应用数学和力学, 第 22 卷 第 8 期(2001 年 8 月)
Applied Mathematics and Mechanics

应用数学和力学编委会编
重 庆 出 版 社 出 版

文章编号: 1000_0887(2001) 08_0773_17

非均匀材料细观结构的定向分布函数(Ⅰ) ——定向分布函数和不可约张量*

郑泉水, 邹文楠

(清华大学 工程力学系, 北京 100084)

(我刊编委郑泉水来稿)

摘要: 在最近研究非均匀材料的物理和力学性质的各种基于细观力学的方法中, 定向分布函数(ODF) 和晶体定向分布函数(CODF) 的概念起着重要的作用, 它们分别定义在单位球面和旋转群上• 本文通过两部分的内容, 用具有不可约张量系数的傅立叶展开对它们分别作了深入的研究• 群表示理论指出平方可积的定向分布函数可以展开为球谐函数的绝对收敛的傅立叶级数, 而其中的球谐函数又能进一步用不可约张量表示• 这样一些不可约张量系数的基本重要性在于它们刻划了材料组元和缺陷的体积、形状、相、位置的宏观或全局影响• 第(Ⅰ) 部分对定义在 N 维单位球上的定向分布函数的不可约张量 Fourier 展开的一般性质进行了研究, 其中重点是构造二维和三维不可约张量的简单表示, 以便于得到它们在各种点群(完全正交群的子群) 对称性的约束形式; 第(Ⅱ) 部分给出了晶体定向分布函数的不可约张量展开的显式表示, 并且给出了不可约张量以及定向分布函数和晶体定向分布函数不可约张量展开在各种点群下的约束形式•

关 键 词: 定向分布函数; 不可约张量; 张量傅立叶展开; 非均匀材料; 细观结构
中图分类号: O331 文献标识码: A

引 言

自然或人造材料通常是细观非均匀且具有一定细观结构的, 这些细观结构由材料组元如晶体、位错、相变、微裂纹、孔洞、纤维、夹杂等组成• 材料的许多力学和物理性质就取决于描述材料组元的体积、形状、相、和位置的定向分布函数(ODF) 和晶体定向分布函数(CODF) [1~17]• 特别地, 当材料经历非弹性变形或受热时, 相应的如 ODF 或 CODF 这些可观察到的函数构成了描述材料内部细观结构不可逆演化的可测特征•

在研究非均匀材料的物理和力学性质的各种细观力学的方法中, 定向分布函数(ODF) 和晶体定向分布函数(CODF) 的概念起着重要的作用, 为描述材料非弹性行为的内变量理论提供了基础[18]• 比如, 简单材料的当前柯西应力 $\boldsymbol{T}(t)$ 依赖于变形梯度 $\boldsymbol{F}$ 的历史 $\boldsymbol{F}_t$• 其表示形式为一个泛函[19, 20]: $\boldsymbol{T}(t) = \mathscr{G}\left\{\boldsymbol{F}_t\right\}$• 假设表示细观结构演化的定向分布函数和/或晶体定向分布函数 $\Phi(t)$, …, $\Psi(t)$ 能反映变形历史 $\boldsymbol{F}_t$ 的影响, 则本构方程和演化方程可以分别表示成

* 收稿日期: 2000_10_09; 修订日期: 2001_03_20
基金项目: 国家自然科学基金资助项目(19525207, 19891180) ; 霍英东教育基金会资助项目
作者简介: 郑泉水(1961—) , 男, 江西人, 教授, 博士, 教育部长江特聘教授.

$$\boldsymbol{T}(t) = \mathscr{G}\left\{\boldsymbol{F}(t), \Phi(t), \cdots, \Psi(t)\right\}, \tag{1a}$$

$$\dot{\Phi}(t) = \mathscr{M}\left\{\boldsymbol{F}(t), \Phi(t), \cdots, \Psi(t)\right\}, \quad \cdots, \quad \dot{\Psi}(t) = \mathscr{N}\left\{\boldsymbol{F}(t), \Phi(t), \cdots, \Psi(t)\right\}, \tag{1b}$$

其中上置一点‘·’表示对时间的偏导数, $\mathscr{G}$是二阶张量值泛函, $\mathscr{M}, \cdots, \mathscr{N}$是标量值泛函·

由 $\Phi, \cdots, \Psi$的不可约张量傅立叶展开的收敛性, 对任意要求的精度总可以取 $\Phi, \cdots, \Psi$的傅立叶展开的一些主项系数 $\boldsymbol{S}_1, \cdots, \boldsymbol{S}_n$ 来作近似, 这样若把这些不可约张量系数看作内变量, 本构方程和演化方程就转化成如下的张量函数表示[5~7, 10]:

$$\boldsymbol{T} = \Psi(\boldsymbol{F}, \boldsymbol{S}_1, \cdots, \boldsymbol{S}_n), \tag{2a}$$

$$\overset{\circ}{\boldsymbol{S}}_i = \Xi_i(\boldsymbol{F}, \boldsymbol{S}_1, \cdots, \boldsymbol{S}_n) \quad (i = 1, 2, \cdots, n), \tag{2b}$$

其中‘°’表示客观导数· 较之(1)的泛函表示, 上述张量函数表示在内变量框架下特别是弹塑性和损伤理论中被广泛地接受·

数学上, N 维(N_D) 欧几里德空间的ODF 和CODF 是分别定义在N_D 单位球面和N_D 旋转群上的标量函数· 记单位球上的典型面元为 d$\boldsymbol{n}$, 例如, 对平面极坐标原点处的单位圆(二维球面), 有 $\boldsymbol{n} = (\cos\varphi, \sin\varphi)$ 和 d$\boldsymbol{n}$ = dφ, 其中 $0 \leqslant \varphi < 2\pi$; 对三维球坐标原点处的单位球面, 有 $\boldsymbol{n} = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$ 和 d$\boldsymbol{n}$ = $\sin\theta\,\mathrm{d}\varphi\,\mathrm{d}\theta$, 其中 $0 \leqslant \varphi < 2\pi$, $0 \leqslant \theta \leqslant \pi$· 在单位球面上的积分记作$\oint(*)\,\mathrm{d}\boldsymbol{n}$·

ODF 的物理实例很多· 比如, 对平面半晶聚合物, 用 $\Phi(\boldsymbol{n})\,\mathrm{d}\varphi$表示晶链轴位于方向$\boldsymbol{n}$或角度 φ处无穷小范围dφ内的概率, 由此即定义了一个ODF· 对短纤维强化的复合材料、或具有币状微裂纹损伤的各向同性基体、或球形夹杂强化和球形孔洞弱化的各向同性基体等等, 均可作类似的 ODF 定义· 这些例子的共性是单晶链、微裂纹、夹杂和孔洞的几何形状都是轴对称的· 对三维多晶材料, 其单晶对称性可以是32 类晶相群[21] 中的任意一种, 而单晶一概都不是轴对称的· 一般地说, 多晶中一个典型单晶相对于给定的参考晶体的定向可以用旋转张量 $\boldsymbol{R}$表示, 具有该定向的晶体的体积分数就可作用为 CODF 的定义, 记为 $\Phi(\boldsymbol{R})$·

任意对称无迹张量 $\boldsymbol{T} = (T_{\alpha\beta\gamma\cdots\delta})$ 简称为不可约张量, 即满足关系

$$T_{\alpha\beta\gamma\cdots\delta} = T_{\beta\alpha\gamma\cdots\delta} = T_{\gamma\beta\alpha\cdots\delta} = \cdots = T_{\delta\beta\gamma\cdots\alpha}, \tag{3a}$$

$$T_{\eta\eta\gamma\cdots\delta} = 0, \tag{3b}$$

其中$\{x_\alpha\}$是N_D 笛卡儿坐标系· 希腊字母下标的取值范围为1 到N, 对重复的希腊字母指标(不包括拉丁字母指标) 采用 Einstein 求和约定·

对ODF 的研究及其有趣的应用, 可追溯到 Tamuz 和 Lagzdyn' sh[1~3] 的工作· 不少作者研究了 ODF 的不可约张量傅立叶展开, 并在力学、物理学和地质学等的诸多问题中得到应用·我们特别指出文献[8~10] 的关于二维和三维 ODF 的工作, 其中包含不可约张量系数主项(即前几项) 的计算· 然而, 针对这些主项不可约张量系数的基于细观力学的演化方程通常都是不自洽的, 例如在最近一项涉及平面半晶聚合物晶链的 ODF 不可约张量傅立叶展开的工作[16] 中, 通过细观力学研究得到不可约张量系数 $\boldsymbol{a}_{2m}$ $(m = 1, 2, \cdots)$ 的时间导数是 $\boldsymbol{a}_{2m}$ 和它的相邻项$\boldsymbol{a}_{2m-2}$和 $\boldsymbol{a}_{2m+2}$ 的函数, 这样即使目的是求解主项张量系数, 也不得不引入一些假设才可得到近似解[9, 10], 或者必须解出所有的张量系数· Zheng 和 Collins[17] 指出, 针对某个具体特定物理性质(如弹性、压电性、非线性弹性等) 而言, 固体中损伤(如微裂纹、各种形状的孔洞) 的影响完全由损伤 ODF 的不可约张量傅立叶展开的某些主项特征决定· 但这些具有物理关联的损

伤张量的演化, 则一般依赖于更高阶的损伤张量•

以上例子可以解释为什么有时候必须求解ODF 傅立叶展开的所有不可约张量系数, 而不仅仅是一些主项系数• 于是不可约张量系数的显式公式, 以及它们在材料的宏观和微观对称性下的约束形式都是需要的• 本文给出了这种显式公式, 包括二维 ODF 和 CODF(第 1 节)、三维ODF(第 2 节) 和三维CODF(第(Ⅱ) 部分第 1 节)• 在第(Ⅱ) 部分还导出了它们在各种点群对称性下的约束形式, 得到这些结果的关键在于构造任意阶不可约张量的简单表示• 在第 3 节还推导了一些N 维 ODF 的不可约张量傅立叶展开的一般性质, 它们将在第(Ⅱ) 部分得到应用• 此外, 在第 4 节还得到了 m 阶完全对称张量的不可约分解, 它对应于一个唯一的 m 阶齐次多项式形式的 ODF 及其不可约张量傅立叶展开•

作为本文得到的二维和三维ODF 的不可约张量展开的约束形式的应用, 文[16] 和[22] 分别求得了在晶体聚合物平面和空间塑性大变形下反映晶链和织构演化的 ODF 的封闭解•

最后, 本文(包括第(Ⅰ) 和第(Ⅱ) 部分) 采用的主要记号归纳如下:

$\boldsymbol{e}_\alpha$ = 笛卡儿坐标系中沿 x_α_坐标的方向矢;

$\mathbf{1}$ = $\boldsymbol{e}_\alpha \otimes \boldsymbol{e}_\alpha = \delta_{\alpha\beta}\boldsymbol{e}_\alpha \otimes \boldsymbol{e}_\beta$ 为二阶单位张量, 其中 $\delta_{\alpha\beta}$ 是 Kronecker 符号;

$\boldsymbol{n}, \boldsymbol{R}$ = 分别是单位矢量和旋转张量;

$\mathscr{Z}^+$ = 所有正整数的集合;

$\mathscr{T}_m^N$ = 所有 N 维m 阶不可约张量的线性空间;

$\mathscr{T}_m^N(\mathscr{G})$ = $\mathscr{G}$_群下不变的所有N 维m 阶不可约张量的线性空间;

$\ulcorner \boldsymbol{T} \lrcorner$ = 张量 $\boldsymbol{T}$ 的不可约部分;

$\boldsymbol{T}^{\otimes m}$ = 由 $\boldsymbol{T}^{\otimes 1} = \boldsymbol{T}, \boldsymbol{T}^{\otimes m+1} = \boldsymbol{T}^{\otimes m} \otimes \boldsymbol{T}$ 定义的m 重张量积;

$\boldsymbol{W}_m$ = $\omega^{\otimes m} = \boldsymbol{P}_m + \mathrm{i}\boldsymbol{Q}_m$, 其中 $\omega = \boldsymbol{e}_1 + \mathrm{i}\boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{P}_m = \mathrm{Re}\,\boldsymbol{W}_m$, $\boldsymbol{Q}_m = \mathrm{Im}\,\boldsymbol{W}_m$;

$\boldsymbol{G}_m(x)$ = $(2\boldsymbol{k} + x\,\omega - x^{-1}\omega)^{\otimes m} = \boldsymbol{P}_{m,0} + \sum_{r=1}^{m}[x^r \boldsymbol{W}_{m,r} + (-1)^r x^{-r}\boldsymbol{W}_{m,r}]$, 其中 $\boldsymbol{k} = \boldsymbol{e}_3$;

$\boldsymbol{W}_{m,r}$ = $\boldsymbol{P}_{m,r} + \mathrm{i}\boldsymbol{Q}_{m,r}$, 其中 $\boldsymbol{P}_{m,r} = \mathrm{Re}\,\boldsymbol{W}_{m,r}$, $\boldsymbol{Q}_{m,r} = \mathrm{Im}\,\boldsymbol{W}_{m,r}$;

$P_{m,0}, P_{m,r}$ = 勒让德函数和连带勒让德函数;

$\boldsymbol{S}^{\times m}$ = 任何偶数阶张量 $\boldsymbol{S}$ 的m 重 Kronecker 积;

$\boldsymbol{M}_m$ = m 阶矩张量; $\oint \Phi(\boldsymbol{n})\ulcorner \boldsymbol{n}^{\otimes m}\lrcorner\,\mathrm{d}\boldsymbol{n}$ 或$\oint \Phi(\boldsymbol{R})\ulcorner \boldsymbol{R}^{\times m}\lrcorner\,\mathrm{d}\boldsymbol{R}$•

记号 $\langle \boldsymbol{T} \rangle$ 表示张量 $\boldsymbol{T}$ 的完全对称化, 即张量 $\boldsymbol{T}$ 的所有可能不同的置换的和, 例如:

$$\langle \mathbf{1}^{\otimes 2} \rangle = \boldsymbol{e}_\alpha \otimes \boldsymbol{e}_\alpha \otimes \boldsymbol{e}_\beta \otimes \boldsymbol{e}_\beta + \boldsymbol{e}_\alpha \otimes \boldsymbol{e}_\beta \otimes \boldsymbol{e}_\alpha \otimes \boldsymbol{e}_\beta + \boldsymbol{e}_\alpha \otimes \boldsymbol{e}_\beta \otimes \boldsymbol{e}_\beta \otimes \boldsymbol{e}_\alpha, \tag{4a}$$

或

$$\langle \delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} \rangle = \delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}, \tag{4b}$$

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{1} \otimes \boldsymbol{x} \otimes \boldsymbol{x} \rangle_{\alpha\beta\gamma\delta} = {} & \delta_{\alpha\beta} x_\gamma x_\delta + \delta_{\alpha\gamma} x_\beta x_\delta + \delta_{\alpha\delta} x_\beta x_\gamma + \\ & \delta_{\beta\gamma} x_\alpha x_\delta + \delta_{\beta\delta} x_\alpha x_\gamma + \delta_{\gamma\delta} x_\alpha x_\beta;\end{aligned} \tag{5}$$

设 $\boldsymbol{T}$ 为m 阶张量、$\boldsymbol{L}$ 为更高阶张量, 完全缩并 $\boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{T}$ 定义为$(\boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{T})_{\alpha\ldots\beta} = L_{\alpha\ldots\beta\gamma\ldots\delta} T_{\gamma\ldots\delta}$• 特别地, 当 $\boldsymbol{L}$ 是 $2m$ 阶张量时, 用简写 $\boldsymbol{LT}$ 代替$\boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{T}$, 这时 $\boldsymbol{L}$ 被看作是m 阶张量空间的一个线性变换• 两个 m 阶张量$\boldsymbol{T}$ 和$\boldsymbol{S}$ 的内积记作$\boldsymbol{T} \cdot \boldsymbol{S}$, 张量 $\boldsymbol{T}$ 的模记作 $|\boldsymbol{T}| = (\boldsymbol{T} \cdot \boldsymbol{T})^{1/2}$•

1 二维 ODF 和 CODF 的不可约张量傅立叶展开

1.1 基本不可约张量

本小节力图把不可约张量表示成一种统一和简单的形式,且其结构有助于实现各种点群对称性约束。不可约张量的定义式(3)表明任何二维 m 阶不可约张量 $\boldsymbol{T}$ 最多具有两个独立分量,比如 $T_{11\cdots1}$ 和 $T_{21\cdots1}$。换句话说,所有二维 m 阶($m\geqslant1$)不可约张量的线性空间 $\mathscr{T}_m^2$ 的维数是2。

设 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 是两个单位正交矢量,$\mathrm{i}=\sqrt{-1}$ 是单位虚数,引入复矢量 $\omega=\boldsymbol{e}_1+\mathrm{i}\boldsymbol{e}_2$,并记完全对称复张量 $\omega^{\otimes m}$ 为 $\boldsymbol{W}_m$,$\boldsymbol{W}_m$ 的实部和虚部分别记为 $\boldsymbol{P}_m$ 和 $\boldsymbol{Q}_m$,即

$$\boldsymbol{W}_m=\omega^{\otimes m}=\boldsymbol{P}_m+\mathrm{i}\boldsymbol{Q}_m, \tag{6a}$$

其中

$$\boldsymbol{P}_m=\mathrm{Re}\,\boldsymbol{W}_m=(\boldsymbol{W}_m+\overline{\boldsymbol{W}}_m)/2,\quad \boldsymbol{Q}_m=\mathrm{Im}\,\boldsymbol{W}_m=(\boldsymbol{W}_m-\overline{\boldsymbol{W}}_m)/2\mathrm{i}. \tag{6b}$$

本文中用上划线表示复共轭。容易证明,可以用完全对称算符把 $\boldsymbol{P}_m$ 和 $\boldsymbol{Q}_m$ 表示成紧凑形式:

$$\boldsymbol{P}_m=\boldsymbol{e}_1^{\otimes m}-\langle\boldsymbol{e}_1^{\otimes m-2}\otimes\boldsymbol{e}_2^{\otimes 2}\rangle+\cdots=\sum_{r=0}^{[m/2]}(-1)^r\langle\boldsymbol{e}_1^{\otimes m-2r}\otimes\boldsymbol{e}_2^{\otimes 2r}\rangle, \tag{7a}$$

$$\boldsymbol{Q}_m=\langle\boldsymbol{e}_1^{\otimes m-1}\otimes\boldsymbol{e}_2\rangle-\langle\boldsymbol{e}_1^{\otimes m-3}\otimes\boldsymbol{e}_2^{\otimes 3}\rangle+\cdots=\sum_{r=0}^{[(m-1)/2]}(-1)^r\langle\boldsymbol{e}_1^{\otimes m-2r-1}\otimes\boldsymbol{e}_2^{\otimes 2r+1}\rangle, \tag{7b}$$

其中 $[m/2]$ 是 $m/2$ 的整数部分。例如:

$$\left.\begin{aligned}
&\boldsymbol{P}_2=\boldsymbol{e}_1\otimes\boldsymbol{e}_1-\boldsymbol{e}_2\otimes\boldsymbol{e}_2,\quad \boldsymbol{Q}_2=\boldsymbol{e}_1\otimes\boldsymbol{e}_2+\boldsymbol{e}_2\otimes\boldsymbol{e}_1,\\
&\boldsymbol{P}_4=\boldsymbol{P}_2\otimes\boldsymbol{P}_2-\boldsymbol{Q}_2\otimes\boldsymbol{Q}_2,\quad \boldsymbol{Q}_4=\boldsymbol{P}_2\otimes\boldsymbol{Q}_2+\boldsymbol{Q}_2\otimes\boldsymbol{P}_2,\\
&\boldsymbol{P}_3=\boldsymbol{e}_1\otimes\boldsymbol{e}_1\otimes\boldsymbol{e}_1-(\boldsymbol{e}_1\otimes\boldsymbol{e}_2\otimes\boldsymbol{e}_2+\boldsymbol{e}_2\otimes\boldsymbol{e}_1\otimes\boldsymbol{e}_2+\boldsymbol{e}_2\otimes\boldsymbol{e}_2\otimes\boldsymbol{e}_1),\\
&\boldsymbol{Q}_3=(\boldsymbol{e}_1\otimes\boldsymbol{e}_1\otimes\boldsymbol{e}_2+\boldsymbol{e}_1\otimes\boldsymbol{e}_2\otimes\boldsymbol{e}_1+\boldsymbol{e}_2\otimes\boldsymbol{e}_1\otimes\boldsymbol{e}_1)-\boldsymbol{e}_2\otimes\boldsymbol{e}_2\otimes\boldsymbol{e}_2.
\end{aligned}\right\} \tag{8}$$

张量 $\boldsymbol{P}_m$ 在刻划二维和三维各向异性时起着关键的作用[23~26]。

利用关系式 $\omega\cdot\omega=0$ 和 $\omega\cdot\overline{\omega}=2$,张量 $\boldsymbol{W}_m$ 以及 $\boldsymbol{P}_m$ 和 $\boldsymbol{Q}_m$ 的不可约性是显然的,它们还有如下的正交关系:

$$\boldsymbol{W}_m\cdot\boldsymbol{W}_m=(\omega\cdot\omega)^m=(\boldsymbol{P}_m\cdot\boldsymbol{P}_m-\boldsymbol{Q}_m\cdot\boldsymbol{Q}_m)+2\mathrm{i}\boldsymbol{P}_m\cdot\boldsymbol{Q}_m=0, \tag{9a}$$

$$\boldsymbol{W}_m\cdot\overline{\boldsymbol{W}}_m=(\omega\cdot\overline{\omega})^m=\boldsymbol{P}_m\cdot\boldsymbol{P}_m+\boldsymbol{Q}_m\cdot\boldsymbol{Q}_m=2^m. \tag{9b}$$

整理得:

$$\boldsymbol{P}_m\cdot\boldsymbol{P}_m=\boldsymbol{Q}_m\cdot\boldsymbol{Q}_m=2^{m-1},\quad \boldsymbol{P}_m\cdot\boldsymbol{Q}_m=0. \tag{10}$$

可见,$\boldsymbol{P}_m$ 和 $\boldsymbol{Q}_m$ 构成了 m 阶不可约张量空间 $\mathscr{T}_m^2$ 的一个正交基。

从(10)还可以得到 $\mathscr{T}_m^2$ 的恒等变换张量 $\boldsymbol{I}_m$ 的表示:

$$\boldsymbol{I}_m=2^{1-m}(\boldsymbol{P}_m\otimes\boldsymbol{P}_m+\boldsymbol{Q}_m\otimes\boldsymbol{Q}_m)=2^{1-m}\mathrm{Re}(\boldsymbol{W}_m\otimes\overline{\boldsymbol{W}}_m). \tag{11}$$

由于 $\boldsymbol{I}_m$ 同时也是所有二维 m 阶张量在子空间 $\mathscr{T}_m^2$ 上的投影算子,故任意 m 阶张量 $\boldsymbol{A}$ 的不可约部分 $\ulcorner\boldsymbol{A}\lrcorner$ 可以写成

$$\ulcorner\boldsymbol{A}\lrcorner=\boldsymbol{I}_m\boldsymbol{A}=2^{1-m}\mathrm{Re}[(\boldsymbol{A}\cdot\overline{\boldsymbol{W}}_m)\boldsymbol{W}_m]. \tag{12}$$

1.2 傅立叶展开

众所周知[27],任何平面单位圆上的平方可积函数 $\Phi\left(\text{即满足}\int_0^{2\pi}|\Phi(\varphi)|^2\mathrm{d}\varphi<\infty\right)$ 可以展开成如下形式的绝对收敛的傅立叶级数:

$$\Phi(\varphi)=\Phi_0+\sum_{m=1}^{\infty}(a_m\cos m\varphi+b_m\sin m\varphi)=\Phi_0+\mathrm{Re}\sum_{m=1}^{\infty}(a_m-\mathrm{i}b_m)\exp(\mathrm{i}m\varphi), \tag{13a}$$

其中

$$\Phi_0 = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\Phi(\varphi)\,\mathrm{d}\varphi,\quad a_m - \mathrm{i}b_m = \frac{1}{\pi}\int_0^{2\pi}\Phi(\varphi)\exp(-\mathrm{i}m\varphi)\,\mathrm{d}\varphi. \tag{13b}$$

若记 φ 为 $\boldsymbol{n}$ 相对 $\boldsymbol{e}_1$ 的方向角,即 $\boldsymbol{n} = \boldsymbol{n}(\varphi) = \cos\varphi\,\boldsymbol{e}_1 + \sin\varphi\,\boldsymbol{e}_2$, (13) 式就称为 $\Phi(\boldsymbol{n})$ 的常规傅立叶展开. 易见

$$\boldsymbol{W}_m\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes m} = (\omega\cdot\boldsymbol{n})^m = \exp(\mathrm{i}m\varphi). \tag{14}$$

将(14)式代入(12)式得到

$$2^{m-1}\ulcorner\boldsymbol{n}^{\otimes m}\lrcorner = \mathrm{Re}[\exp(-\mathrm{i}m\varphi)\boldsymbol{W}_m] = \cos m\varphi\,\boldsymbol{P}_m + \sin m\varphi\,\boldsymbol{Q}_m. \tag{15}$$

将(14)式代入(13a)式并注意到(13b)和(15)两式,有 $\Phi(\boldsymbol{n})$ 的张量傅立叶展开:

$$\Phi(\boldsymbol{n}) = \Phi_0 + \sum_{m=1}^{\infty}\boldsymbol{a}_m\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes m} = \Phi_0 + \frac{1}{2\pi}\sum_{m=1}^{\infty}2^m\boldsymbol{M}_m\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes m}, \tag{16}$$

其中

$$\boldsymbol{a}_m = a_m\boldsymbol{P}_m + b_m\boldsymbol{Q}_m = \mathrm{Re}[(a_m - \mathrm{i}b_m)\boldsymbol{W}_m] =$$
$$\frac{1}{\pi}\mathrm{Re}\left\{\left[\int_0^{2\pi}\Phi(\varphi)\exp(-\mathrm{i}m\varphi)\,\mathrm{d}\varphi\right]\boldsymbol{W}_m\right\} = \frac{2^m}{2\pi}\boldsymbol{M}_m, \tag{17a}$$

m 阶不可约张量

$$\boldsymbol{M}_m = \oint\Phi(\boldsymbol{n})\ulcorner\boldsymbol{n}^{\otimes m}\lrcorner\,\mathrm{d}\boldsymbol{n} \tag{17b}$$

称为 m 阶矩张量[9].

尽管常规傅立叶展开(13)中的系数 a_m 和 b_m 可以用作内变量参数,它们却不是标量,而是(17)表示的张量系数. 已经证明张量形式的本构和演化方程对于描述材料的复杂不可逆力学行为是必要的,这也是需要建立 ODF 的张量傅立叶展开的原因之一;其它理由包括张量傅立叶展开便于处理材料的对称性约束,这些将在本文的第(Ⅱ)部分进行深入研究.

1.3 中心对称和正交 ODF

为了表明张量傅立叶展开(16)便于得到点群对称性下的约束形式,这里列出两个简单例子,考虑各种点群对称性的完整研究将在第(Ⅱ)部分完成.

若 $\Phi(-\boldsymbol{n}) = \Phi(\boldsymbol{n})$,则称 $\Phi(\boldsymbol{n})$ 是中心对称的. 由(16)可得对任意奇整数 m 都有 $\boldsymbol{a}_m = \boldsymbol{0}$,从而中心对称的 ODF $\Phi(\boldsymbol{n})$ 具有张量傅立叶展开:

$$\Phi(\boldsymbol{n}) = \Phi_0 + \sum_{l=1}^{\infty}\boldsymbol{a}_{2l}\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 2l} = \frac{1}{2\pi}\sum_{l=0}^{\infty}4^l\boldsymbol{M}_{2l}\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 2l}. \tag{18}$$

若存在两个正交方向 $\boldsymbol{e}_1$、$\boldsymbol{e}_2$,使得 $\Phi(\boldsymbol{n})$ 在关于 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 的反映下不变,即有 $\Phi(n_1, n_2) = \Phi(-n_1, n_2) = \Phi(n_1, -n_2)$,就称 ODF $\Phi(\boldsymbol{n})$ 是正交的,这里 n_α 为 $\boldsymbol{n}$ 相对 $\{\boldsymbol{e}_\alpha\}$ 的分量. 这要求对所有的张量系数 $\boldsymbol{a}_m(m\in\mathscr{Z}^+)$ 关于 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 的反射下不变. 从(7b)式知道 $\boldsymbol{Q}_m$ 在关于 $\boldsymbol{e}_2$ 的反射下改变符号,当 $m\in\mathscr{Z}^+$ 为奇数时 $\boldsymbol{P}_m$ 在关于 $\boldsymbol{e}_1$ 的反射下改变符号,只有当 $m\in\mathscr{Z}^+$ 为偶数时 $\boldsymbol{P}_m$ 在上述两个反射下都不变. 因此,正交 $\Phi(\boldsymbol{n})$ 的张量傅立叶展开具有如下约束形式

$$\Phi(\boldsymbol{n}) = \Phi_0 + \sum_{l=1}^{\infty}a_{2l}\boldsymbol{P}_{2l}\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 2l}. \tag{19}$$

基于这些约束形式,文[16]得到了在晶体聚合物平面塑性大变形下反映织构演化的 ODF 的封闭解.

1.4 二维情况下 ODF 和 CODF 的对应

不难证明,二维情况下旋转张量等价于一个单位矢量. 事实上,给定一个单位矢量 $\boldsymbol{n}_0$,则

任何单位矢量 $\boldsymbol{n}$ 可以通过 $\boldsymbol{n}_0$ 旋转一个角度 φ 得到. 记 $\boldsymbol{R}(\varphi)$ 为旋转角度 φ 的旋转张量, 即有 $\boldsymbol{n} = \boldsymbol{R}\boldsymbol{n}_0$ 和 $\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{n}_0 = \cos\varphi$, 从而有张量表示[17]

$$\boldsymbol{R} = (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{n}_0)\boldsymbol{1} + (\boldsymbol{n}\otimes\boldsymbol{n}_0 - \boldsymbol{n}_0\otimes\boldsymbol{n}). \tag{20}$$

因此, 任何二维 CODF 等价于一个二维 ODF, 这样前面得到的关于二维 ODF 的张量傅立叶展开的所有结果同样适用于二维 CODF 的张量傅立叶展开.

1.5　$\ulcorner\boldsymbol{n}^{\otimes m}\lrcorner$ 的两个有用的等价表示

(16) 式表明 $\boldsymbol{n}$ 的张量积的对称无迹部分 $\ulcorner\boldsymbol{n}^{\otimes m}\lrcorner$ 是表示矩张量的关键, 有必要在这里对 $\ulcorner\boldsymbol{n}^{\otimes m}\lrcorner$ 作进一步的澄清.

利用旋转基 $\{\boldsymbol{e}_{1\varphi}, \boldsymbol{e}_{2\varphi}\}$:

$$\boldsymbol{e}_{1\varphi} = \boldsymbol{n} = \cos\varphi\,\boldsymbol{e}_1 + \sin\varphi\,\boldsymbol{e}_2,\quad \boldsymbol{e}_{2\varphi} = -\sin\varphi\,\boldsymbol{e}_1 + \cos\varphi\,\boldsymbol{e}_2,$$

并类似地引入 $\omega_\varphi = \boldsymbol{e}_{1\varphi} + \mathrm{i}\boldsymbol{e}_{2\varphi}$ 和 $\boldsymbol{W}_{\varphi m} = \omega_\varphi^{\otimes m} = \boldsymbol{P}_{\varphi m} + \mathrm{i}\boldsymbol{Q}_{\varphi m}$, 由 $\omega_\varphi = \exp(-\mathrm{i}\varphi)\,\omega$ 得到

$$\boldsymbol{W}_{\varphi m} = \exp(-\mathrm{i}m\varphi)\,\boldsymbol{W}_m, \tag{21a}$$

或

$$\boldsymbol{P}_{\varphi m} = \cos(m\varphi)\,\boldsymbol{P}_m + \sin(m\varphi)\,\boldsymbol{Q}_m,\quad \boldsymbol{Q}_{\varphi m} = -\sin(m\varphi)\,\boldsymbol{P}_m + \cos(m\varphi)\,\boldsymbol{Q}_m, \tag{21b}$$

再由(15) 式可得

$$\boldsymbol{P}_{\varphi m} = \cos m\varphi\,\boldsymbol{P}_m + \sin m\varphi\,\boldsymbol{Q}_m = 2^{m-1}\ulcorner\boldsymbol{n}^{\otimes m}\lrcorner. \tag{22}$$

在第 3 节还得到 $\ulcorner\boldsymbol{n}^{\otimes m}\lrcorner$ 的如下绝对表示:

$$\ulcorner\boldsymbol{n}^{\otimes m}\lrcorner = \boldsymbol{n}^{\otimes m} - \frac{1}{2(m-1)}\langle\boldsymbol{1}\otimes\boldsymbol{n}^{\otimes m-2}\rangle + \cdots = \sum_{r=1}^{[m/2]}(-1)^r\beta_m^2(r)\,\langle\boldsymbol{1}^{\otimes r}\otimes\boldsymbol{n}^{\otimes m-2r}\rangle, \tag{23a}$$

其中

$$\beta_m^2(r) = \{2^r(m-1)(m-2)\cdots(m-r)\}^{-1}. \tag{23b}$$

2　三维 ODF 的不可约张量傅立叶展开

2.1　基本不可约张量

与第 1 节的做法类似, 建立三维 ODF 的张量傅立叶展开的关键也在于构造所有 m 阶不可约张量的线性空间 $\mathscr{T}_m^3$ 的一组基, 使得不可约张量的表示具有

(i) 简单和统一的形式;

(ii) 便于处理各种点群对称性;

(iii) 可以与常规傅立叶展开建立固有的联系.

从标准的数学综合参考书教科书(比如[28]) 可知, N 维欧几里德空间的 m 阶完全对称张量有 $\begin{pmatrix} m+N-1 \\ N-1 \end{pmatrix} = (m+N-1)!/[m!(N-1)!]$ 个独立分量, 又因为无迹条件(3b) 对应于一个 $(m-2)$ 阶完全对称张量, 故 N 维 m 阶不可约张量空间 $\mathscr{T}_m^N$ 的维数是

$$D_m^N = \dim\mathscr{T}_m^N = \begin{pmatrix} m+N-1 \\ N-1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} m-2+N-1 \\ N-1 \end{pmatrix}, \tag{24a}$$

例如

$$D_m^2 \equiv 2,\quad D_m^3 = 2m+1,\quad D_m^4 = (m+1)^2 \qquad (\text{当 } m = 1, 2, \cdots). \tag{24b}$$

上一节已经用到了对任意 $m \in \mathscr{Z}^+$, 张量空间 $\mathscr{T}_m^2$ 的维数都等于 2 这一事实.

设 $\boldsymbol{e}_\alpha$ 为三维欧几里德空间 $\mathscr{E}^3$ 的笛卡儿坐标系的 x_α 坐标方向矢, 引入记号 $\boldsymbol{k} = \boldsymbol{e}_3$ 和复

矢量 $\omega = \boldsymbol{e}_1 + \mathrm{i}\boldsymbol{e}_2$, 为了构造三维 m 阶不可约张量的基, 引入如下复张量值生成函数:

$$\boldsymbol{G}_m(x) = (2\boldsymbol{k} + x\omega - x^{-1}\omega)^{\otimes m} = \sum_{r=-m}^{m} x^r \boldsymbol{W}_{m,r}. \tag{25}$$

再次注意到 $\omega\cdot\omega = 0$ 以及 $\omega\cdot\bar{\omega} = 2$, 立即可见 $\boldsymbol{G}_m(x)$, 并推知所有的 $\boldsymbol{W}_{m,r}(x)$ 都是不可约的. $\boldsymbol{G}_m(x)$ 的三项式展开为

$$\boldsymbol{G}_m(x) = \boldsymbol{P}_{m,0} + \sum_{r=1}^{m} [x^r \boldsymbol{W}_{m,r} + (-1)^r x^{-r} \bar{\boldsymbol{W}}_{m,r}], \tag{26a}$$

其中

$$\boldsymbol{P}_{m,0} = \sum_{s=0}^{[m/2]} (-1)^s 2^{m-2s} \langle \boldsymbol{k}^{\otimes m-2s} \otimes \omega^{\otimes s} \otimes \bar{\omega}^{\otimes s} \rangle, \tag{26b}$$

$$\boldsymbol{W}_{m,r} = \boldsymbol{P}_{m,r} + \mathrm{i}\boldsymbol{Q}_{m,r} = \sum_{s=0}^{[(m-r)/2]} (-1)^s 2^{m-r-2s} \langle \boldsymbol{k}^{\otimes m-r-2s} \otimes \omega^{\otimes r+s} \otimes \bar{\omega}^{\otimes s} \rangle, \tag{26c}$$

$\boldsymbol{P}_{m,r}$ 和 $\boldsymbol{Q}_{m,r}$ 分别是 $\boldsymbol{W}_{m,r}$ 的实部和虚部. 从(26b) 可知 $\bar{\boldsymbol{P}}_{m,0} = \boldsymbol{P}_{m,0}$, 即 $\boldsymbol{P}_{m,0}$ 是实 m 阶张量.

(26) 式已经给出了 $2m+1$ 个 m 阶不可约张量, 即

$$\boldsymbol{P}_{m,0},\ \boldsymbol{P}_{m,1},\ \boldsymbol{Q}_{m,1},\ \boldsymbol{P}_{m,2},\ \boldsymbol{Q}_{m,2},\ \cdots,\ \boldsymbol{P}_{m,m},\ \boldsymbol{Q}_{m,m}, \tag{27}$$

并且有 $\boldsymbol{W}_{m,m} = \boldsymbol{W}_m = \omega^{\otimes m}$ 以及 $\boldsymbol{P}_{m,m} = \boldsymbol{P}_m$ 和 $\boldsymbol{Q}_{m,m} = \boldsymbol{Q}_m$. 因此(26) 式定义的三维不可约张量 $\boldsymbol{W}_{m,r}$, $\boldsymbol{P}_{m,r}$, $\boldsymbol{Q}_{m,r}$ 是第1节研究的二维基本不可约张量 $\boldsymbol{W}_m$, $\boldsymbol{P}_m$, $\boldsymbol{Q}_m$ 的一般化. 考虑如下两个量:

$$\langle \boldsymbol{k}^{\otimes m-r-2s} \otimes \omega^{\otimes r+s} \otimes \bar{\omega}^{\otimes s} \rangle \cdot \langle \boldsymbol{k}^{\otimes m-r'-2s'} \otimes \omega^{\otimes r'+s'} \otimes \bar{\omega}^{\otimes s'} \rangle, \tag{28a}$$

$$\langle \boldsymbol{k}^{\otimes m-r-2s} \otimes \omega^{\otimes r+s} \otimes \bar{\omega}^{\otimes s} \rangle \cdot \langle \boldsymbol{k}^{\otimes m-r'-2s'} \otimes \bar{\omega}^{\otimes r'+s'} \otimes \omega^{\otimes s'} \rangle, \tag{28b}$$

其中 $0 \leqslant s \leqslant \left[\dfrac{m-r}{2}\right]$ 和 $0 \leqslant s' \leqslant \left[\dfrac{m-r'}{2}\right]$. 由明显的事实 $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{w} = \boldsymbol{k}\cdot\bar{\omega} = \omega\cdot\omega = \bar{\omega}\cdot\bar{\omega} = 0$, $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{k} = 1$, 和 $\omega\cdot\bar{\omega} = 2$, 易见, 当且仅当 $r + s = s'$ 和 $r' + s' = s$, 亦即 $r = r' = 0$ 和 $s = s'$ 同时成立时算式(28a) 非零. 因此, 从(26) 可得下列正交关系

$$\begin{aligned}\boldsymbol{W}_{m,r}\cdot\boldsymbol{W}_{m,r'} = {} & (\boldsymbol{P}_{m,r}\cdot\boldsymbol{P}_{m,r'} - \boldsymbol{Q}_{m,r}\cdot\boldsymbol{Q}_{m,r'}) + \\ & \mathrm{i}(\boldsymbol{Q}_{m,r}\cdot\boldsymbol{P}_{m,r'} + \boldsymbol{P}_{m,r}\cdot\boldsymbol{Q}_{m,r'}) = 0 \qquad (\text{当 } r \neq r'),\end{aligned} \tag{29a}$$

$$\boldsymbol{W}_{m,r}\cdot\boldsymbol{W}_{m,r} = (\boldsymbol{P}_{m,r}\cdot\boldsymbol{P}_{m,r} - \boldsymbol{Q}_{m,r}\cdot\boldsymbol{Q}_{m,r}) + 2\mathrm{i}\boldsymbol{P}_{m,r}\cdot\boldsymbol{Q}_{m,r} = 0. \tag{29b}$$

通过定义 $\boldsymbol{W}_{m,0} = \boldsymbol{P}_{m,0}$ 还可以把 $\boldsymbol{W}_{m,r}$ 的上述关系推广到 $r = 0$. 同样可得当且仅当 $r = r'$ 和 $s = s'$ 时算式(28b) 非零, 相应的值为

$$\frac{2^{r+2s} m!}{s!(r+s)!(m-r-2s)!}.$$

作为(29a, b) 式的补充, 更多的正交关系可以从(26) 式出发获得如下

$$\begin{aligned}\boldsymbol{W}_{m,r}\cdot\bar{\boldsymbol{W}}_{m,r'} = {} & (\boldsymbol{P}_{m,r}\cdot\boldsymbol{P}_{m,r'} + \boldsymbol{Q}_{m,r}\cdot\boldsymbol{Q}_{m,r'}) + \\ & \mathrm{i}(\boldsymbol{Q}_{m,r}\cdot\boldsymbol{P}_{m,r'} - \boldsymbol{P}_{m,r}\cdot\boldsymbol{Q}_{m,r'}) = 0, \qquad (\text{当 } r \neq r'),\end{aligned} \tag{29c}$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{W}_{m,r}\cdot\bar{\boldsymbol{W}}_{m,r} = {} & \boldsymbol{P}_{m,r}\cdot\boldsymbol{P}_{m,r} + \boldsymbol{Q}_{m,r}\cdot\boldsymbol{Q}_{m,r} = \\ & 2^m\left[\sum_{s=0}^{[(m-r)/2]} \frac{2^{m-r-2s} m!}{s!(r+s)!(m-r-2s)!}\right].\end{aligned} \tag{29d}$$

这些正交关系(29) 表明(27) 式列出的 $2m+1$ 个基本 m 阶不可约张量是互相正交的, 从而它们构成了 $(2m+1)$ 维线性空间 $\mathscr{T}_m^3$ 的一组正交基.

此外, 注意到三项式 $(2 + x + x^{-1})^m$ 展开中 x^r 项的系数正好与(29d) 式括号中的项相同, 由 $(2 + x + x^{-1})^m = x^{-m}(1+x)^{2m}$ 可知它等同于二项式 $(1+x)^{2m}$ 展开中 x^{m+r} 项的系数, 即 $(2m)!$

$/[(m+r)!(m-r)!]$, 进一步加上(29b), 可得

$$\boldsymbol{P}_{m,0}\cdot\boldsymbol{P}_{m,0}=\frac{2^m(2m)!}{(m!)^2}, \tag{30a}$$

$$\boldsymbol{P}_{m,r}\cdot\boldsymbol{P}_{m,r}=\boldsymbol{Q}_{m,r}\cdot\boldsymbol{Q}_{m,r}=\frac{1}{2}\boldsymbol{W}_{m,r}\cdot\boldsymbol{W}_{m,r}=\frac{2^{m-1}(2m)!}{(m+r)!(m-r)!}\quad(\text{当 } r=1,\cdots,m)\cdot \tag{30b}$$

由此, 类似于(12)式, 三维 m 阶张量$\boldsymbol{A}$ 的对称无迹部分$\ulcorner\boldsymbol{A}\lrcorner$可以表示成

$$\ulcorner\boldsymbol{A}\lrcorner=\frac{(m!)^2}{2^m(2m)!}\left[(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{P}_{m,0})\boldsymbol{P}_{m,0}+2\mathrm{Re}\sum_{r=1}^{m}\frac{(m+r)!(m-r)!}{(m!)^2}(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{W}_{m,r})\boldsymbol{W}_{m,r}\right]\cdot \tag{31}$$

在实际应用和研究中, 使用下面的生成函数

$$\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{W}_m(x)=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{P}_{m,0}+\sum_{r=1}^{m}[(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{W}_{m,r})x^r+(-1)^r(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{W}_{m,r})] \tag{32}$$

是非常方便的$\cdot$ 在本文第(Ⅱ)部分, 这一生成函数将用于判断一组 m 阶不可约张量构成是否组成点群 $\mathscr{G}$下的约束张量空间 $\mathscr{T}_m^3(\mathscr{G})$ 的一组基$\cdot$

2.2 常规傅立叶展开

设(φ,θ), $0\leqslant\varphi<2\pi$, $0\leqslant\theta\leqslant\pi$为三维空间的单位球面坐标$\cdot$ 众所周知(参见[27]), 任意三维球面上的平方可积函数 Φ具有如下形式的绝对收敛的傅立叶展开:

$$\Phi(\varphi,\theta)=\Phi_0+\sum_{m=1}^{\infty}\left[\frac{a_{m,0}}{2}P_{m,0}(\cos\theta)+\mathrm{Re}\sum_{r=1}^{m}(a_{m,r}-\mathrm{i}b_{m,r})P_{m,r}(\cos\theta)\exp(\mathrm{i}r\varphi)\right], \tag{33a}$$

其中

$$\Phi_0=\frac{1}{4\pi}\int_{\theta=0}^{\pi}\int_{\varphi=0}^{2\pi}\Phi(\varphi,\theta)\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi, \tag{33b}$$

$$a_{m,r}-\mathrm{i}b_{m,r}=\frac{2m+1}{2\pi}\frac{(m-r)!}{(m+r)!}\int_{\theta=0}^{\pi}\int_{\varphi=0}^{2\pi}\Phi(\varphi,\theta)P_{m,r}(\cos\theta)\exp(-\mathrm{i}r\varphi)\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi\cdot \tag{33c}$$

(33a)式中 $P_{m,0}(y)$ 和 $P_{m,r}(y)$ $(r=1,2,\cdots,m)$ 分别是勒让德函数和连带勒让德函数, 它们可以表示成 Rodrigues 形式(参见[27]):

$$P_{m,r}(y)=\frac{(1-y^2)^{r/2}}{2^m m!}\frac{\mathrm{d}^{m+r}}{\mathrm{d}y^{m+r}}(y^2-1)^m=\frac{(1-y^2)^{r/2}}{2^m}\sum_{s=0}^{[(m-r)/2]}\frac{(-1)^s(2m-2s)!\,y^{m-r-2s}}{s!(m-s)!(m-r-2s)!}\cdot \tag{34}$$

2.3 张量傅立叶展开

与1.2节解释的原因相同, 三维 ODF 的张量傅立叶展开是必需的$\cdot$ 相对于笛卡儿标架$\{\boldsymbol{e}_1,\boldsymbol{e}_2,\boldsymbol{e}_3=\boldsymbol{k}\}$, 典型的单位矢量 $\boldsymbol{n}$ 在球面坐标中可以表示成 $\boldsymbol{n}=(\sin\theta\cos\varphi,\sin\theta\sin\varphi,\cos\theta)$, 对任一平方可积的 ODF $\Phi(\boldsymbol{n})$, 可得到它的常规傅立叶展开(33a)$\cdot$ 注意到 $\boldsymbol{n}\cdot\omega=\sin\theta\exp(\mathrm{i}\varphi)$ 和 $\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{k}=\cos\theta$, 从(26) 式易得

$$\boldsymbol{W}_{m,r}\cdot\boldsymbol{n}^{\times m}=\sum_{s=0}^{[(m-r)/2]}(-1)^s\frac{2^{m-r-2s}m!\exp(\mathrm{i}r\varphi)}{s!(r+s)!(m-r-2s)!}\cos^{m-r-2s}\theta\sin^{r+2s}\theta\cdot \tag{35}$$

本小结的最后将证明(35)式可进一步用勒让德函数和连带勒让德函数表示成:

$$\boldsymbol{W}_{m,r}\cdot\boldsymbol{n}^{\times m}=\frac{2^m m!}{(m+r)!}P_{m,r}(\cos\theta)\exp(\mathrm{i}r\varphi)\cdot \tag{36}$$

将(36)式代入(33)式得到三维ODF的张量傅立叶展开如下

$$\Phi(\boldsymbol{n}) = \Phi_0 + \sum_{m=1}^{\infty} \boldsymbol{a}_m \cdot \boldsymbol{n}^{\not\sim m} = \Phi_0 + \frac{1}{4\pi}\sum_{m=1}^{\infty}\frac{(2m+1)!}{2^m(m!)^2}\boldsymbol{M}_m \cdot \boldsymbol{n}^{\not\sim m}, \tag{37}$$

其中

$$\boldsymbol{a}_m = \frac{1}{2^{m+1}}\boldsymbol{a}_{m,0} + \sum_{r=1}^{m}\frac{(m+r)!}{2^m m!}\boldsymbol{a}_{m,r}, \tag{38a}$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{a}_{m,r} &= a_{m,r}\boldsymbol{P}_{m,r} + b_{m,r}\boldsymbol{Q}_{m,r} = \mathrm{Re}[(a_{m,r} - \mathrm{i}b_{m,r})\boldsymbol{W}_{m,r}] = \\ &\frac{2m+1}{2\pi}\frac{(m-r)!}{(m+r)!}\mathrm{Re}\left\{\left[\oint \Phi(\boldsymbol{n})P_{m,r}\exp(-\mathrm{i}r\varphi)\mathrm{d}\boldsymbol{n}\right]\boldsymbol{W}_{m,r}\right\}\cdot\end{aligned} \tag{38b}$$

由(32)式和(36)式，$\boldsymbol{n}^{\not\sim m}$ 的不可约部分为

$$\lceil \boldsymbol{n}^{\not\sim m}\rfloor = \frac{2(m!)^2}{(2m)!}\mathrm{Re}\left[\frac{P_{m,0}}{2}\boldsymbol{P}_{m,0} + \sum_{r=1}^{m}\frac{(m-r)!}{m!}P_{m,r}\exp(-\mathrm{i}r\varphi)\boldsymbol{W}_{m,r}\right]\cdot \tag{39a}$$

将(38)式代入(37)式并与(39a)式比较，就有(37)式的后一关系式，其中 $\boldsymbol{M}_m$ 是 m 阶矩张量：

$$\boldsymbol{M}_m = \oint \Phi(\boldsymbol{n})\lceil \boldsymbol{n}^{\not\sim m}\rfloor \mathrm{d}\boldsymbol{n}\cdot \tag{39b}$$

最后，我们给出(36)式的一个直接证明· 为了从(35)式得到(36)式，记 $k = [(m-r)/2]$ 和 $y = \cos\theta$(由此 $\sin^2\theta = 1 - y^2$)，则有推导

$$\begin{aligned}&\sum_{s=0}^{k}\frac{(-1)^s x^{m-r-2s}(1-y^2)^s}{4^s s!(r+s)!(m-r-2s)!} = \\ &\quad\sum_{s=0}^{k}\sum_{t=0}^{s}\frac{(-1)^{s-t}y^{m-r-2(s-t)}}{4^s t!(s-t)!(r+s)!(m-r-2s)!} = \\ &\quad\sum_{s=0}^{k}\sum_{l=0}^{s}\frac{(-1)^l y^{m-r-2l}}{4^s(s-l)!l!(r+s)!(m-r-2s)!} = \\ &\quad\sum_{l=0}^{k}\sum_{s=l}^{k}\frac{(-1)^l y^{m-r-2l}}{4^s l!(s-l)!(r+s)!(m-r-2s)!} = \\ &\quad\sum_{l=0}^{k}\sum_{u=0}^{k-l}\frac{(-1)^l y^{m-r-2l}}{4^{l+u}l!u!(r+u+l)!(m-r-2u-2l)!}\cdot\end{aligned} \tag{40a}$$

在(40a)式的倒数第二个关系式中运用如下著名的求和变换关系：

$$\sum_{s=0}^{n}\sum_{l=0}^{s}f(l,s) = \sum_{l=0}^{n}\sum_{s=l}^{n}f(l,s)\cdot$$

另一方面，注意到三项式 $(2 + x + 1/x)^{m-l}$ 展开中 $1/x^{r+l}$ 项的系数为

$$\sum_{u=0}^{k-l}\frac{(m-l)!2^{m-r}}{4^{l+u}u!(r+u+l)!(m-r-2u-2l)!}, \tag{40b}$$

由于 $(2+x+1/x)^{m-l} = (1/x^{m-l})(1+x)^{2(m-l)}$ 和二项式 $(1+x)^{2(m-l)}$ 展开中 $x^{m-l}/x^{r+l} = x^{m-r-2l}$ 项的系数是 $(2m-2l)!/[(m+r)!(m-r-2l)!]$，有推导

$$\begin{aligned}&\sum_{l=0}^{k}\sum_{u=0}^{k-l}\frac{(-1)^l x^{m-r-2l}}{4^{l+u}l!u!(r+u+l)!(m-r-2u-2l)!} = \\ &\quad\sum_{l=0}^{k}\frac{(-1)^l(2m-2l)!x^{m-r-2l}}{2^{m-r}l!(m-l)!(m+r)!(m-r-2l)!}\cdot\end{aligned} \tag{40c}$$

由式(35)、(40)和(34)导致(36)式·

2.4 关于 $\boldsymbol{W}_{m,r}$ 的旋转和 $\lceil \boldsymbol{n}^{\not\sim m}\rfloor$ 的几个有用表示

利用旋转基 $\{\boldsymbol{e}_{1\varphi}, \boldsymbol{e}_{2\varphi}\}$，其中 $\boldsymbol{e}_{1\varphi} = \boldsymbol{n} = \cos\varphi\,\boldsymbol{e}_1 + \sin\varphi\,\boldsymbol{e}_2$ 和 $\boldsymbol{e}_{2\varphi} = -\sin\varphi\,\boldsymbol{e}_1 + \cos\varphi\,\boldsymbol{e}_2$，引

入 $\omega_\varphi = \boldsymbol{e}_{1\varphi} + \mathrm{i}\boldsymbol{e}_{2\varphi} = \exp(-\mathrm{i}\varphi)\,\omega$ 和 $\boldsymbol{W}_{\varphi m,r} = \omega_\varphi^{\otimes m} = \boldsymbol{P}_{\varphi m,r} + \mathrm{i}\boldsymbol{Q}_{\varphi m,r}$，则有

$$\boldsymbol{W}_{\varphi m,r} = \exp(-\mathrm{i}r\varphi)\,\boldsymbol{W}_{m,r} \tag{41a}$$

或

$$\begin{cases} \boldsymbol{P}_{\varphi m,r} = \cos(r\varphi)\boldsymbol{P}_{m,r} + \sin(r\varphi)\boldsymbol{Q}_{m,r}, \\ \boldsymbol{Q}_{\varphi m,r} = -\sin(r\varphi)\boldsymbol{P}_{m,r} + \cos(r\varphi)\boldsymbol{Q}_{m,r}. \end{cases} \tag{41b}$$

这些关系将用于研究材料的对称性约束•

类似于(23)中，第3节将导出$\ulcorner \boldsymbol{n}^{\otimes m}\lrcorner$的绝对表示如下：

$$\ulcorner \boldsymbol{n}^{\otimes m}\lrcorner = \boldsymbol{n}^{\otimes m} - \frac{1}{2m-1}\langle \boldsymbol{1}\otimes\boldsymbol{n}^{\otimes m-2}\rangle + \cdots = \sum_{r=0}^{[m/2]}(-1)^r\beta_m^3(r)\langle \boldsymbol{1}^{\otimes r}\otimes\boldsymbol{n}^{\otimes m-2r}\rangle, \tag{42a}$$

其中 $$\beta_m^3(r) = \frac{1}{(2m-1)(2m-3)\cdots(2m-2r+1)},\quad \beta_m^3(0) = 1. \tag{42b}$$

顺便指出，由$\langle \omega\otimes\omega\rangle = 2(\boldsymbol{1} - \boldsymbol{k}\otimes\boldsymbol{k})$可得到关于 $\boldsymbol{W}_{m,r}$ 的一个等价表示如下：

$$\boldsymbol{W}_{m,r} = 2^{m-r}\sum_{s=0}^{[(m-r)/2]}\frac{(-1)^s r!}{2^s(r+s)!}\langle \boldsymbol{k}^{\otimes m-r-2s}\otimes(\boldsymbol{1}-\boldsymbol{k}\otimes\boldsymbol{k})^{\otimes s}\otimes\omega^{\otimes r}\rangle. \tag{43}$$

2.5 中心对称、正交和横观各向同性的ODF

若定向分布函数 $\Phi(\boldsymbol{n})$满足 $\Phi(-\boldsymbol{n}) = \Phi(\boldsymbol{n})$，则该 $\Phi(\boldsymbol{n})$ 就称为中心对称的• 例如，纤维增强复合材料中纤维的ODF，微观开裂固体中微裂纹的ODF，半晶聚合物的链轴的ODF，单轴拉伸弹性模量的ODF，以及中心对称晶体的ODF等都是中心对称的• 由(37)式可知，对任何中心对称的 $\Phi(\boldsymbol{n})$，其奇数阶的矩张量 $\boldsymbol{M}_m = 0$，$m\in\mathscr{Z}$，故张量傅立叶展开简化为

$$\Phi(\boldsymbol{n}) = \Phi_0 + \frac{1}{4\pi}\sum_{l=1}^{\infty}\frac{(4l+1)!}{4^l[(2l)!]^2}\boldsymbol{M}_{2l}\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 2l}. \tag{44}$$

若存在三个正交方向，记为$\boldsymbol{e}_1$、$\boldsymbol{e}_2$和$\boldsymbol{e}_3 = \boldsymbol{k}$，定向分布函数 $\Phi(\boldsymbol{n})$ 关于$\boldsymbol{e}_1$、$\boldsymbol{e}_2$和$\boldsymbol{k}$的反射变换下不变，即 $\Phi(n_1, n_2, n_3) = \Phi(-n_1, n_2, n_3) = \Phi(n_1, -n_2, n_3) = \Phi(n_1, n_2, -n_3)$，则称 $\Phi(\boldsymbol{n})$ 具有正交对称性，其中n_α为$\boldsymbol{n}$相对$\{\boldsymbol{e}_\alpha\}$的分量• 这要求 $\Phi(\boldsymbol{n})$ 的张量傅立叶展开(37)中的所有张量系数$\boldsymbol{a}_m$($m\in\mathscr{Z}^+$)在上述反射下都是不变的，由式(43)和(7)可知，关于$\boldsymbol{e}_2$的反射改变所有$\boldsymbol{Q}_{m,r}$的符号，关于$\boldsymbol{e}_1$的反射改变r为奇数时的$\boldsymbol{P}_{m,r}$，关于$\boldsymbol{k}$的反射改变m为奇数时的$\boldsymbol{P}_{m,2s}$，因此只有$\boldsymbol{P}_{2l,2s}$在上述所有3个反射下是不变的• 从而正交 $\Phi(\boldsymbol{n})$ 的张量傅立叶展开具有如下约束形式：

$$\Phi(\boldsymbol{n}) = \Phi_0 + \sum_{l=1}^{\infty}\left[\frac{a_{2l,0}}{2^{2l+1}}\boldsymbol{P}_{2l,0} + \sum_{s=1}^{l}\frac{(2l+2s)!}{2^{2l}(2l)!}a_{2l,2s}\boldsymbol{P}_{2l,2s}\right]\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 2l}. \tag{45}$$

考虑到一般$2l$阶不可约张量有$4l+1$个参数，(45)表明正交ODF的重大简化在于其$2l$阶不可约张量系数只出现$l+1$个参数•

记$\mathscr{D}_{\infty h}$为具有主轴$\boldsymbol{k} = \boldsymbol{e}_3$的横观各向同性，即$\mathscr{D}_{\infty h}$由任意绕$\boldsymbol{k}$的旋转、关于$\boldsymbol{k}$的反射和关于任何垂直于$\boldsymbol{k}$方向的反射生成• 由(41)式可得所有不可约张量系数$\boldsymbol{a}_{m,r}$($r = 1, 2, \cdots, m$)都不会在绕$\boldsymbol{k}$的旋转下不变，由(43)可得关于$\boldsymbol{k}$的反射对任何奇数m改变$\boldsymbol{P}_{m,0}$的符号，于是横观各向同性的 $\Phi(\boldsymbol{n})$ 具有表示：

$$\Phi(\boldsymbol{n}) = \Phi_0 + \sum_{l=1}^{\infty}\frac{a_{2l,0}}{2^{2l+1}}\boldsymbol{P}_{2l,0}\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes 2l}. \tag{46}$$

也就是说，其张量傅立叶展开中$2l$阶不可约张量系数中只出现一个非零参数$a_{2l,0}$•

在众多应用中弹塑性问题特别令人关注• [29]表明初始各向同性的简单材料由塑性诱导的各向异性,只能是正交异性或横观各向同性,且不论变形历史如何,其各向异性都与当前的塑性变形主轴一致• 当3个塑性变形主伸长不同时(如简单剪切)诱导正交异性,当只有两个塑性变形主伸长不同时(如单轴拉伸)诱导横观各向同性• (45)式和(46)式给出的正交异性和横观各向同性下ODF的张量傅立叶展开的显式表示是研究三维塑性大变形下ODF变化和织构演化封闭解的合理基础,文[22]就是应用之一•

本文第(Ⅱ)部分将得到在各种点群对称性(除了两类二十面体情况)下三维不可约张量和三维ODF的张量傅立叶展开的约束形式•

3 N 维ODF的不可约张量傅立叶展开通论

3.1 常规傅立叶展开

如第(Ⅱ)部分将表明的,建立三维CODF的张量傅立叶展开需要深入理解四维ODF的张量傅立叶展开,本节对 N 维ODF $\Phi(\boldsymbol{n})$ 的张量傅立叶展开作一研究•

记 $\mathscr{P}_m^N$ 为 N 维欧几里德空间 $\{x_\alpha\}$ 的所有 m 次齐次多项式的线性空间,比如 $x_1^6x_2^2x_3^9\in\mathscr{P}_{17}^3$,记 $\Delta=\nabla\cdot\nabla=(\ )_{,\alpha\alpha}$ 为 N 维欧几里德空间的拉普拉斯算符• 线性空间 $\{p(\boldsymbol{x})\in\mathscr{P}_m^N:\Delta p(\boldsymbol{x})=0\}$ 称为 m 次调和多项式空间,m 次调和多项式在 N 维单位球面上的约束形式称为 m 次球谐函数,并记 $\mathscr{H}_m^N$ 为 m 次球谐函数的线性空间• 众所周知(参见[30, 31]),线性空间 $\mathscr{H}_m^N$ 具有与 N 维 m 阶不可约张量空间 $\mathscr{T}_m^N$ 相同的维数,即如(24)式所示的 D_m^N•

比如,二维和三维球谐函数的集合[27]

$$\{\cos m\varphi,\ \sin m\varphi\},\tag{47a}$$

$$\{P_{m,0},\ P_{m,1}\cos\varphi,\ P_{m,1}\sin\varphi,\ \dots,\ P_{m,m}\cos m\varphi,\ P_{m,m}\sin m\varphi\}\tag{47b}$$

分别构成 $\mathscr{H}_m^2$ 和 $\mathscr{H}_m^3$ 的基,其中 $P_{m,m}=P_{m,m}(\cos\theta)$• 一般地,次数不同的球谐函数的空间 $\mathscr{H}_m^N$ 和 $\mathscr{H}_n^N$ 按下面内积定义式互相正交的

$$(f,g)=\oint f(\boldsymbol{n})g(\boldsymbol{n})\,\mathrm{d}\boldsymbol{n}=0\qquad(\text{对任意}f\in\mathscr{H}_m^N\text{和}g\in\mathscr{H}_n^N)\text{•}\tag{48}$$

而 N 维单位球面上任意平方可积标量函数 $\Phi(\boldsymbol{n})$ 可以展开成绝对收敛的傅立叶级数(参见[30, 31]):

$$\Phi(\boldsymbol{n})=\Phi_0+\Phi_1(\boldsymbol{n})+\Phi_2(\boldsymbol{n})+\Phi_3(\boldsymbol{n})+\cdots,\qquad\Phi_m(\boldsymbol{n})\in\mathscr{H}_m^N\text{•}\tag{49}$$

进一步引入 $\mathscr{H}_m^N$ 的一个正交基 $\{Y_{m,J}(\boldsymbol{n}):J=1,\dots,D_m^N\}$,则傅立叶展开(49)可以写成如下常规形式

$$\Phi(\boldsymbol{n})=\Phi_0+\sum_{m=1}^{\infty}\sum_{J=1}^{D_m^N}a_{m,J}Y_{m,J}(\boldsymbol{n}),\tag{50a}$$

其中

$$\Phi_0=(\Omega^N)^{-1}\oint\Phi(\boldsymbol{n})\,\mathrm{d}\boldsymbol{n},\quad a_{m,J}=(Y_{m,J},Y_{m,J})^{-1}\oint\Phi(\boldsymbol{n})Y_{m,J}(\boldsymbol{n})\,\mathrm{d}\boldsymbol{n}\text{•}\tag{50b}$$

而

$$\Omega^N=\frac{N(\sqrt{\pi})^N}{\Gamma(1+N/2)}\tag{51}$$

是 N 维单位球面的面积,例如 $\Omega^2=2\pi$,$\Omega^3=4\pi$,$\Omega^4=2\pi^2$,$\Gamma(x)$ 是伽马函数•

3.2 张量傅立叶展开

现在来建立任意 N 维ODF $\Phi(\boldsymbol{n})$ 的张量傅立叶展开,作为准备引入下列关系式:

$$\boldsymbol{J}_k = \oint \boldsymbol{n}^{\otimes k}\mathrm{d}\boldsymbol{n} = \begin{cases}[(k/2)!]^{-1}\Omega_{k/2}^N\langle \boldsymbol{1}^{\otimes k/2}\rangle, & (k = 2, 4, 6, \cdots),\\ \boldsymbol{0}, & (k = 1, 3, 5, \cdots),\end{cases} \tag{52a}$$

其中

$$\Omega_0^N = \Omega^N, \quad \Omega_m^N = \frac{m!\,\Omega^N}{N(N+2)\cdots(N+2m-2)}, \tag{52b}$$

比如

$$\Omega_m^2 = \frac{\pi}{2^{m-1}}, \quad \Omega_m^3 = \frac{2^{m+2}(m!)^2\pi}{(2m+1)!}, \quad \Omega_m^4 = \frac{\pi^2}{2^{m-1}(m+1)}. \tag{52c}$$

事实上，利用格林积分定理以及位置矢量 $\boldsymbol{x} = (x_\alpha)$ 的梯度等于二阶单位张量：$x_{\alpha,\beta} = \delta_{\alpha\beta}$ 或 $\nabla\otimes\boldsymbol{x} = \boldsymbol{1}$，再由 $\boldsymbol{J}_k$ 是完全对称的：$\langle \boldsymbol{J}_k\rangle = \boldsymbol{J}_k$，可以推得 $\boldsymbol{J}_k$ 的如下公式：

$$\boldsymbol{J}_k = \int_V \boldsymbol{x}^{\otimes k-1}\otimes\nabla\mathrm{d}V = \int_V\langle \boldsymbol{x}^{k-2}\otimes\boldsymbol{1}\rangle\mathrm{d}V = \frac{\oint\langle \boldsymbol{n}^{\otimes k-2}\otimes\boldsymbol{1}\rangle\mathrm{d}\boldsymbol{n}}{N+k-2} = \frac{\langle \boldsymbol{J}_{k-2}\otimes\boldsymbol{1}\rangle}{N+k-2}, \tag{53a}$$

其中 V 表示N 维单位球。由于 $\boldsymbol{J}_0 = \Omega^N$ 和$\boldsymbol{J}_1 = \boldsymbol{0}$，从(53) 式可得 $\boldsymbol{J}_k = \boldsymbol{0}$ $(k \in \mathscr{Z}^+$ 为奇数$)$ 以及

$$\boldsymbol{J}_{2m} = \frac{\langle \boldsymbol{J}_{2m-2}\otimes\boldsymbol{1}\rangle}{N+2m-2} = \frac{\langle \boldsymbol{J}_{2m-4}\otimes\boldsymbol{1}\otimes\boldsymbol{1}\rangle}{(N+2m-2)(N+2m-4)} = \cdots = \frac{\langle \boldsymbol{1}\otimes\cdots\otimes\boldsymbol{1}\otimes\boldsymbol{1}\rangle}{(N+2m-2)(N+2m-4)\cdots N}. \tag{53b}$$

这就完成了性质(52) 的证明

设$\left\{\boldsymbol{g}_{m,J}: J = 1, 2, \cdots, D_m^N\right\}$是 $\mathscr{T}_m^N$ 的一组基并引入

$$Y_{m,J}(\boldsymbol{n}) = \boldsymbol{g}_{m,J}\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes m}, \qquad (J = 1, 2, \cdots, D_m^N). \tag{54}$$

由 $\boldsymbol{g}_{m,J}$ 的对称无迹性以及

$$\Delta\boldsymbol{x}^{\otimes m} = (\boldsymbol{x}^{\otimes m})_{,\alpha\alpha} = \langle \boldsymbol{x}^{\otimes m-1}\otimes\boldsymbol{e}_\alpha\rangle_{,\alpha} = 2\langle \boldsymbol{x}^{\otimes m-2}\otimes\boldsymbol{1}\rangle, \tag{55}$$

立即有 $\boldsymbol{g}_{m,J}\cdot\Delta\boldsymbol{x}^{\otimes m} = \Delta(\boldsymbol{g}_{m,J}\cdot\boldsymbol{x}^{\otimes m}) = 0$，也就是说 $Y_{m,J}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{g}_{m,J}\cdot\boldsymbol{x}^{\otimes m}$ 是m 次调和多项式，相应地 $Y_{m,J}(\boldsymbol{n})$ 是 m 次球谐函数。

从(54) 式和(52) 式出发，还可得到

$$(Y_{m,J}, Y_{l,K}) = \boldsymbol{g}_{m,J}\cdot\boldsymbol{J}_{m+l}\boldsymbol{g}_{l,K} = \begin{cases}(n!)^{-1}\Omega_n^N\boldsymbol{g}_{m,J}\cdot\langle \boldsymbol{1}^{\otimes n}\rangle\boldsymbol{g}_{l,K} & (m+l = 2n),\\ 0 & (m+l = \text{奇数}).\end{cases} \tag{56}$$

考虑不可约张量的定义式(3)，有

$$\langle \boldsymbol{1}^{\otimes m}\rangle\boldsymbol{T} = \langle \boldsymbol{e}_{\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_m}\rangle(\boldsymbol{e}_{\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_m}\cdot\boldsymbol{T}) = m!\,\boldsymbol{T} \qquad (\text{对任意 } \boldsymbol{T}\in\mathscr{T}_m^N), \tag{57a}$$

$$\langle \boldsymbol{1}^{\otimes m}\rangle\cdot\boldsymbol{S} = 0, \qquad (\text{对任意 } \boldsymbol{S}\in\mathscr{T}_{m+r}^N,\ r \geqslant 1). \tag{57b}$$

联系(56) 式和(57) 式，就得到

$$(Y_{m,J}, Y_{m,K}) = \Omega_m^N\boldsymbol{g}_{m,J}\cdot\boldsymbol{g}_{m,K}, \tag{58a}$$

$$(Y_{m,J}, Y_{l,K}) = 0, \qquad (m \neq l). \tag{58b}$$

最后，注意到空间 $\mathscr{H}_m^N$ 和 $\mathscr{T}_m^N$ 具有相同的维数D_m^N，而 $\boldsymbol{g}_{m,J}\cdot\boldsymbol{g}_{m,K}(J, K = 0, \cdots, D_m^N)$ 构成 $\mathscr{T}_m^N$ 的一个度量，故关系式(58) 表明$(Y_{m,J}, Y_{m,K})$ 构成 $\mathscr{H}_m^N$ 的一个度量。上述分析还表明(54) 式确定的$\left\{Y_{m,J}\right\}$形成 $\mathscr{H}_m^N$ 的一组基，且$\left\{Y_{m,J}(\boldsymbol{n})\right\}$是正交的当且仅当$\left\{\boldsymbol{g}_{m,J}\right\}$是正交的。进一步，从(54)、(52) 和(57) 诸式，可得逆变换：

$$\Omega_m^N\boldsymbol{g}_{m,J} = \oint Y_{m,J}(\boldsymbol{n})\boldsymbol{n}^{\otimes m}\mathrm{d}\boldsymbol{n}. \tag{59}$$

下面说明由(59)定义的 m 阶张量是对称无迹的. 设 $Y(\boldsymbol{n})$ 是 m 次球谐函数, 因为 $Y(\boldsymbol{x})$ 是 $\boldsymbol{x}$ 的 m 次齐次多项式, 从而一定存在一个 m 阶张量 $\boldsymbol{g}$ 使得 $Y(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{g}\cdot\boldsymbol{x}^{\otimes m}$. 由 $\boldsymbol{x}^{\otimes m}$ 的完全对称性, 只有 $\boldsymbol{g}$ 的完全对称部分对 $Y(\boldsymbol{x})$ 起作用, 不失一般性, 设 $\boldsymbol{g}$ 是完全对称的. 由(55)式可得 $\Delta Y(\boldsymbol{x}) = 2\boldsymbol{g}\cdot\langle\boldsymbol{x}^{\otimes m-2}\otimes\boldsymbol{1}\rangle$, 若 $Y(\boldsymbol{x})$ 是调和函数: $\Delta Y(\boldsymbol{x}) = 0$, 则 $\boldsymbol{g}$ 必是无迹的, 由此可知 $\boldsymbol{g}$ 是对称无迹张量.

令 $\left\{Y_{m,J}: J = 1, \cdots, D_m^N\right\}$ 是 $\mathscr{H}_m^N$ 的一组基, (51)式是 N 维平方可积ODF Φ 的常规傅立叶展开. 构造形如(59)的 D_m^N 个不可约张量 $\boldsymbol{g}_{m,J}$, $J = 1, \cdots, D_m^N$, 它们构成不可约张量空间 $\mathscr{T}_m^N$ 的一组基. 将(54)代入(51)得到 Φ 的不可约张量傅立叶展开如下

$$\Phi(\boldsymbol{n}) = \Phi_0 + \sum_{m=1}^{\infty}\boldsymbol{a}_m\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes m} = \Phi_0 + \sum_{m=1}^{\infty}(\Omega_m^N)^{-1}\boldsymbol{M}_m\cdot\boldsymbol{n}^{\otimes m}, \tag{60}$$

其中

$$\boldsymbol{a}_m = \sum_{J=1}^{D_m^N} a_{m,J}\boldsymbol{g}_{m,J}, \quad \boldsymbol{M}_m = \oint\Phi(\boldsymbol{n})\ulcorner\boldsymbol{n}^{\otimes m}\lrcorner\,\mathrm{d}\boldsymbol{n}. \tag{61a, b}$$

系数 $a_{m,J}$ 由(51b)确定, 不可约张量 $\boldsymbol{M}_m$ 是 m 阶矩张量. 为得到(60)式的第二个关系式, 利用 $\left\{\boldsymbol{g}_{m,J}\right\}$ 是 $\mathscr{T}_m^N$ 的一组正交基, 类似于(12)或(31), 可推知 N 维 m 阶张量 $\boldsymbol{A}$ 的对称无迹部分可以表示成

$$\ulcorner\boldsymbol{A}\lrcorner = \sum_{J=1}^{D_m^N}(\boldsymbol{g}_{m,J}\cdot\boldsymbol{g}_{m,J})^{-1}(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{g}_{m,J})\boldsymbol{g}_{m,J}. \tag{62}$$

将(51b)、(54)和(58)代入(61a)并利用(62), 就得到了(61b).

3.3 $\ulcorner\boldsymbol{n}^{\otimes m}\lrcorner$ 的绝对表示

在式(23)和(42)中分别引用了二维和三维情况下 $\ulcorner\boldsymbol{n}^{\otimes m}\lrcorner$ 的绝对表示, 这里我们给出该量在一般 N 维情况下的详细推导. 由定义, 易知 $\ulcorner\boldsymbol{n}^{\otimes m}\lrcorner$ 具有如下形式:

$$\begin{aligned}\ulcorner\boldsymbol{n}^{\otimes m}\lrcorner &= \boldsymbol{n}^{\otimes m} - \beta_m^N(1)\langle\boldsymbol{1}\otimes\boldsymbol{n}^{\otimes m-2}\rangle + \cdots = \\ &\sum_{r=0}^{[m/2]}(-1)^r\beta_m^N(r)\langle\boldsymbol{1}^{\otimes r}\otimes\boldsymbol{n}^{\otimes m-2r}\rangle,\end{aligned} \tag{63a}$$

其中 $\beta_m^N(0) = 1$. 我们要证明有递推关系

$$\beta_m^N(r) = \frac{\beta_m^N(r-1)}{2(N/2+m-r-1)}, \qquad (r = 1, 2, \cdots, [m/2]). \tag{63b}$$

作为对照, Advani 和 Tucker[9, 10] 给出主项 $\beta_2^3(1) = 1/3$, $\beta_4^3(1) = 1/7$, $\beta_4^3(2) = 1/35$.

(63b)式的证明　证明(63b)式的关键步骤是我们观察到下述分解

$$\begin{aligned}\langle\boldsymbol{n}^{\otimes m-2r}\otimes\boldsymbol{1}^{\otimes r}\rangle = {}&\langle\boldsymbol{n}^{\otimes m-2r}\otimes\boldsymbol{1}^{\otimes r-1}\rangle\otimes\boldsymbol{1} + \langle\boldsymbol{n}^{\otimes m-2r}\otimes\boldsymbol{1}^{\otimes r-2}\otimes \\ &\boldsymbol{e}_\alpha\otimes\boldsymbol{e}_\beta\rangle\otimes\boldsymbol{e}_\alpha\otimes\boldsymbol{e}_\beta + \langle\boldsymbol{n}^{\otimes m-2r-1}\otimes\boldsymbol{1}^{\otimes r-1}\otimes\boldsymbol{e}_\alpha\rangle\otimes\langle\boldsymbol{n}\otimes\boldsymbol{e}_\alpha\rangle + \\ &\langle\boldsymbol{n}^{\otimes m-2r-2}\otimes\boldsymbol{1}^{\otimes r}\rangle\otimes\boldsymbol{n}\otimes\boldsymbol{n}.\end{aligned} \tag{64a}$$

用 $\boldsymbol{1}$ 缩并(64a)式的右端得到

$$\begin{aligned}&N\langle\boldsymbol{n}^{\otimes m-2r}\otimes\boldsymbol{1}^{\otimes r-1}\rangle + \delta_{\alpha\beta}\langle\boldsymbol{n}^{\otimes m-2r}\otimes\boldsymbol{1}^{\otimes r-1}\otimes\boldsymbol{e}_\alpha\otimes\boldsymbol{e}_\beta\rangle + \\ &\quad 2n_\alpha\langle\boldsymbol{n}^{\otimes m-2r-1}\otimes\boldsymbol{1}^{\otimes r-1}\otimes\boldsymbol{e}_\alpha\rangle + \langle\boldsymbol{n}^{\otimes m-2r-2}\otimes\boldsymbol{1}^{\otimes r}\rangle.\end{aligned} \tag{64b}$$

注意到下面3个完全对称化项

$$\langle\boldsymbol{n}^{\otimes m-2r}\otimes\boldsymbol{1}^{\otimes r-2}\otimes\boldsymbol{e}_\alpha\otimes\boldsymbol{e}_\beta\rangle, \ \langle\boldsymbol{n}^{\otimes m-2r-1}\otimes\boldsymbol{1}^{\otimes r-1}\otimes\boldsymbol{e}_\alpha\rangle, \ \langle\boldsymbol{n}^{\otimes m-2r}\otimes\boldsymbol{1}^{\otimes r-1}\rangle \tag{64c}$$

分别包含

$$\left.\begin{aligned}
a &= \frac{(m-2)(m-3)\begin{pmatrix} m-4 \\ m-2r \end{pmatrix}(2r-4)!}{2^{r-2}(r-2)!}, \\
b &= \frac{(m-2)\begin{pmatrix} m-3 \\ m-2r-1 \end{pmatrix}(2r-2)!}{2^{r-1}(r-1)!}, \\
c &= \frac{\begin{pmatrix} m-2 \\ m-2r \end{pmatrix}(2r-2)!}{2^{r-1}(r-1)!}
\end{aligned}\right\} \tag{64d}$$

个子项,(64b)式前三个张量的求和等于

$$[N+(a+2b)/c]\langle \boldsymbol{n}^{\otimes m-2r} \otimes \boldsymbol{1}^{\otimes r-1}\rangle = 2(N/2+m+r-1)\langle \boldsymbol{n}^{\otimes m-2r} \otimes \boldsymbol{1}^{\otimes r-1}\rangle. \tag{64e}$$

再由$\ulcorner \boldsymbol{n}^{\otimes m} \lrcorner$的对称无迹性,就可得递推公式 $\beta_m^N(r-1)=2(N/2+m+r-1)\beta_m^N(r)$. 证毕.

4　完全对称张量的不可约分解

许多现代物理领域都涉及高于二阶的张量,处理这类问题时,高阶张量的不可约分解起着非常关键的作用. 文献[32~35]对此类分解的实现作出了贡献. 这里,我们对完全对称张量的不可约分解作一讨论.

因为 N 维欧几里德空间的m 阶完全对称张量 $\boldsymbol{S}$ 唯一对应于 m 次多项式的ODF

$$P_{\boldsymbol{S}}(\boldsymbol{n}) = \boldsymbol{S}\cdot \boldsymbol{n}^{\otimes m}, \tag{65}$$

前面得到的结果可以用来建立 $\boldsymbol{S}$ 的不可约分解.

首先,考虑偶数 $m=2l$ 阶张量的情况,下面说明存在一个标量 d_0、一个2阶不可约张量 $\boldsymbol{d}_2$、…、和一个 $2l$ 阶不可约张量$\boldsymbol{d}_{2l}$ 使得

$$\boldsymbol{S} = d_0\langle \boldsymbol{1}^{\otimes l}\rangle + \langle \boldsymbol{1}^{\otimes l-1} \otimes \boldsymbol{d}_2\rangle + \langle \boldsymbol{1}^{\otimes l-2} \otimes \boldsymbol{d}_4\rangle + \cdots + \langle \boldsymbol{1} \otimes \boldsymbol{d}_{2l-2}\rangle + \boldsymbol{d}_{2l}. \tag{66}$$

由对任意 $s(r \leqslant s \leqslant l)$,有数 $k_l(r,s)$ 使得

$$\langle \boldsymbol{1}^{\otimes l-r} \otimes \boldsymbol{d}_{2r}\rangle \cdot \boldsymbol{1}^{\otimes l-s} = k_l(r,s)\langle \boldsymbol{1}^{\otimes l-r} \otimes \boldsymbol{d}_{2r}\rangle. \tag{67}$$

立即得到对任意不同的 r 和$s(1 \leqslant r, s \leqslant l)$ 有

$$\langle \boldsymbol{1}^{\otimes l-r} \otimes \boldsymbol{d}_{2r}\rangle \cdot \langle \boldsymbol{1}^{\otimes l-s} \otimes \boldsymbol{d}_{2s}\rangle = 0, \tag{68}$$

即分解(66)是正交的. 其次,由(24)式,$2r(1 \leqslant r \leqslant l)$ 阶不可约张量 $\boldsymbol{d}_{2r}$ 的独立分量个数为 $D_{2r}^N = \begin{pmatrix} 2r+N-1 \\ N-1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 2r+N-3 \\ N-1 \end{pmatrix}$,(66)式右端的总独立分量个数等于$\begin{pmatrix} 2l+N-1 \\ N-1 \end{pmatrix}$,正好就是$2l$阶完全对称张量$\boldsymbol{S}$的独立分量个数,这表明(66)确实是$\boldsymbol{S}$的正交分解,其中 d_0, $\boldsymbol{d}_2$, …, $\boldsymbol{d}_{2l}$ 由$\boldsymbol{S}$ 唯一确定.

类似地,考虑奇数 $m=2l+1$ 阶张量的情况,下面证明唯一地存在一个矢量 $\boldsymbol{d}_1$、一个3阶不可约张量$\boldsymbol{d}_3$、…、和一个 $2l+1$ 阶不可约张量 $\boldsymbol{d}_{2l+1}$ 使得 $\boldsymbol{S}$ 具有如下正交分解:

$$\boldsymbol{S} = \langle \boldsymbol{1}^{\otimes l} \otimes \boldsymbol{d}_1\rangle + \langle \boldsymbol{1}^{\otimes l-1} \otimes \boldsymbol{d}_3\rangle + \langle \boldsymbol{1}^{\otimes l-2} \otimes \boldsymbol{d}_5\rangle + \cdots + \langle \boldsymbol{1} \otimes \boldsymbol{d}_{2l-1}\rangle + \boldsymbol{d}_{2l+1}. \tag{69}$$

由 $\boldsymbol{d}_{2r}$ 和$\boldsymbol{d}_{2r+1}$ 的完全对称性,有下列恒等式

$$\langle \boldsymbol{1}^{\otimes l-r} \otimes \boldsymbol{d}_{2r}\rangle \cdot \boldsymbol{n}^{\otimes 2l} = \frac{(2l)!}{2^{l-r}(l-r)!(2r)!}\boldsymbol{d}_{2r}\cdot \boldsymbol{n}^{\otimes 2r}, \tag{70a}$$

$$\langle \boldsymbol{1}^{\otimes l-r} \otimes \boldsymbol{d}_{2r+1}\rangle \cdot \boldsymbol{n}^{\otimes 2l+1} = \frac{(2l+1)!}{2^{l-r}(l-r)!(2r+1)!}\boldsymbol{d}_{2r+1}\cdot \boldsymbol{n}^{\otimes 2r+1}. \tag{70b}$$

分别将(66)和(69)代入(65),得到

$$Ps(\boldsymbol{n}) = \frac{(2l)!d_0}{2^l l!} + \frac{(2l)!\boldsymbol{d}_2 \cdot \boldsymbol{n}^{\sim 2}}{2^{l-1}(l-1)!2!} + \frac{(2l)!\boldsymbol{d}_4 \cdot \boldsymbol{n}^{\sim 4}}{2^{l-2}(l-2)!4!} + \cdots + \boldsymbol{d}_{2l} \cdot \boldsymbol{n}^{\sim 2l},$$

(如果 $m = 2l$), (71a)

$$Ps(\boldsymbol{n}) = \frac{(2l+1)!\boldsymbol{d}_1 \cdot \boldsymbol{n}}{2^l l! 1!} + \frac{(2l+1)!\boldsymbol{d}_3 \cdot \boldsymbol{n}^{\sim 3}}{2^{l-1}(l-1)!3!} + \cdots + \boldsymbol{d}_{2l+1} \cdot \boldsymbol{n}^{\sim 2l+1},$$

(如果 $m = 2l + 1$)• (71b)

再分别对照二维和三维的 ODF 的张量傅立叶展开(16)和(37),立即可得 $\boldsymbol{d}_{2r}$ 和 $\boldsymbol{d}_{2r+1}$ 的表示, 比如二维情况有

$$d_0 = \frac{2^{l-1}l!}{(2l)!\pi}\int_0^{2\pi} Ps(\varphi)\,\mathrm{d}\varphi, \tag{72a}$$

$$\boldsymbol{d}_{2r} = \frac{2^{l-r}(l-r)!(2r)!}{(2l)!\pi}\mathrm{Re}\left\{\left[\int_0^{2\pi} Ps(\varphi)\exp(-\mathrm{i}2r\varphi)\,\mathrm{d}\varphi\right]\boldsymbol{W}_{2r}\right\}, \tag{72b}$$

$$\boldsymbol{d}_{2r+1} = \frac{2^{l-r}(l-r)!(2r+1)!}{(2l+1)!\pi}\mathrm{Re}\left\{\left[\int_0^{2\pi} Ps(\varphi)\exp(-\mathrm{i}(2r+1)\varphi)\,\mathrm{d}\varphi\right]\boldsymbol{W}_{2r+1}\right\}• \tag{72c}$$

5 结 论

在这一部分, 对二维的 ODF 和 CODF、三维的 ODF 的不可约张量傅立叶展开作了深入的研究, 并给出了 N 维 ODF 的张量傅立叶展开的一些一般性质• 当非均匀材料的内结构用一个或一些 ODF 刻划时, 这些结果可以作为研究它的各种物理学和力学性质的基础•

同等重要的是给出了任意阶二维和三维不可约张量的简单和统一的表示, 它们在研究涉及高阶张量(比如四阶损伤张量、三阶压电张量等)的各种物理学和力学问题的研究中具有重要应用•

[参 考 文 献]

[1] Tamuzs V, Lagzdin' sh A Zh. A scheme of a phenomenological fracture theory[J]. *Mekhan Polim*, 1968, (4): 638_647; see also: Kuksenko V S, Tamuzs V. *Fracture Micromechanics of Polymer Materials*[M]. Boston: Martinus Nijhoff Publ, 1981.

[2] Lagzdyn' sh A Zh, Tamuzs V. Construction of a phenomenological theory of fracture of anisotropic media[J]. *Polymer Mechanics*, 1971, **7**: 563—571.

[3] Lagzdyn' sh A Zh, Tamuzs V. *Orientation Averaging in Mechanics of Solids*[M]. Longman Scientific & Technical Publ, 1992.

[4] Bunge H J. *Texture Analysis in Material Science*[M]. London: Butterworths, 1982.

[5] Onat E T. Representation of mechanical behaviour in the presence of internal damage[J]. *Engng Fract Mech*, 1986, **25**(5_6): 605—614.

[6] Onat E T, Leckie F A. Representation of mechanical behaviour in the presence of changing internal structure[J]. *Trans ASME, J Appl Mech*, 1988, **55**(1): 1—10.

[7] Adams B L, Boehler J P, Guidi M, et al. Group theory and representation of microstructure and mechanical behaviour of polycrystals[J]. *J Mech Phys Solids*, 1992, **40**(4): 723—737.

[8] Kanatani K I. Distribution of directional data and fabric tensors[J]. *Int J Engng Sci*, 1984, **22**(2): 149—164.

[9] Advani S G, Tucker Ⅲ C L. The use of tensors to describe and predict fiber orientation in short fiber composites[J]. *J Rheology*, 1987, **31**(8): 751—784.

[10] Advani S G, Tucker Ⅲ C L. Closure approximation for three_dimensional structure tensors[J]. J

Rheology, 1990, **34**(3): 367—386.

[11] Molinari A, Canova G R, Ahzi S. A self consistent approach of the large deformation polycrystal viscoplasticity[J]. Acta Metall, 1987, **35**(12): 2983—2994.

[12] Harren S V, Asaro R J. Nonuniform deformations in polycrystals and aspects of the validity of the Taylor model[J]. J Mech Phys Solids, 1989, **37**(2): 191—232.

[13] Adams B L, Field D P. A statistical theory of creep in polycrystalline materials[J]. Acta Metall Mater, 1991, **39**(10): 2405—2417.

[14] Krajcinovic D, Mastilovic S. Some fundamental issues of damage mechanics[J]. Mech Mat, 1995, **21**(3): 217—230.

[15] He Q C, Curnier A. A more fundamental approach to damaged elastic stress_strain relations[J]. Int J Solids Struct, 1995, **32**(10): 1433—1457.

[16] Chen M X, Zheng Q S, Yang W. A micromechanical model of texture induced orthotropy in planar crystalline polymers[J]. J Mech Phys Solids, 1996, **44**(2): 157—178.

[17] Zheng Q S, Collins I F. The relationship of damage variables and their evolution laws and micro_structural and physical properties[J]. Proc Roy Soc Lond A, 1998, **454**(1973): 1469—1498.

[18] Coleman B D, Gurtin M E. Thermodynamics with internal state variables[J]. J Chem Phys, 1967, **47**(2): 597—613.

[19] Noll W. A mathematical theory of the mechanical behaviour of continuous media[J]. Arch Ratl Mech Anal, 1958, **2**(2): 197—226.

[20] Noll W. A new mathematical theory of simple materials[J]. Arch Ratl Mech Anal, 1972, **48**(1): 1—50.

[21] Hahn T. Space_Group Symmetry [M]. In: International Tables for Crystallography, Vol, A, 2nd ed. Dordrecht: D Reidel, 1987.

[22] Chen M X, Yang W, Zheng Q S. Simulation of crack tip superblunting of semi_crystalline polymers [J]. J Mech Phys Solids, 1998, **46**(2): 337—356.

[23] Zheng Q S, Spencer A J M. Tensors which characterize anisotropies[J]. Int J Engng Sci, 1993, **31**(5): 679—693.

[24] Zheng Q S. Two_dimensional tensor function representations for all kinds of material symmetry[J]. Proc R Soc Lond A, 1993, **443**(1917): 127—138.

[25] Zheng Q S, Boehler J P. The description, classification, and reality of material and physical symmetries[J]. Acta Mech, 1994, **102**(1_4): 73—89.

[26] Zheng Q S. Theory of representations for tensor functions: A unified invariant approach to constitutive equations[J]. Appl Mech Rew, 1994, **47**(11): 554—587.

[27] Korn G A, Korn T M. Mathematical Handbook for Scientists and Engineers [M]. 2th Ed. New York: McGraw_Hill, 1968.

[28] Ryser H J. Combinatorial Mathematics [M]. New York: The Mathematical Association of America, 1963.

[29] Zheng Q S. On the roles of initial and induced anisotropies[A]. In: D F Parker, A H England Eds. IUTAM Symposium on Anisotropy, Inhomogeneity and Nonlinearity in Solid Mechanics [C]. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1995, 57—62.

[30] Barut A O, Raczka R. Theory of Group Representations and Applications [M]. 2nd Ed. Warszawa: Polish Scientific Publishers, 1980.

[31] Br└cker T, Tom Dieck T. Representations of Compact Lie Groups [M]. New York: Springer_Verlag, 1985.

[32] Spencer A J M. A note on the decomposition of tensors into traceless symmetric tensors[J]. Int J Engng Sci, 1970, **8**(6): 475—481.
[33] Hannabuss K C. The irreducible components of homogeneous functions and symmetric tensors[J]. J Inst Maths Applics, 1974, **14**(1): 83—88.
[34] Zheng Q S, Zou W N. Irreducible decompositions of physical tensors of high orders[J]. J Engrg Math, 2000, **37**(1_3): 273—288.
[35] Zou W N, Zheng Q S, Rychlewski J, et al. Orthogonal irreducible decomposition of tensors of high orders[J]. Math Mech Solids, 2001. (in Press)

Orientation Distribution Functions for Microstructures of Heterogeneous Materials(Ⅰ)— Directional Distribution Functions and Irreducible Tensors

ZHENG Quan_shui, ZOU Wen_nan
(Department of Engineering Mechanics, Tsinghua University, Beijing 100084, P R China)

Abstract: In this two_part paper, a thorough investigation is made on Fourier expansions with irreducible tensorial coefficents for orientation distribution functions (ODFs) and crystal orientation distribution functions (CODFs), which are scalar functions defined on the unit sphere and the rotation group, respectively. Recently it has been becoming clearer and clearer that concepts of ODF and CODF play a dominant role in various micromechanically_based approaches to mechanical and physical properties of heterogeneous materials. The theory of group representations shows that a square integrable ODF can be expanded as an absolutely convergent Fourier series of spherical harmonics and these spherical harmonics can further be expressed in terms of irreducible tensors. The fundamental importance of such irreducible tensorial coefficients is that they characterize the macroscopic or overall effect of the orientation distribution of the size, shape, phase, position of the material constitutions and defects. In Part (Ⅰ), the investigation about the irreducible tensorial Fourier expansions of ODFs defined on the N_dimensional (N_D) unit sphere is carried out. Attention is particularly paid to constructing simple expressions for 2_ and 3_D irreducible tensors of any orders in accordance with the convenience of arriving at their restricted forms imposed by various point_group (the synonym of subgroup of the full orthogonal group) symmetries. In the continued work (Part Ⅱ), the explicit expression for the irreducible tensorial expansions of CODFs is established. The restricted forms of irreducible tensors and irreducible tensorial Fourier expansions of ODFs and CODFs imposed by various point_group symmetries are derived.

Key words: orientation distribution function; irreducible tensor; tensorial Fourier expansion; heterogeneous material; microstructure