Доклады Академии наук СССР
1972. Том 203, № 6

УДК 539.2 *ТЕХНИЧЕСКАЯ ФИЗИКА*

И. Г. ГУТОВСКИЙ

К ТЕОРИИ АНАЛИЗА И СИНТЕЗА СПЛАВОВ И МАТЕРИАЛОВ, НЕОДНОРОДНЫХ ПО ФИЗИЧЕСКИМ СВОЙСТВАМ

(Представлено академиком Г. В. Курдюмовым 16 VIII 1971)

Задачи анализа и синтеза сплавов и материалов, неоднородных по свойствам, приобретают все большее значение в металловедении, физической химии ([1]) и при разработке материалов с заданными физическими свойствами ([2]). В данной работе выделяется класс неоднородных объектов с физическими свойствами, линейно описываемыми удельными физическими величинами, зависящими от параметра, отдельных однородных частей объекта, и предлагается общая для этих объектов теория их анализа и синтеза. Примерами объектов указанного класса могут служить многослойные, в частности, термомагнитные, материалы ([2]), некоторые порошковые материалы и многофазные сплавы. Цель настоящей работы сводится к нахождению методов точного и приближенного определения относительного содержания однородных частей объекта по его экспериментально определенным или заданным усредненным значениям свойств. В основу положено дискретное представление рассматриваемых величин и их векторное описание.

Пусть на дискретном ряде значений параметра t — таким параметром может быть, например, температура (при изучении равновесных свойств) или время (кинетика) — заданы значения какой-нибудь удельной (на единицу объема, площади и т. п.) физической величины, например, намагниченности: $M_i = M(t_i)$ — для неоднородного объекта (среднее значение), $M_{ij} = M_j(t_i)$ — для его однородных (в принятом приближении) частей. Последние называют составляющими. Здесь они различаются индексом j. Будем рассматривать два варианта задачи — с числом составляющих n и $n+1$. Переменные второго варианта будем отличать звездочкой. В соответствии с этим $j = 1, 2,\ldots,n$ или (только у переменных со звездочкой) $j = 1(\alpha), 1(\beta), 2,\ldots,n$ (вводим условный код для значений индексов с соответствием $1 \to 1\ (\alpha)$, $2 \to 1\ (\beta)$, $3 \to 2, \ldots, n+1 \to n$, что облегчает выкладки, устанавливающие связь между указанными двумя вариантами). Пусть далее R_j — относительное содержание составляющей. Будем описывать свойства объекта и его составляющих соответственно векторами $\mathbf{M} = \{M_i\}$ и $\mathbf{G}_j = \{M_{ij}\}$. Для разрешимости поставленной задачи необходимо положить $i = 1, 2,\ldots,n$. Потребуем, чтобы векторы $\mathbf{G}_j$ были линейно независимы, и учтем физический смысл коэффициентов R_j. Тогда для системы с n составляющими

$$\mathbf{M} = \sum R_j \mathbf{G}_j, \tag{1}$$

$$\sum R_j = 1, \tag{2}$$

$$R_j \geqslant 0, \tag{3}$$

$$\mathrm{Det}\,\|M_{ij}\| \neq 0. \tag{4}$$

Система (1), (2) переопределена, поэтому решение для R_j без нарушения формы зависимости $\mathbf{M}(t)$ * возможно лишь с точностью до подобия (нормировки), т. е. для некоторого $\mathbf{M}_0$ (нормированного в смысле (2)), связанного с $\mathbf{M}$ соотношением

$$\mathbf{M} = (1+a)\mathbf{M}_0, \tag{5}$$

где $(1+a) = \sum S_j$ и S_j — решение (1) без выполнения (2).

Рассмотрим теперь вариант с $n+1$ составляющей и введем понятия, необходимые для установления его связи с предшествующим вариантом. Добавим для этого в систему с n составляющими еще одну составляющую, вектор свойства которой линейно независим от $\mathbf{G}_j$ ($j = 2,\ldots, n$). Условно присвоим ей и уже имеющейся составляющей с $j=1$ признаки (a) и (β), сохранив за обеими индекс 1. Совокупность n составляющих, характеризуемых векторами свойств $\mathbf{G}_{(\alpha)1}$, $\mathbf{G}_j$ ($j = 2,\ldots, n$), назовем α-совокупностью, с векторами $\mathbf{G}_{(\beta)1}$, $\mathbf{G}_j$ ($j = 2,\ldots, n$) — β-совокупностью. Далее значками (a) и (β) будем отличать любые величины, связанные с α- и β-совокупностями. Очевидно, по определению, $\mathbf{G}_{(\alpha)j} = \mathbf{G}_j$, если $j \geqslant 2$. Примем обозначения: $\mathbf{M}_{(\alpha)0} = \mathbf{M}_{(\alpha)}$; $\mathbf{M}_{(\beta)0} = \mathbf{M}_{(\beta)}$ для нормированных значений $\mathbf{M}$ после решения системы (1) с векторами α-(соответственно, β-)совокупности. Потребуем еще, чтобы в разложении

$$\mathbf{G}_{(\beta)1} = \rho_{(\alpha)1}\mathbf{G}_{(\alpha)1} + \sum_{j=2}^{n} \rho_{(\alpha)j}\mathbf{G}_j \tag{6}$$

сумма

$$\varkappa_{(\alpha)} = \rho_{(\alpha)1} + \sum_{j=2}^{n} \rho_{(\alpha)j} \neq 1. \tag{7}$$

Введем еще векторы свойства типа $\mathbf{A}^* = \{1, A_1, A_2, \ldots, A_n\}$. Тогда для совокупности $n+1$ составляющих

$$\mathbf{M}^* = \sum R_j^* \mathbf{G}_j^* \tag{8}$$

и такая система позволяет найти для R_j^* точные решения (при $R_j^* \geqslant 0$).

Базисы $\mathbf{G}_j$ и $\mathbf{G}_j^*$, скалярное произведение векторов, их длина и ортогональность по правилам $\mathbf{AB} = \sum A_j B_j$, $|\mathbf{A}| = \sqrt{\mathbf{A}^2}$; $\mathbf{AB} = 0$ полностью определяют соответствующие эвклидовы пространства. Естественный ортогональный нормированный базис в них — базис типа $\sigma_j = \{0, 0,\ldots, 1, \ldots, 0\}$ (1 на j-м месте). Обратные к базисным векторам $\mathbf{G}_j$ векторы обозначим ξ_j. Координаты векторов ξ_j — строки матрицы, $\|\xi_{ji}\|$, обратной к матрице $\|M_{ij}\|$.

Ниже связь между свойствами объектов выделенного класса и свойствами их составляющих устанавливается методами линейной алгебры.

1) S_j и R_j^* — координаты разложения вектора $\mathbf{M}$ (по (1)) или $\mathbf{M}^*$ (по (8)) по косоугольному базису ($\mathbf{G}_j$ или $\mathbf{G}_j^*$). Поэтому, например,

$$S_j = \mathbf{M}\xi_j. \tag{9}$$

Реализуемый вектор $\mathbf{M}_0$ получим по (5). R_j^* из (8) получаются аналогично, но уже нормированными. В нереализуемых случаях, когда $R_{j0} < 0$, если можно получить реализуемый небольшим изменением свойств составляющих, то следует изменять составляющие с $j \neq j_0$ («ближе»!).

Выделение из совокупности $n+1$ составляющих ($\mathbf{G}_j^*$ должны быть линейно независимыми, что эквивалентно условию (7)) α- и β-совокупностей назовем (a-, β)-разбиением. Это разбиение играет особую роль и используется ниже.

---

* Решения, удовлетворяющего (2) или (3), может не оказаться при решении задачи синтеза. В таком случае вектор $\mathbf{M}$ назовем нереализуемым (не выполняется (3)) или реализуемым с точностью до нормировки или подобия (не выполняется (2)).

2) Коэффициенты R_j^* из (8) получаются как

$$R_j^* = \alpha R_{(\alpha)j} + \beta R_{(\beta)j}, \quad R_{1(\alpha)}^* = \alpha R_{(\alpha)1}, \quad R_{1(\beta)}^* = \beta R_{(\beta)1}, \tag{10}$$

где α и β находятся из уравнений (деление $\mathbf{M}_{(\beta)} - \mathbf{M}_{(\alpha)}$ в отношени β/α)

$$\mathbf{M} = \alpha \mathbf{M}_{(\alpha)} + \beta \mathbf{M}_{(\beta)}, \tag{11}$$

$$\alpha + \beta = 1. \tag{12}$$

3) При известных $\mathbf{G}_{(\alpha)j}$, $\mathbf{G}_{(\beta)j}$ и $\|\xi_{ji}\|_{(\alpha)}$ можно определить, не зна $\|\xi_{ji}\|_{(\beta)}$, какой из векторов $\mathbf{M}_{(\alpha)}$ и $\mathbf{M}_{(\beta)}$ больше (оптимальный выбор со ставляющей). Именно, доказано, что

$$\gamma_{(\beta)} = 1 + (1 - \varkappa_{(\beta)}) \frac{R_{(\beta)1}}{\rho_{(\beta)1}} = \frac{|\mathbf{M}_{(\beta)}|}{|\mathbf{M}_{(\alpha)}|}, \quad \gamma_{(\alpha)} = 1 + (1 - \varkappa_{(\alpha)}) \frac{R_{(\alpha)1}}{\rho_{(\alpha)1}} = \frac{|\mathbf{M}_{(\alpha)}|}{|\mathbf{M}_{(\beta)}|} \tag{13}$$

Отсюда следует, что достаточно формально вычислить значения $\gamma_{(\alpha)}$ и $\gamma_{(\beta)}$, и то из них, которое больше, определяет составляющую с большим вкладом.

4) При условиях п. 3 можно найти

$$R_{(\beta)j} = (\rho_{(\alpha)1} R_{(\alpha)j} - \rho_{(\alpha)j} R_{(\alpha)1}) / (\rho_{(\alpha)1} + (1 - \varkappa_{(\alpha)}) R_{(\alpha)1}). \tag{14}$$

5) Доказаны теоремы: 1) *для реализации* $\mathbf{M}$ *необходимо, чтобы в представлении* (11) *при* $\alpha > 0$, $\beta > 0$ *в представлении типа* (6) *векторов* $\mathbf{G}_{(\beta)1}$ *и* $\mathbf{G}_{(\alpha)1}$ *были* $\rho_{(\alpha)1} > 0$, $\rho_{(\beta)1} > 0$, *а остальные* $\rho_{(\alpha)j}$ *и* $\rho_{(\beta)j}$ *противоположных знаков; при* α *и* β *различных знаков необходимо, чтобы* $\rho_{(\alpha)1} < 0$, $\rho_{(\beta)1} < 0$, *а остальные* $\rho_{(\alpha)j}$ *и* $\rho_{(\beta)j}$ *одинаковых знаков;* 2) *В совокупности* $n+1$ *составляющих с линейно независимыми* $\mathbf{G}_j^*$ *существует не более двух совокупностей из* n *векторов* $\mathbf{G}_j$, *реализующих* $\mathbf{M}$ *с точностью до подобия* ($\mathbf{M}_{(\alpha)}$ *и* $\mathbf{M}_{(\beta)}$), *и все возможные реализуемые по* (11) $\mathbf{M}$ *определяются неравенством* $|\mathbf{M}_{(\alpha)}| \leqslant |\mathbf{M}| \leqslant |\mathbf{M}_{(\beta)}|$.

6) С помощью теорем п. 5) и п. 3) в совокупности $n+1$ составляющих можно определить все сочетания из n составляющих, дающие реализуемый с точностью до подобия вектор $\mathbf{M}$. Для этого достаточно вычислить матрицу $\|\xi_{ji}\|$ только одной из совокупностей.

7) Следующие выводы используют геометрические представления.

Введем векторы $\mathbf{M}_i = \{M_{ij}\}$, $\boldsymbol{\sigma} = \{1, 1, \ldots, 1\}$ и переменные векторы $\mathbf{X} = \{X_j\}$ и $\mathbf{X}^{(i)} = \{X_j^{(i)}\}$, $\mathbf{X}^{(n+1)} = \{X_j^{(n+1)}\}$. Тогда уравнения

$$\mathbf{M}_i \mathbf{X}^{(i)} = M_i \quad \text{и} \quad \boldsymbol{\sigma} \mathbf{X}^{(n+1)} = 1 \tag{15}$$

в случае их несовместности представляют плоскости граней n-мерного симплекса (ср. с (1)) *. Последнюю плоскость назовем плоскостью нормировки. Введем еще взаимно однозначное преобразование пространств

$$\mathbf{X} = \sum X_j \boldsymbol{\sigma}_j \rightarrow \mathbf{Z} = \sum X_j \mathbf{G}_j. \tag{16}$$

Оно обладает свойством $\mathbf{X}\mathbf{M}_i = \mathbf{Z}\boldsymbol{\sigma}_i$ и переводит n граней симплекса пространства $\mathbf{X}$ в грани симплекса пространства $\mathbf{Z}$, нормальные к $\boldsymbol{\sigma}_i$, а нормировочную грань в положение, определяемое концами векторов $\mathbf{G}_j$.

Когда исходная система уравнений материала с n составляющими несовместна, решение основной задачи — нахождение коэффициентов R_j — возможно приближенно, если допустить уклонения μ_i от заданных M_i при дополнительном условии а) $\min \max |\mu_i|$ или б) $\max \alpha$ при заданном $\max |\mu_i| = \mu$.

* При условии, что все определители n-го порядка однородной системы, полученной из системы (1) — (2), отличны от нуля.

Введем векторы $\mu = \{\mu_i\}$ и $\mathbf{N} = \mathbf{M} + \mu$. Будем искать μ так, чтобы система (1) после замены $\mathbf{M}$ на $\mathbf{N}$ стала совместной. После замены

$$\mathbf{N} = \sum R_j \mathbf{G}_j. \tag{17}$$

Доказано, что в пространстве $\mathbf{Z}$ решение будет давать точка $\mathbf{N}$ нормировочной плоскости, внутренняя по отношению к остальным граням и равноудаленная от них. Следовательно, $\mu_i = \mu \operatorname{sign}(\mu_i)$. Доказано, что

$$\operatorname{sign}(\mu_i) = \operatorname{sign}\left(-\alpha \Big/ \sum \xi_{ji}\right), \tag{18}$$

μ становится $(n+1)$-м неизвестным. Искомая связь между μ и α и расчет R_j очевидны из формул

$$R_j = \mathbf{N}\xi_j = \mathbf{M}\xi_j + \mu\xi_j = S_j + \varepsilon_j, \tag{19}$$

$$\varepsilon_j = \mu\xi_j, \quad \varepsilon_j = \mu\lambda_j, \quad \sum \varepsilon_j = -\alpha = \mu \sum \lambda_j, \tag{20}$$

где $\quad \lambda_j = \sum\limits_i \xi_{ji} (\operatorname{sign} \mu_i)$.

Разумеется, значения α и μ ограничены областью $R_j \geqslant 0$.

Результаты работы могут быть использованы для анализа и синтеза неоднородных материалов и сплавов, в частности, для термического физико-химического анализа и анализа по данным исследования кинетики, для синтеза многослойных и порошковых материалов.

Автор выражает благодарность В. Т. Борисову за критическое обсуждение работы и полезные замечания.

Институт прецизионных сплавов
Центрального научно-исследовательского
института черной металлургии
им. И. П. Бардина
Москва

Поступило
11 VIII 1971

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] В. И. Левин, Усп. хим., **17**, 2, 174 (1948). [2] И. Г. Гутовский, Сборн. Прецизионные сплавы, М., 1968, стр. 64.