n-1} \{1 - (2+2\rho)Rt\} > 0$ , далее при  $t > 0$  неравенство сохраняется в силу того, что  $\frac{\partial F_{n-1}}{\partial t} \Big|_{v=\bar{v}} \geq 0$ . Теорема доказана.

Теорема 2. Для фундаментального решения (2) справедливы сле-

дующие оценки в нормах  $L^2(S^{n-1})$  и  $C(S^{n-1})$ :

$$\|f_{n-1}(v; t)\|_{L^2(S^{n-1})}^2 = K_p (Rt)^{-p-\frac{1}{2}} \exp\{2\rho^2 Rt\},$$

$$\|f_{n-1}(v; t)\|_{C(S^{n-1})} = k_p (Rt)^{-p-\frac{1}{2}} \exp\{\rho^2 Rt\},$$

$$K_p = \frac{\Gamma(\rho+\frac{1}{2})}{(2\pi)^{2\rho+1}} \cdot \exp\{-2\rho+1\}, \quad k_p = \frac{\Gamma(\rho+\frac{1}{2}) \cdot \Gamma(\rho)}{2\pi^{\rho+1} \cdot \Gamma(2\rho)} \cdot \exp\{2\rho+1\}.$$

Доказательство. Используя свойства многочленов Гегенбауэра (см. [10], с. 452), получаем следующие равенства:

$$\|f_{n-1}(v; t)\|_{L^2(S^{n-1})}^2 = (S_{n-1} \cdot 2\rho)^{-2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+2\rho)^2 \exp\{-2\ell(\ell+2\rho)Rt\},$$

$$\|C_\ell^\rho(u)\|_{L^2(S^{n-1})}^2 = (S_{n-1} \cdot 2\rho)^{-2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+2\rho) \exp\{-2\ell(\ell+2\rho)Rt\} \frac{\pi \cdot \Gamma(\ell+2\rho)}{2^{2\rho-1} \ell! \Gamma^2(\rho)(\ell+\rho)}.$$

Отсюда находим оценку главного члена суммы ряда:

$$\begin{aligned} \|f_{n-1}(v; t)\|_{L^2(S^{n-1})}^2 &= \tilde{K}_p \cdot \sum_{\ell=0}^{\infty} \ell^{2\rho} \exp\{-2\ell(\ell+2\rho)Rt\} \approx \\ &\approx \tilde{K}_p \int_0^{\infty} x^{2\rho} \exp\{-2x(x+2\rho)Rt\} dx \approx K_p \cdot (Rt)^{-p-\frac{1}{2}} \cdot \exp\{2\rho^2 Rt\}. \end{aligned}$$

$$\text{здесь } \tilde{K}_p = \frac{1}{(2\pi)^{2\rho+1}} \cdot \exp\{-2\rho+1\}, \quad K_p = \frac{\Gamma(\rho+\frac{1}{2})}{(2\pi)^{\rho+1}} \cdot \exp\{-2\rho+1\}.$$

Проводя аналогичные оценки функции  $f_{n-1}(v; t)$  в норме  $C(S^{n-1})$ , находим:

$$\|f_{n-1}(v; t)\|_{C(S^{n-1})} = (S_{n-1} \cdot 2\rho)^{-1} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+2\rho) \exp\{-\ell(\ell+2\rho)Rt\},$$

$$\max_{-1 \leq u \leq 1} |C_\ell^\rho(u)| = (S_{n-1} \cdot 2\rho)^{-1} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+2\rho) \exp\{-\ell(\ell+2\rho)Rt\} \cdot \frac{\Gamma(\ell+2\rho)}{\ell! \Gamma(2\rho)} \approx$$

$$\approx k_p \cdot (Rt)^{-p-\frac{1}{2}} \cdot \exp\{\rho^2 Rt\},$$

$$\text{где } k_p = \frac{\Gamma(\rho) \Gamma(\rho+\frac{1}{2}) \exp\{-2\rho+1\}}{2\pi^{\rho+1} \Gamma(2\rho)}. \quad \text{Теорема доказана.}$$

1.2. Решение задачи Коши для уравнения теплопроводности  
на  $S^{n-1}$  в  $R^n$

Пусть  $\varphi(u) \in \mathcal{L}_G^2$ , т.е.  $\int_{-1}^1 |\varphi(u)|^2 (1-u^2)^{\rho-\frac{1}{2}} du < +\infty$ ,  
 имеет место разложение (см. [10], с.458):

$$\varphi(u) = \sum_{\ell=0}^{\infty} b_{\ell} C_{\ell}^{\rho}(u), \quad (6)$$

где

$$b_{\ell} = \frac{2^{2\rho-1} \ell! (\ell+\rho) \Gamma^2(\rho)}{\pi \Gamma(2\rho+\ell)} \int_{-1}^1 \varphi(u) C_{\ell}^{\rho}(u) \cdot (1-u^2)^{\rho-\frac{1}{2}} du,$$

$$\int_{-1}^1 |\varphi(u)|^2 (1-u^2)^{\rho-\frac{1}{2}} du = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{\pi \Gamma(2\rho+\ell)}{2^{2\rho-1} \ell! (\ell+\rho) \Gamma^2(\rho)} |b_{\ell}|^2.$$

Соответственно, пусть  $\Phi(u,t) \in \mathcal{L}_{G,t}^2$ :

$$\Phi(u,t) = \sum_{\ell=0}^{\infty} B_{\ell}(t) \cdot C_{\ell}^{\rho}(u), \quad (7)$$

где

$$B_{\ell}(t) = \frac{2^{2\rho-1} \ell! (\ell+\rho) \Gamma^2(\rho)}{\pi \Gamma(2\rho+\ell)} \int_{-1}^1 \Phi(u,t) C_{\ell}^{\rho}(u) (1-u^2)^{\rho-\frac{1}{2}} du,$$

$$\int_{-1}^1 |\Phi(u,t)|^2 (1-u^2)^{\rho-\frac{1}{2}} du < +\infty, \quad t > 0$$

Рассмотрим следующую задачу Коши:

$$\begin{cases} \frac{1}{\sin^{n-2} \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin^{n-2} \vartheta \frac{\partial f}{\partial \vartheta} \right) + \Phi(\cos \vartheta, t) = \frac{1}{R} \frac{\partial f}{\partial t}, \\ f(\vartheta, 0) = \varphi(\cos \vartheta), \quad \vartheta \in [0, \pi], \quad |f(\vartheta, t)| < +\infty \end{cases} \quad (8)$$

**Теорема 3.** Если  $\varphi(\cos \nu) \in \mathcal{L}_0^2$ ,  $\Phi(\cos \nu, t) \in \mathcal{L}_{0,t}^2$ , то решение задачи (8) существует, единственно и вычисляется по формулам:  $f(\nu, t) = f_1(\nu, t) + f_2(\nu, t)$ , где

$$f_1(\nu, t) = f_{n-1}(\nu, t) \varphi(\cos \nu) = \int_0^\pi F_{n-1}[\cos(\nu - \xi), t] \varphi(\xi) \sin^{n-2} \xi d\xi, \quad (9)$$

$$f_2(\nu, t) = R \int_0^t d\tau \int_0^\pi F_{n-1}[\cos(\nu - \xi), t - \tau] \Phi(\cos \xi, \tau) \sin^{n-2} \xi d\xi. \quad (10)$$

Доказательство. Пользуясь разложением (6) и теоремой сложения для многочленов Гегенбауэра ([10], с. 467), имеем из (9) следующие равенства:

$$\begin{aligned} f_1(\nu, t) &= (S_{n-1} 2\rho)^{-1} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} (2l+2\rho) \exp\{-l(l+2\rho)Rt\} b_m \int_0^\pi C_l^{\rho}[\cos(\nu - \xi)] \times \\ &\times C_m^{\rho}(\cos \xi) \cdot \sin^{n-2} \xi d\xi = \sum_{l,m,k=0}^{\infty} (S_{n-1} 2\rho)^{-1} (2l+2\rho) \cdot \exp\{-l(l+2\rho)Rt\} \cdot b_m \times \\ &\times \frac{1}{[\Gamma(\rho)]^2} \frac{2^{2k} \Gamma^2(\rho+k) (l-k)!}{\Gamma(l+k+2\rho) k!} \cdot \Gamma(2\rho+k-1) (2k+2\rho-1) \int_0^\pi C_m^{\rho}(\cos \xi) \sin^{n-2} \xi \times \\ &\times C_{l-k}^{\rho+k}(\cos \xi) \cdot \sin^k \xi \cdot C_{l-k}^{\rho+k}(\cos \nu) \sin^k \nu d\xi = \sum_{l=0}^{\infty} b_l \exp\{-l(l+2\rho)Rt\} C_l^{\rho}(\cos \nu). \end{aligned}$$

Отсюда легко найти, что  $f_1(\nu, t)$  является решением задачи (8) при  $\Phi(\cos \nu, t) \equiv 0$ , если воспользоваться дифференциальным уравнением для многочленов Гегенбауэра ([10], с. 453). Для функции  $f_2(\nu, t)$ , действуя аналогично, из соотношений (7) и (10) имеем выражение в виде:

$$f_2(\nu, t) = \sum_{l=0}^{\infty} \beta_l(t) C_l^{\rho}(\cos \nu),$$

где

$$\beta_l(t) = R \int_0^t b_l(\tau) \exp\{-l(l+2\rho)R(t-\tau)\} d\tau.$$

Подставляя полученное разложение функции  $f_2(\nu, t)$  в уравнение (8), получим тождество. Доказательство единственности решения задачи (8) проводится от противного аналогично доказательству неотрица-

тельности фундаментального решения уравнения (I) в теореме I. Теорема доказана.

## 2. Вычисление физических свойств поликристаллов с помощью гауссовских распределений

ФРО  $f(g, t)$  может быть представлена в виде:

$$f(g, t) = \sum_{\kappa=1}^N M_{\kappa} f_{\kappa}(g, t, g_{0\kappa}), \quad (II)$$

где  $f_{\kappa}(g, t, g_{0\kappa}) = f_{\kappa}(v_{\kappa}^{\circ}, t)$ ,  $\cos v_{\kappa}^{\circ} = (\text{Tr}(g_{0\kappa}^{-1}g) - 1)/2$ . Здесь  $f_{\kappa}(v_{\kappa}^{\circ}, t)$  - круговое гауссовское распределение на  $SO(3)$  с центром  $g_{0\kappa} \in SO(3)$ , весом  $M_{\kappa}$  (5).

Из (II) получаем, что ФРО является суммой решений задач:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\sin(v_{\kappa}^{\circ}/2)} \frac{\partial}{\partial(v_{\kappa}^{\circ}/2)} \left( \sin^2(v_{\kappa}^{\circ}/2) \frac{\partial f_{\kappa}}{\partial(v_{\kappa}^{\circ}/2)} \right) = \frac{1}{R_{\kappa}} \frac{\partial f_{\kappa}}{\partial t} \\ \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} f_{\kappa}(v_{\kappa}^{\circ}, t) \sin^2(v_{\kappa}^{\circ}/2) dv_{\kappa}^{\circ} = 1 \\ f_{\kappa}(g, 0, g_{0\kappa}) = \delta(g_{0\kappa}^{-1}g) \quad (\kappa=1, 2, \dots, N) \\ \sum_{\kappa=1}^N M_{\kappa} = 1 \end{array} \right.$$

Для ФРО  $f(g, t)$  (II) ПФ имеет вид (см. [6]):

$$\rho_{\vec{h}_i}^X(\vec{y}) = \sum_{\kappa=1}^N M_{\kappa} \sum_{l=0}^{\infty} C_l^X \cdot P_l(\vec{h}_i \cdot g_{0\kappa} \vec{y}), \quad (I2)$$

где  $C_l^X = (2l+1) \exp\{-l(l+1) \varepsilon_{0\kappa}^2\}$ ,  $\varepsilon_{0\kappa}^2 = 4R_{\kappa}t$ ,  $(\vec{h}_i \cdot g_{0\kappa} \vec{y})$  - скалярное произведение  $\vec{h}_i$  и  $g_{0\kappa} \vec{y}$ .

Большинство физических свойств поликристаллов допускают тензорное описание. Среди них важное место занимают свойства, описываемые тензорами 2-го и 4-го рангов. Получим аналитическое выражение таких свойств для поликристаллических материалов путем усреднения соответствующих свойств составляющих поликристалл зерен в предположении, что ФРО представима в виде кругового гауссовского распределения [II].

## 2.1. Вычисление физических свойств для гексагональной симметрии кристаллов

Ось симметрии шестого порядка, которая имеется у гексагональных кристаллов, является для тензоров второго и четвертого рангов осью симметрии бесконечного порядка. В этом случае физические свойства поликристалла зависят не от ФРО, а от полюсной фигуры направления этой оси (обычно кристаллографическую систему координат  $K_{кр}$  располагают так, чтобы ось  $Z_{кр}$  была параллельна оси шестого порядка, и соответствующей ПФ является  $P_{h_0}^*(\vec{y})$ , где  $\vec{h}_0 = (0001)$ ). Симметричный тензор  $E$  2-го ранга однозначно определяется по уравнению указательной поверхности. Для монокристалла в кристаллографической системе координат  $K_{кр}$  имеем:

$$E(\vec{h}) = E_1 h_1^2 + E_2 h_2^2 + E_3 h_3^2, \quad (13)$$

где  $h_i$  - направляющие косинусы единичного вектора  $\vec{h} = (\nu, \varphi)$ , ( $h_1 = \sin \nu \cos \varphi$ ,  $h_2 = \sin \nu \sin \varphi$ ,  $h_3 = \cos \nu$ ),  $E_i$  - собственные значения тензора  $E$ . В нашем случае  $E_1 = E_2$ , получаем:

$$E(\vec{h}) = E(\nu) = \frac{2}{3} E_1 + \frac{1}{3} E_3 + \frac{2}{3} (E_3 - E_1) P_2(\cos \nu), \quad (14)$$

где  $P_2(\cos \nu)$  - полином Лежандра.

Уравнение указательной поверхности тензора свойств поликристалла можно вычислить по формуле [1]:

$$\bar{E}(\vec{y}) = (4\pi)^{-1} \int_0^\pi E(\nu) \left[ \int_0^{2\pi} P_{h_0}^*(\nu, \psi) d\psi \right] \sin \nu d\nu, \quad (15)$$

где  $\vec{y}$  является полюсом полярной системы координат  $(\nu, \psi)$ . В этой системе координат для ПФ (0001) гауссовского распределения с центром в  $g_0$  имеем:

$$\int_0^{2\pi} P_{h_0}^*(\nu, \psi) d\psi = 2\pi \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \exp\{-l(l+1)\varepsilon_0^2\} P_l(\vec{y}_0 \vec{y}) P_l(\cos \nu), \quad (16)$$

здесь  $\vec{y}_0 = g_0^{-1} \vec{h}_0 = (\beta_0, \alpha_0)$ ,  $\vec{y} = (x, \eta)$  - сферические координаты, заданные в системе координат образца  $K_{одр}$ . Подставляя (6) в (15),

получаем выражение:

$$\bar{E}(\vec{y}) = \frac{2}{3}E_1 + \frac{1}{3}E_3 + \frac{2}{3}(E_3 - E_1) \exp\{-6\epsilon_0^2\} P_2(\vec{y}_0, \vec{y}). \quad (I7)$$

С помощью  $\bar{E}(\vec{y})$  можно найти соответствующий данному свойству тензор 2-го ранга ([II], с.152).

В случае аксиальной симметрии в предположении, что ось текстуры совпадает с осью образца  $Z_{05p}$ , имеем:

$$\bar{E}(\vec{y}) = \frac{2}{3}E_1 + \frac{1}{3}E_3 + \frac{2}{3}(E_3 - E_1) \exp\{-6\epsilon_0^2\} P_2(y_{03}) P_2(y_3).$$

Здесь  $\vec{y} = (y_1, y_2, y_3)$ ,  $\vec{y}_0 = (y_{01}, y_{02}, y_{03})$ .

Упругие свойства определяются тензорами 4-го ранга модулей упругости  $c_{ijkl}$  и коэффициентов податливости  $s_{ijkl}$ . Симметричность этих тензоров по парам индексов и между парами позволяет перейти к двухиндексной записи  $c_{ij}$  и  $s_{ij}$ , где  $i, j = 11, 22, 33, 23, 31, 12, 44, 55, 66$  (подробнее см. [II]). Существует взаимно однозначное соответствие между компонентами тензоров  $s_{ij}$  и  $c_{ij}$  и указательными поверхностями обратной величины модуля Юнга  $E^{-1}(\vec{y})$  и обратной величины модуля сдвига  $G^{-1}(\vec{y})$ . Для гексагонального кристалла имеем [II]:

$$E^{-1}(\nu) = A_0 + A_2 P_2(\cos \nu) + A_4 P_4(\cos \nu), \quad (I8)$$

где

$$A_0 = (8S_{11} + 3S_{33} + 2S_{44} + 4S_{13})/15,$$

$$A_2 = (-16S_{11} + 12S_{33} + 2S_{44} + 4S_{13})/21,$$

$$A_4 = 8(S_{11} + S_{33} - S_{44} - 2S_{13})/35.$$

$$G^{-1}(\nu) = B_0 + B_2 P_2(\cos \nu) + B_4 P_4(\cos \nu), \quad (I9)$$

где

$$B_0 = 2 \cdot (7S_{11} + 2S_{33} - 4S_{13} + 3S_{44} - 5S_{12}) / 15,$$

$$B_2 = 2 \cdot (4S_{33} - 3S_{44} - 10S_{11} + 14S_{12} - 8S_{13}) / 42,$$

$$B_4 = -2A_4.$$

Подставляя (18) и (19) в (15) и интегрируя, получаем:

$$\bar{E}^{-1}(\vec{y}) = A_0 + A_2 \exp\{-6\varepsilon_0^2\} \rho_2(\vec{y}_0 \vec{y}) + A_4 \exp\{-20\varepsilon_0^2\} \rho_4(\vec{y}_0 \vec{y}),$$

$$\bar{\sigma}^{-1}(\vec{y}) = B_0 + B_2 \exp\{-6\varepsilon_0^2\} \rho_2(\vec{y}_0 \vec{y}) + B_4 \exp\{-20\varepsilon_0^2\} \rho_4(\vec{y}_0 \vec{y}).$$

Усредняя по симметричным точкам (в нашем случае орторомбической симметрии их четыре  $\vec{y}_1 = (x, z)$ ,  $\vec{y}_2 = (x, x - z)$ ,  $\vec{y}_3 = (x, x + z)$ ,  $\vec{y}_4 = (x, 2x - z)$ ), имеем:

$$\bar{E}^{-1}(\vec{y}) = A_0 + A_2 \exp\{-6\varepsilon_0^2\} \sum_{i=1}^4 \rho_2(\vec{y}_0 \vec{y}_i) / 4 + A_4 \exp\{-20\varepsilon_0^2\} \sum_{i=1}^4 \rho_4(\vec{y}_0 \vec{y}_i) / 4, \quad (20)$$

$$\bar{\sigma}^{-1}(\vec{y}) = B_0 + B_2 \exp\{-6\varepsilon_0^2\} \sum_{i=1}^4 \rho_2(\vec{y}_0 \vec{y}_i) / 4 + B_4 \exp\{-20\varepsilon_0^2\} \sum_{i=1}^4 \rho_4(\vec{y}_0 \vec{y}_i) / 4. \quad (21)$$

Таким образом, мы получили выражения указательных поверхностей  $\bar{E}^{-1}(\vec{y})$  и  $\bar{\sigma}^{-1}(\vec{y})$  через параметры гауссовского распределения и компоненты тензора коэффициентов податливости монокристалла. С другой стороны, их можно записать через коэффициенты податливости поликристалла  $S_{ij}$ :

$$\bar{E}^{-1}(y) = S'_{11} y_1^4 + S'_{22} y_2^4 + S'_{33} y_3^4 + (S'_{44} + 2S'_{23}) y_2^2 y_3^2 + (S'_{55} + 2S'_{13}) y_3^2 y_1^2 + (S'_{66} + 2S'_{12}) y_2^2 y_1^2, \quad (22)$$

$$\bar{\sigma}^{-1}(\vec{y}) = 2[(S'_{11} + S'_{55}/4 + S'_{66}/4) y_1^2 + (S'_{22} + S'_{66}/4 + S'_{44}/4) y_2^2 + (S'_{33} + S'_{44}/4 + S'_{55}/4) y_3^2 - \bar{E}^{-1}(\vec{y})]. \quad (23)$$

Сравнивая соотношения (20), (21) с (22) и (23) при различных  $\vec{y}$ , находим выражения  $S'_{ij}$  через параметры гауссовского распределения:

$$S'_{ii} = A_0 + \sum_{\ell=2,4} A_{\ell} \exp\{-\ell(\ell+1)\epsilon_0^2\} P_{\ell}(y_{0i}), \quad i=1,2,3,$$

$$S'_{3+i,3+i} = B_0 + \sum_{\ell=2,4} B_{\ell} \exp\{-\ell(\ell+1)\epsilon_0^2\} [P_{\ell}(y_{0i+1}) + P_{\ell}(y_{0i+2}) - P_{\ell}(y_{0i})].$$

Здесь  $[i+j]$  - остаток от деления на 3,  $i, j = 1, 2, 3$ ,

$$S'_{ij} = A_0 + \sum_{\ell=2,4} A_{\ell} \exp\{-\ell(\ell+1)\epsilon_0^2\} \cdot [P_{\ell}(\frac{1}{\sqrt{2}}(y_{0i} + y_{0j})) + P_{\ell}(\frac{1}{\sqrt{2}}(y_{0i} - y_{0j})) -$$

$$- P_{\ell}(y_{0i})/2 - P_{\ell}(y_{0j})/2] - S^{ij}/2, \quad S^{12} = S'_{66}, \quad S^{13} = S'_{55}, \quad S^{23} = S'_{44}$$

$$(i=1,2, j=2,3, i \neq j).$$

## 2.2. Средние значения упругих свойств поликристаллов кубической симметрии

Рассмотрим упругие свойства кубических монокристаллов. Тензор коэффициентов податливости допускает разложение:

$$S_{ijkl} = (S_I^4 + 2S_I^{22})\delta_{ij}\delta_{kl}/3 + (S_I^4 - S_I^{22})(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk})/3 + S_N^4 N_{ijkl}^0, \quad (24)$$

где  $N_{ijkl}^0$  - единичный номер, причем

$$N_{ijkl}^0 = \begin{cases} 1, & \text{при } i = j = k = l, \\ 1/2, & \text{при двух парах равных индексов,} \\ 0, & \text{в остальных случаях,} \end{cases}$$

$$S_I^4 = (S_{11} + 2S_{12} + S_{44})/5, \quad S_I^{22} = S_{12} - S_{44}/4, \quad S_N^4 = (2S_{11} - 2S_{12} - S_{44})/5.$$

Если подставить в уравнения указательных поверхностей тензор коэффициентов податливости в виде (24), то получим:

$$\begin{aligned} E^{-1}(\vec{h}) &= s_I^4 + s_N^4 \cdot N_{ijkl}^0 h_i h_j h_k h_l, \\ \sigma^{-1}(\vec{h}) &= 4(s_I^4 - s_I^{22})/3 - 2s_N^4 N_{ijkl}^0 h_i h_j h_k h_l, \\ (1-2\nu)(\vec{h}) &= (s_I^4 + s_N^4 N_{ijkl}^0 h_i h_j h_k h_l) / (s_{11} + 2s_{12}) \end{aligned} \quad (25)$$

( $\nu(\vec{h})$  - коэффициент Пуассона). Указательная поверхность единичного нонора есть:

$$r(\vartheta, \varphi) = N_{ijkl}^0 h_i h_j h_k h_l = 1 - 5(h_1^2 h_2^2 + h_1^2 h_3^2 + h_2^2 h_3^2) = n k_4'(\vartheta, \varphi),$$

где  $k_4' = \frac{1}{n} [1 - 5(h_1^2 h_2^2 + h_1^2 h_3^2 + h_2^2 h_3^2)]$  - кубическая сферическая функция,  $n = \sqrt{16\pi/21}$ .

Среднее значение функций (25) есть:

$$\begin{aligned} \bar{E}^{-1}(\vec{y}) &= s_I^4 + s_N^4 \cdot r(\vec{y}), \\ \bar{\sigma}^{-1}(\vec{y}) &= 4(s_I^4 - s_I^{22})/3 - 2s_N^4 \cdot r(\vec{y}), \\ (1-2\nu)(\vec{y}) &= (s_I^4 + s_N^4 r(\vec{y})) / (s_{11} + 2s_{12}), \end{aligned} \quad (26)$$

где  $r(\vec{y}) = \int_{\Sigma} r(\vec{h}) \cdot A(\vec{h}, \vec{y}) d\vec{h}$ ,  $A(\vec{h}, \vec{y})$  - функция распределения осей [I].

Поскольку  $r(\vec{h}) = r(\vartheta, \varphi) = n k_4'(\vec{h})$ , то нас интересуют члены разложения  $A(\vec{h}, \vec{y})$  до  $l \leq 4$ , с учетом этих членов [I]:

$$A(\vec{h}, \vec{y}) = 1 + k_4'(\vec{h}) \cdot \{C_4^{10} Y_4^0(\vec{y}) + C_4^{12} [Y_4^2(\vec{y}) + Y_4^{2*}(\vec{y})] + C_4^{14} [Y_4^4(\vec{y}) + Y_4^{4*}(\vec{y})]\},$$

где  $Y_l^m(\vec{y})$  - сферические функции ( $Y_l^{m*}(\vec{y})$  - сопряженные сферические функции),  $C_l^{mk}$  - коэффициенты разложения ФРО по шаровым функциям. Выполняя интегрирование, получим:

$$r(\vec{y}) = n \cdot \{C_4^{10} Y_4^0(\vec{y}) + C_4^{12} [Y_4^2(\vec{y}) + Y_4^{2*}(\vec{y})] + C_4^{14} [Y_4^4(\vec{y}) + Y_4^{4*}(\vec{y})]\} \quad (27)$$

Коэффициенты  $C_4^{10}, C_4^{12}, C_4^{14}$  могут быть найдены по одной измеренной ПФ  $P_{h_i}(\vec{y})$  :

$$C_4^{10} = \frac{1}{k_4(\vec{h})} \int_{S^2} P_{h_i}(\vec{y}) Y_4^0(\vec{y}) d\vec{y} ,$$

$$C_4^{1\kappa} = \frac{1}{k_4(\vec{h})} \int P_{h_i}(\vec{y}) [Y_4^\kappa(\vec{y}) + Y_4^{\kappa^*}(\vec{y})] d\vec{y} \quad (\kappa=2,4)$$

В случае когда ФРО аппроксимируется круговым гауссовским распределением (II), имеем для  $l \leq 4$  :

$$A(\vec{h}, \vec{y}) = 1 + 4\chi \exp\{-20\varepsilon_0^2\} k'_4(\vec{h}) k'_4(g_0 \vec{y}) ,$$

$$r(\vec{y}) = 4\chi n \exp\{-20\varepsilon_0^2\} k'_4(g_0 \vec{y}) .$$

Отметим, что по формулам (27), (26) с учетом (23) и (22) аналогично случаю гексагональной симметрии могут быть получены формулы, связывающие значения тензора  $S_{ij}$  со значениями  $S_I^4, S_I^{22}$  и  $S_N^4$  и величинами, характеризующими ФРО,  $g_{0i}$  и  $\varepsilon_{0i}$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ).

Примечание. Можно рассматривать также обратную задачу: пусть известны параметры ФРО  $g_{0i}$  и  $\varepsilon_{0i}$  и измерены значения модуля Юнга  $E$  и модуля сдвига  $G$  в некоторых точках  $y_1, y_2, \dots, y_n$ . Тогда соотношения (26) являются линейными уравнениями относительно  $S_I^4, S_I^{22}$  и  $S_N^4$ .

#### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Работа посвящена использованию ФРО для описания физических свойств поликристаллов с помощью тензоров 2-го и 4-го рангов. При этом ФРО представляется в виде суммы круговых гауссовских распределений на группе  $SO(3)$ .

Рассматриваются случаи гексагональной и кубической симметрий как наиболее распространенных в практических приложениях

(бериллий, цирконий, титан, медь, железо, алюминий и т.д.). Для описания физических свойств поликристаллов (например, упругих свойств) достаточно использовать ПФ  $\{0001\}$  для материалов гексагональной симметрии, ПФ  $\{100\}$  или  $\{111\}$  для кубической симметрии. Рассмотрена зависимость модуля Юнга и модуля сдвига от параметров КГР  $\varepsilon_{oi}$  и  $g_{oi}$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ) для текстур прокатки.

Аналогично можно выписать выражения физических свойств поликристаллов для материалов других симметрий. Кроме того, с помощью ФРО в виде суммы КГР на  $SO(3)$  возможно описание магнитных свойств поликристаллов с использованием тензоров 6-го ранга.

#### ПРИЛОЖЕНИЕ

На рис.1 (1-4) приведены ПФ  $\{0001\}$  текстур прокатки гексагональных материалов, полученные при расчетах по формулам (12) для следующих случаев:

- 1 -  $g_o = \{0^\circ, 0^\circ, 0^\circ\}$ ,  $\varepsilon_o = 0.14$ ,  $M = 1$ ;
- 2 -  $g_o = \{90^\circ, 30^\circ, 0\}$ ,  $\varepsilon_o = 0.14$ ,  $M = 1$ ;
- 3 -  $g_{o1} = \{0^\circ, 0^\circ, 0^\circ\}$ ,  $g_{o2} = \{90^\circ, 30^\circ, 0\}$ ,  $\varepsilon_{o1} = \varepsilon_{o2} = 0.19$ ,  $M_1 = 0.14$ ,  $M_2 = 0.86$ ;
- 4 -  $g_{o1} = \{0^\circ, 0^\circ, 0^\circ\}$ ,  $g_{o2} = \{90^\circ, 30^\circ, 0\}$ ,  $\varepsilon_{o1} = \varepsilon_{o2} = 0.19$ ,  $M_1 = 0.4$ ,  $M_2 = 0.6$ .

Для этих случаев проведены вычисления зависимости магнитной восприимчивости  $\chi$  (рис.2), модулей Юнга  $E$  (рис.3) и сдвига (рис.4) поликристаллического бериллия (нумерация кривых на рис. 2-4 соответствует нумерации на рис.1) в плоскости  $НП-НН$ . При расчетах были использованы следующие характеристики монокристаллов бериллия [12], [2]:  $\chi_3 = 2,38$ ,  $\chi_1 = 0,80 \cdot 10^{-6}$  см<sup>3</sup>/г при  $T = 20$  °С;  $c_{11} = 29,23$ ,  $c_{12} = 2,67$ ,  $c_{13} = 1,40$ ,  $c_{33} = 33,64$ ,  $c_{44} = 16,25 \cdot 10^6$  Н/см<sup>2</sup>.

Для кубической симметрии проводились модельные расчеты модуля Юнга и модуля сдвига для железа (значения упругих постоянных:  $s_{11} = 7,587$ ,  $s_{12} = -2,83$ ,  $s_{44} = 8,621 \cdot 10^{-8}$  см<sup>2</sup>/Н [3]).

Параметры гауссовских распределений равны:

5.  $g_o = \{0^\circ, 0^\circ, 45^\circ\}$ ,  $\varepsilon_o = 0.25$ ,  $M = 1$ ;
6.  $g_o = \{0^\circ, 45^\circ, 0\}$ ,  $\varepsilon_o = 0.25$ ,  $M = 1$ .

На рисунках 5,7 приведены стереографические проекции ПФ

{100} и {111}, а также модулей Юнга и модулей сдвига. На рисунках 6 и 8 приводятся сечения указательных поверхностей модуля Юнга и модуля сдвига в плоскости НП-ПН.

#### Список литературы

1. Bunge H.J. *Mathematische Methoden der Texturanalyse.* - Berlin Academie-Verlag, 1969.
2. Адамеску А.А., Гельд П.В., Митюшов Е.А. Анизотропия физических свойств металлов. - М.: Металлургия, 1985.
3. Новые методы исследования текстуры поликристаллических материалов: Сб. статей/Под ред. Папирова И.И., Савеловой Т.И. - М.: Металлургия, 1985.
4. Matthies S. *On the Reproducibility of the Orientation Distribution Function of Texture Samples from Pole Figures. (Ghost Phenomena).* - *Phys. Stat. Sol. (b)*, 1979, v. 92, №2, p. K135-K137.
5. Савелова Т.И. Функции распределения зерен по ориентациям поликристаллов и их гауссовские приближения. - Заводская лаборатория, 1984, т.50, № 4, с.48-52.
6. Бухарова Т.И., Савелова Т.И. Восстановление полной функции распределения ориентировок. - Заводская лаборатория, 1985, т.51, № 10, с.56-60.
7. Николаев Д.И., Савелова Т.И. Гауссовские распределения на  $S^2(3)$  и их приложения для описания текстур. - Препринт/МИФИ 060-86, М., 1986.-24 с.
8. Perrin F. *Etude Mathematique du Mouvement Brownien de Rotation.* - *Annales Scientifique de l'ecole Normale Supérieure*, 1928, v.45, № 3, p 1-51.
9. Мардиа К. Статистический анализ угловых наблюдений. - М.: Наука, 1978.
10. Виленкин Н.Я. Специальные функции и теория представления групп. - М.: Наука, 1965.
11. Сиротин Ю.И., Шаскольская М.П. Основы кристаллофизики. - М.: Наука, 1979.
12. Веркин Б.И., Сверчков И.В. Магнитные свойства бериллия при температуре от 300 до 4,2 К. - ЖЭТФ, 1961, т.40, с.670-671.

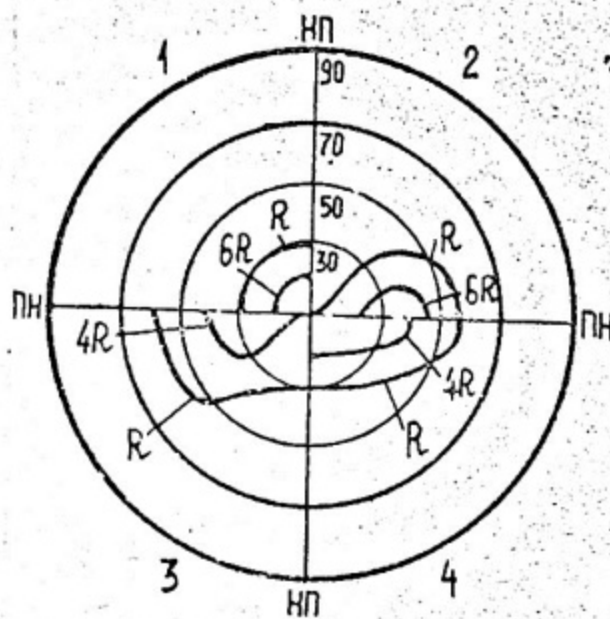


Рис. 1

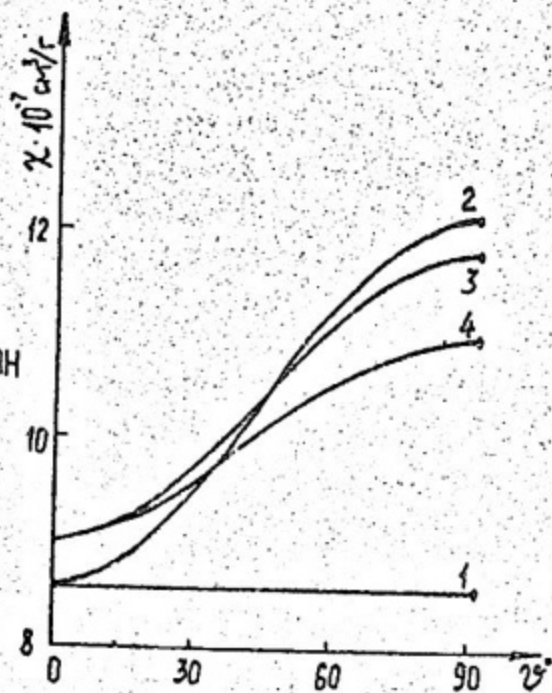


Рис. 2

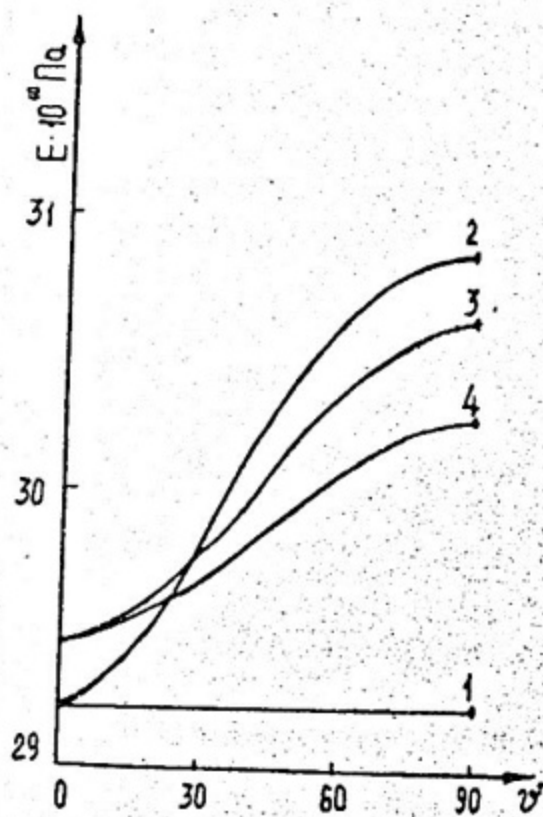


Рис. 3

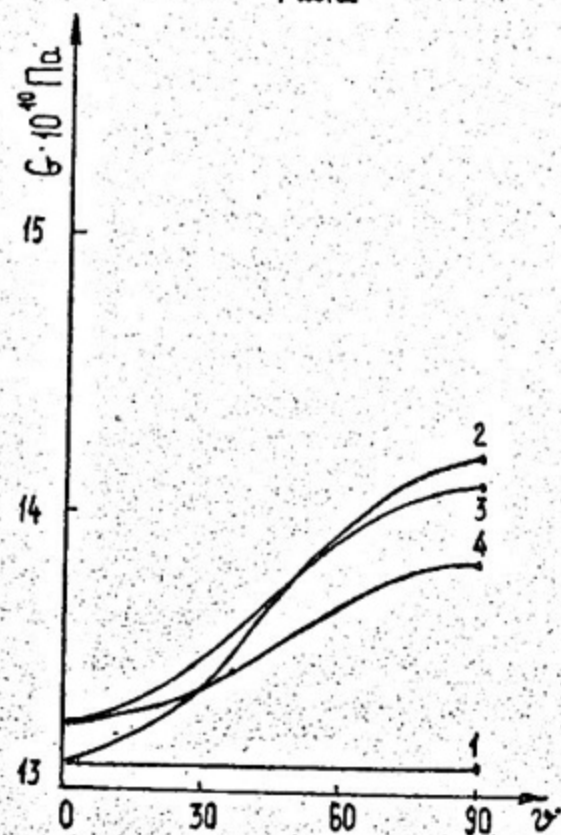


Рис. 4

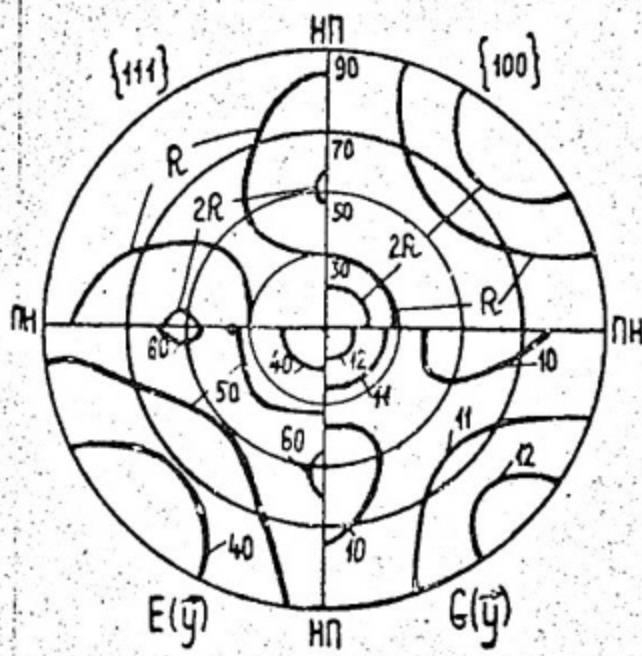


Рис. 5

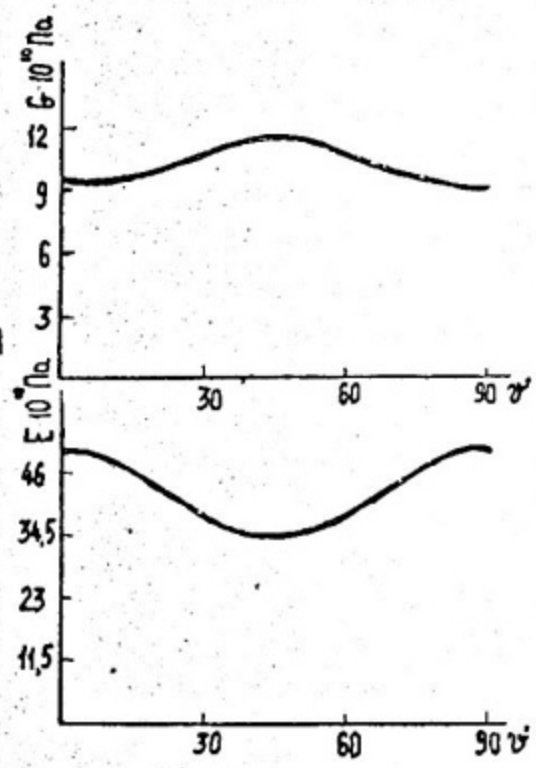


Рис. 6

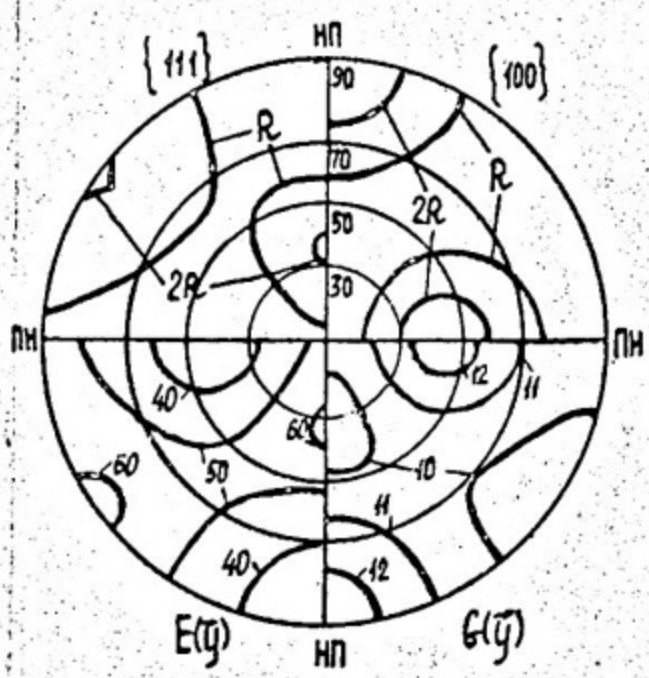


Рис. 7

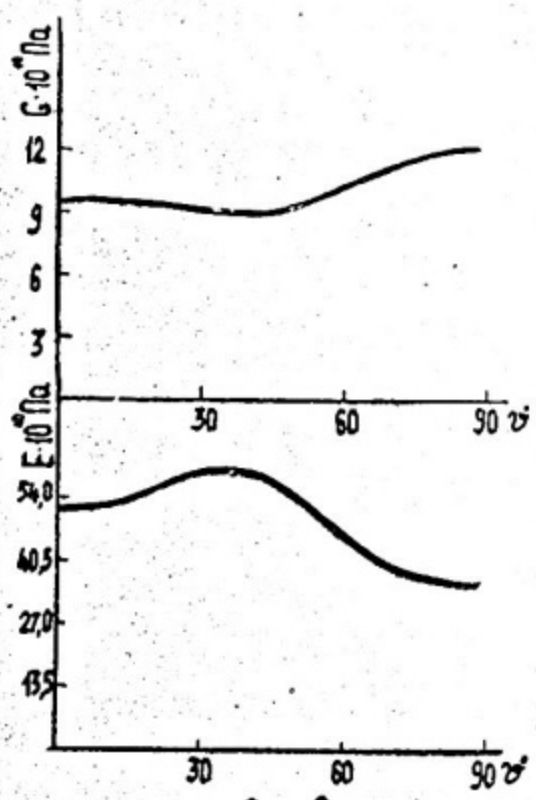


Рис. 8

## Содержание

Введение . . . . .	3
1. Решение уравнения теплопроводности на $S^{n-1}$ в $R^n$ . . . . .	3
1.1. Фундаментальное решение и его свойства . . . . .	4
1.2. Решение задачи Коши для уравнения теплопроводности на $S^{n-1}$ в $R^n$ . . . . .	7
2. Вычисление физических свойств поликристаллов с помощью гауссовских распределений . . . . .	9
2.1. Вычисление физических свойств для гексагональной симметрии кристаллов . . . . .	10
2.2. Средние значения упругих свойств поликристаллов кубической симметрии . . . . .	13
Заключение . . . . .	15
Приложение . . . . .	16
Список литературы . . . . .	17

Татьяна Иннокентьевна Бухарова  
Дмитрий Игоревич Николаев  
Татьяна Ивановна Савелова

Применение гауссовских распределений на  $SO(3)$   
для вычисления физических свойств поликристаллов

Рукопись поступила в издательский отдел 02.12.87

Ответственный за выпуск Т.И.Бухарова

---

Л.-46031      Подписано в печать 11/1 - 1988г.      Формат 60x84 1/16  
П.л. 1,25      Уч.-изд.л. 1,0      Тираж 120 экз.      Цена 10 коп.  
Изд. № 066-87      Заказ 232

---

Типография МИФИ, Каширское шоссе, 31