



ElasticPOST 用户手册

1.0 版本

廖名情

FGMS 课题组@哈尔滨工业大学

Liaomq1900127@163.com

目 录

目 录.....	I
第 1 章 功能说明.....	1
第 2 章 使用条例.....	2
第 3 章 ElasticPOST 工具箱安装.....	3
第 4 章 弹性各向异性理论.....	4
4.1 晶体类型.....	4
4.1.1 三维晶体.....	4
4.1.2 二维晶体.....	6
4.2 Voigt-Reuss-Hill 近似.....	6
4.3 弹性常数的各向异性.....	7
4.4 硬度的弹性常数表示.....	8
4.5 二维材料的弹性常数.....	9
第 5 章 图形界面使用指导.....	10
5.1 整体界面.....	10
5.2 工具栏.....	10
5.3 数据输入区.....	11
5.4 数据保存区.....	13
5.5 绘图区.....	13
5.6 图形定制区.....	14
5.6.1 三维视角区.....	15
5.6.2 切片区.....	15
5.6.3 图形设置区.....	15
5.7 图形保存区.....	16
5.8 提示区.....	17
第 6 章 函数手册.....	18
6.1 Bulk_3D.....	18
6.2 Young_2DM.....	18
6.3 Young_3D.....	18
6.4 Shear_2DM.....	19
6.5 Shear_3D.....	19
6.6 Shear_4D.....	20
6.7 Poisson_2DM.....	20

6.8 Poisson_3D	20
6.9 Poisson_4D	21
6.10 Hardness.....	21
6.11 Hardness_3D	21
6.12 ElasticPlot_2D	22
6.13 ElasticPlot_2DM.....	22
6.14 ElasticPlot_3D	23
6.15 Plot_Slice	23
6.16 Elastic_Read	24
6.17 D2toD3.....	25
6.18 D3toD2.....	25
6.19 Ang2Direction.....	25
6.20 Direction2Ang.....	26
6.21 ElasticVRH3D	26
6.22 StableofMechanical.....	27

第1章 功能说明

本软件(ElasticPOST)主要是对计算得到的弹性刚度矩阵进行后处理，主要功能如下：

1. 对任意对称性的三维材料可以体弹模量、杨氏模量、剪切模量、泊松比等与弹性刚度矩阵相关量进行三维各向异性绘图；
2. 对任意对称性的二维材料可以对杨氏模量、剪切模量、泊松比进行弹性常数二维各向异性图的绘制；
3. 可以按照一定格式读取 EXCEL、TXT 以及 MAT 文件，以达到批量处理的目的；
4. 可以根据 Voigt-Reuss-Hill 近似对上述量进行计算，并可以将数据进行保存并与 MATLAB 工作空间交互；
5. 对三维图形提供多种图形属性的调控操作，如从最高位置看，切片等；
6. 对图片的输出提供.tif、.jpg、.emf 等多种位图格式以及.eps、.pdf、.fig 等多种矢量格式。
7. 提供界面操作与命令操作两种模式。
8. 对常见错误有一定提示。

第2章 使用条例

本软件(ElasticPOST)已申请软件著作权，仅可以用作学术用途，不可以用作商业用途。若学术工作使用到本软件，请提供本软件下载地址，并参考如下文章。

若有用户针对其进行二次开发，请联系作者(liaomq1900127@163.com)

第3章 ElasticPOST 工具箱安装

1. 通过添加路径方式运行

将软件包解压到 MATLAB 的 toolbox 路径（其实也可以是任意路径）下，再将相应路径添加到 MATLAB 路径即可。

添加路径的方式如下：



图 3-1 设置路径-1

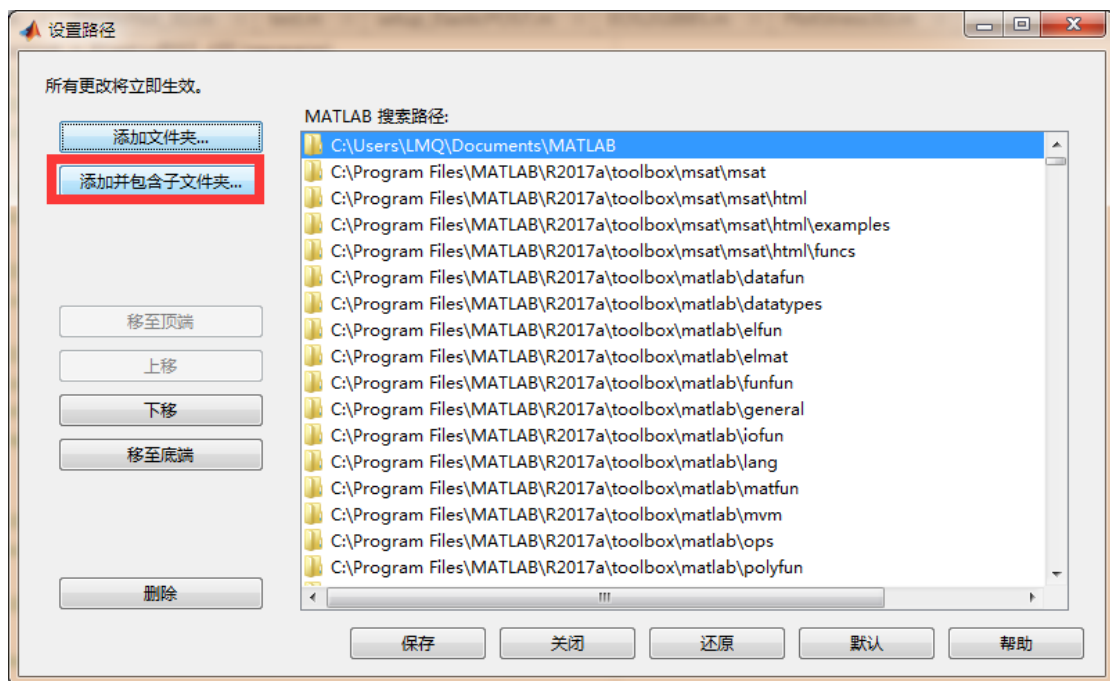


图 3-2 设置路径-2

2. 通过设定当前路径运行

将软件包的路径设置为当前路径，然后在当前路径下运行。

第4章 弹性各向异性理论

本章主要介绍本软件用到的理论背景。

4.1 晶体类型

4.1.1 三维晶体

三维晶体结构如图 4-1 所示，其相应的独立晶格常数如图 4-2 所示。

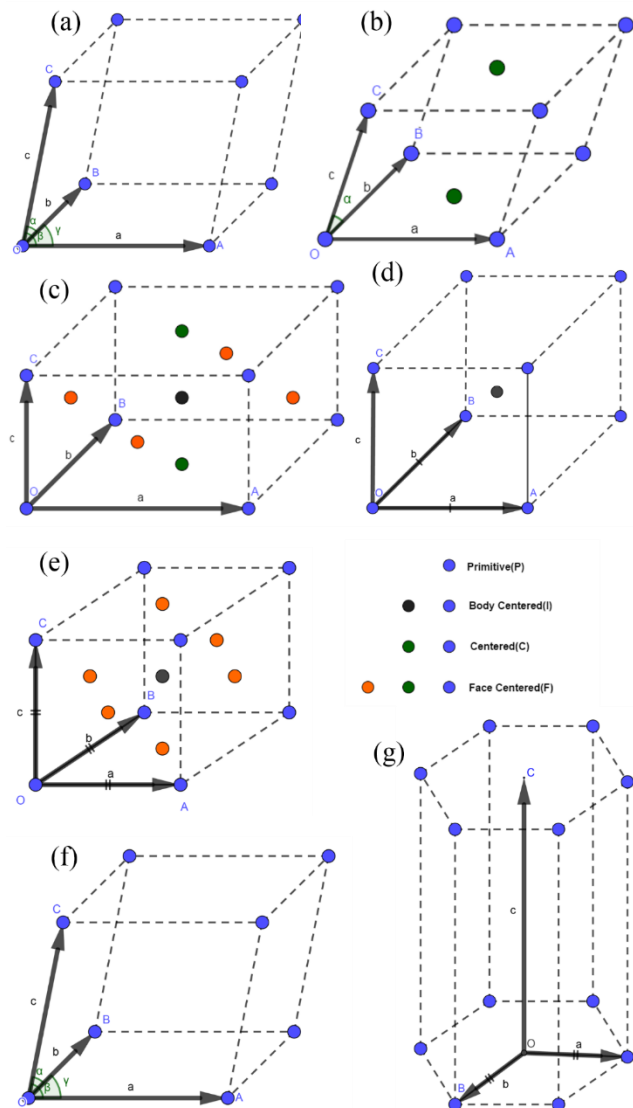


图 4-1 三维晶格示意图

(a)三斜晶系；(b)单斜晶系；(c)正交晶系；(d)四方晶系；(e)立方晶系；(f)菱方晶系；(g)六方晶系

(a)Triclinic; (b)Monoclinic; (c)Orthorhombic; (d)Tetragonal; (e)Cubic; (f)Trigonal; (g)Hexagonal

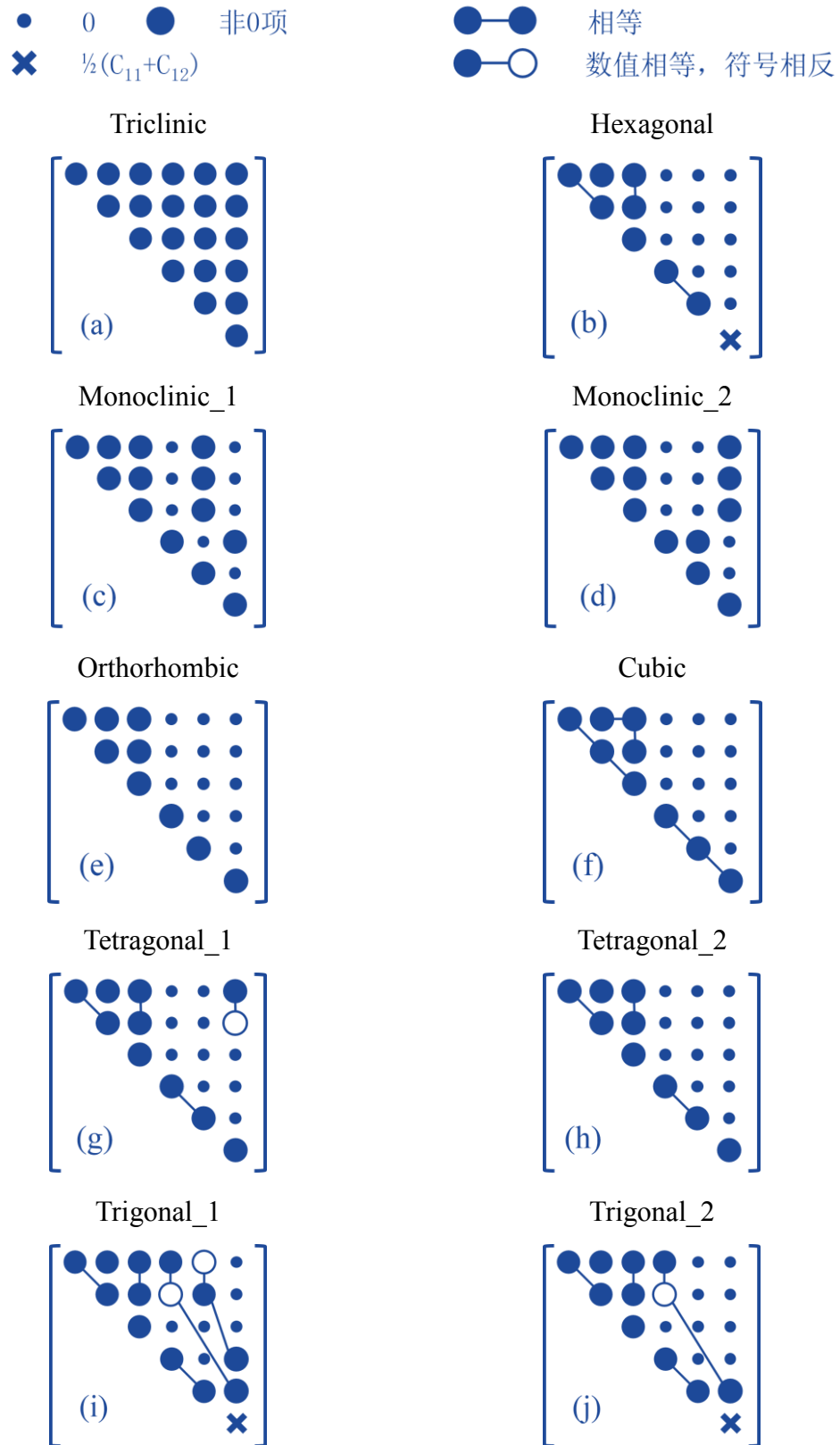


图 4-2 不同三维晶系的独立晶格常数

4.1.2 二维晶体

二维材料的晶体结构如图所示，其独立的晶格常数如图所示（其中 C_{33} 对应于三维材料中的 C_{66} ）。

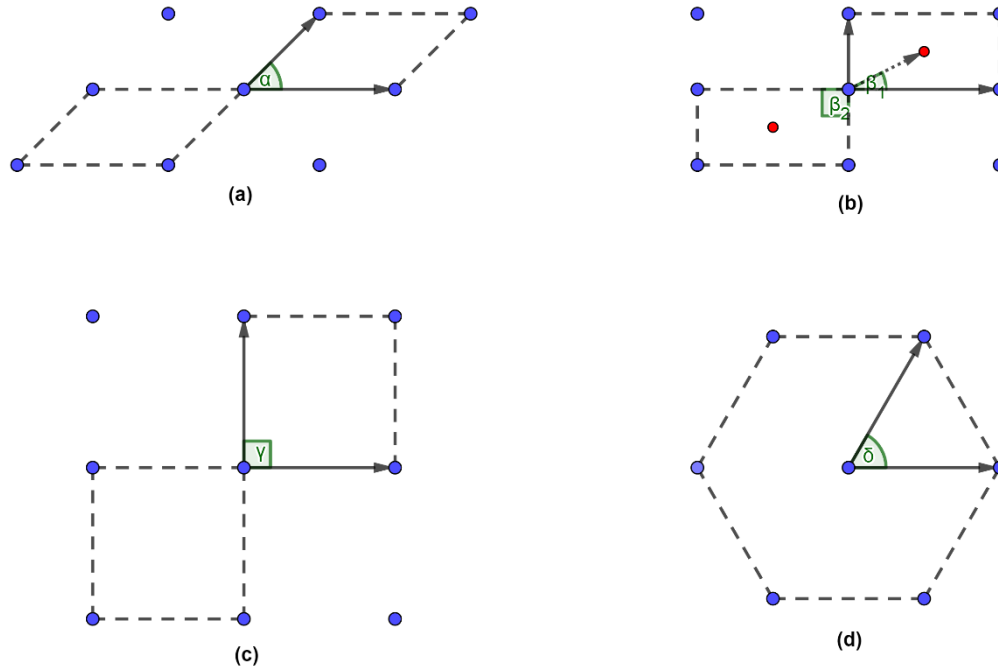


图 4-3 二维晶格示意图

(a) 倾斜晶系；(b) 矩形晶系；(c) 正方晶系；(d) 六方晶系

(a) Oblique; (b) Rectangular; (c) Square; (d) Hexagonal

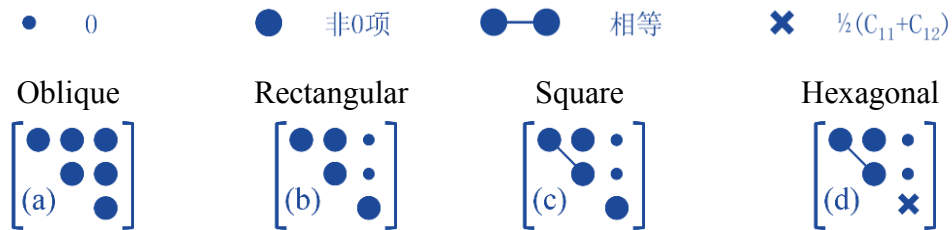


图 4-4 不同二维晶系独立晶格常数（其中 C_{33} 对应三维材料中的 C_{66} ）

4.2 Voigt-Reuss-Hill 近似

多晶弹性常数通过弹性刚度系数(C_{ij})与弹性柔度系数(S_{ij})，采用 Voigt-Reuss-Hill[1]近似进行计算，其具体计算公式如公式(4-1)到(4-3)所示。

$$\begin{cases} B_V = \frac{A+2B}{3}, B_R = \frac{1}{3a+6b}, B = \frac{1}{2}(B_R + B_V) \\ G_V = \frac{A-B+3C}{5}, G_R = \frac{5}{4a-4b+3c}, G = \frac{1}{2}(G_R + G_V) \end{cases} \quad (4-1)$$

$$\begin{cases} A = \frac{C_{11} + C_{22} + C_{33}}{3}, B = \frac{C_{23} + C_{13} + C_{12}}{3}, C = \frac{C_{44} + C_{55} + C_{66}}{3} \\ a = \frac{S_{11} + S_{22} + S_{33}}{3}, b = \frac{S_{23} + S_{13} + S_{12}}{3}, c = \frac{S_{44} + S_{55} + S_{66}}{3} \\ S_{ij} = C_{ij}^{-1} \end{cases} \quad (4-2)$$

$$E = \left(\frac{1}{3G} + \frac{1}{9B} \right)^{-1}, \nu = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{3G}{3B+G} \right) \quad (4-3)$$

4.3 弹性常数的各向异性

弹性常数的各向异性采用 Marmier[2]描述的方法，采用 Voigt 标记，即

表 4-1 张量标记与 Voigt 标记

张量标记	11	22	33	23,32	31,13	12,21
Voigt 标记	1	2	3	4	5	6

$$S_{pq} = \begin{cases} S_{ijkl} & \text{both } p \text{ and } q \text{ equal } 1 \text{ or } 2 \text{ or } 3 \\ 2S_{ijkl} & \text{either } p \text{ or } q \text{ are } 4, 5 \text{ or } 6 \text{ (and the other is } 1, 2 \text{ or } 3) \\ 4S_{ijkl} & \text{both } p \text{ and } q \text{ are } 4, 5 \text{ or } 6 \end{cases} \quad (4-4)$$

而张量的旋转公式可以用如下公式进行：

$$T'_{\alpha\beta\gamma\delta} = r_{\alpha i} r_{\beta j} r_{\gamma k} r_{\delta l} T_{ijkl} \quad (4-5)$$

其中：

$$r_{ai} = \begin{cases} a_i & i \text{ equal } 1 \text{ or } 2 \text{ or } 3 \\ b_i & i \text{ equal } 4 \text{ or } 5 \text{ or } 6 \end{cases} \quad (4-6)$$

式中：

$$a = \begin{bmatrix} \sin \theta \cos \varphi \\ \sin \theta \sin \varphi \\ \cos \theta \end{bmatrix} \quad (4-7)$$

$$b = \begin{bmatrix} \cos \theta \cos \varphi \cos \psi - \sin \varphi \sin \psi \\ \cos \theta \sin \varphi \cos \psi + \cos \varphi \sin \psi \\ -\sin \theta \cos \psi \end{bmatrix} \quad (4-8)$$

其中 θ 、 φ 、 ψ 为角度值，其范围分别为 $[0, \pi]$ 、 $[0, 2\pi]$ 和 $[0, 2\pi]$ ，其示意图如图 4-5 所示。

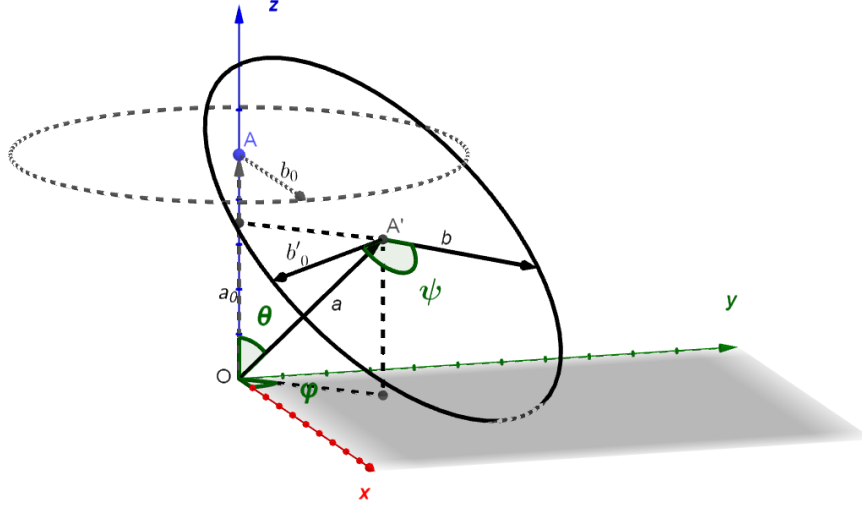


图 4-5 欧拉角

通过上述旋转既可以求得任意方向 S_{ijkl} 。

而对于各个弹性常数可以通过如下公式求得。

$$\begin{cases} B(\theta, \varphi) = \frac{1}{\beta(\theta, \varphi)} = \frac{1}{S_{ijkk} a_i a_j} \\ E(\theta, \varphi) = \frac{1}{S'_{11}(\theta, \varphi)} = \frac{1}{a_i a_j a_k a_l S_{ijkl}} \\ G(\theta, \varphi, \psi) = \frac{1}{4S'_{66}(\theta, \varphi, \psi)} = \frac{1}{4a_i b_j a_k b_l S_{ijkl}} \\ \nu(\theta, \varphi, \psi) = -\frac{S'_{12}(\theta, \varphi, \psi)}{S'_{11}(\theta, \varphi, \psi)} = -\frac{a_i a_j b_k b_l S_{ijkl}}{a_i a_j a_k a_l S_{ijkl}} \end{cases} \quad (4-10)$$

式中下标 (i, j, k, l) 是张量表示法，表示对其范围内求和，且其取值均为 $[1, 2, 3]$ 。

4.4 硬度的弹性常数表示

材料的硬度采用 Chen[3]和 Tian[4]描述的方法，即有：

$$\begin{cases} H^C = 2(k^2 G)^{0.585} - 3 \\ H^T = 0.92k^{1.137} G^{0.708} \end{cases} \quad (4-11)$$

其中 H 为维氏硬度，GPa；

B 为体弹模量，GPa；

G 为剪切模量，GPa；

$k = G/B$ 。

4.5 二维材料的弹性常数

由于为二维材料，不考虑体弹模量与硬度，其弹性常数采用 Jasiukiewicz[5] 描述的方法，即有：

$$\begin{cases} 1/E(\varphi) = S_{11} \cos^4 \varphi + S_{22} \sin^4 \varphi + (S_{33} + 2S_{12}) \cos^2 \varphi \sin^2 \varphi + 2S_{13} \cos^3 \varphi \sin \varphi + 2S_{23} \cos \varphi \sin^3 \varphi \\ \nu(\varphi) / E(\varphi) = (S_{11} + S_{22} - S_{33}) \cos^2 \varphi \sin^2 \varphi + S_{12} (\cos^4 \varphi + \sin^4 \varphi) + (S_{13} - S_{23}) (\cos \varphi \sin^3 \varphi - \cos^3 \varphi \sin \varphi) \\ 1/4G(\varphi) = (S_{11} + S_{22} - 2S_{12}) \cos^2 \varphi \sin^2 \varphi + S_{33} (\cos^2 \varphi - \sin^2 \varphi)^2 / 4 - (S_{13} - S_{23}) (\cos^3 \varphi \sin \varphi - \cos \varphi \sin^3 \varphi) \end{cases} \quad (4-12)$$

第5章 图形界面使用指导

本章对软件图形界面操作进行简要的解释与说明。

5.1 整体界面

软件整体界面如图 5-1 所示，主要分为工具栏、数据输入区、数据保存区、绘图区、图形定制区、图片保存区、提示区。

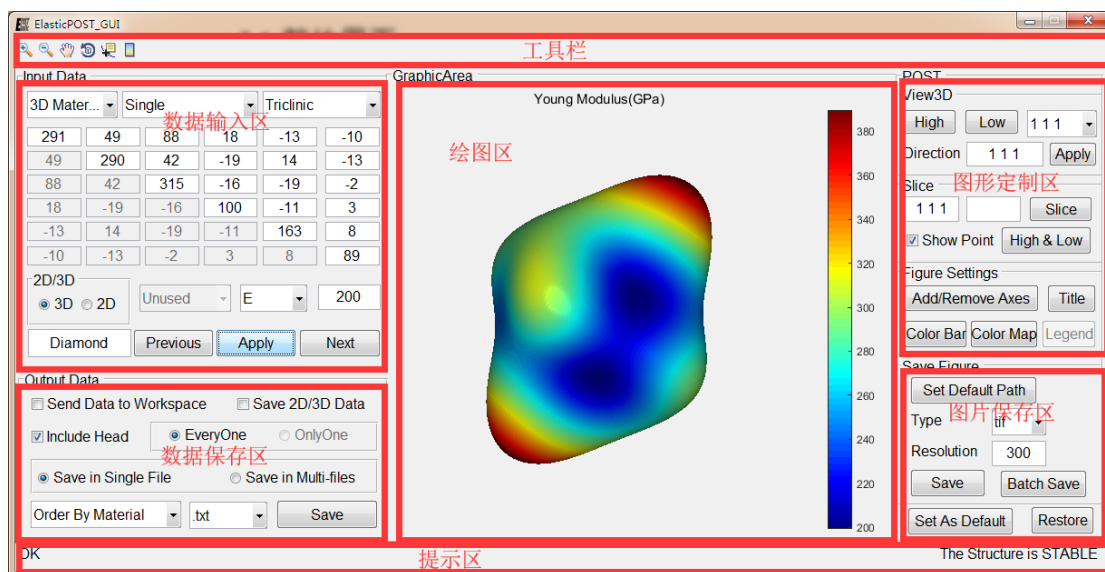


图 5-1 整体界面

5.2 工具栏

工具栏如图 5-2 所示，主要保留了 MATLAB 自带的几个常用工具，分别为放大工具、缩小工具、平移工具、旋转工具、数据读取工具、颜色条工具，以实现图像的一些简单操作，如放大，缩小等。



图 5-2 工具栏

放大工具：针对绘图区图像进行放大操作；

缩小工具：针对绘图区图像进行缩小操作；

平移工具：对绘图区图像进行平移操作；

旋转工具：对绘图区图像进行旋转操作；

数据读取工具：对绘图区的图像上的数据点进行读取；

颜色条工具：针对三维图形，控制颜色条的显示或隐藏；

5.3 数据输入区

数据输入区如图 5-3 所示。以实现弹性刚度矩阵的读入以及初始绘图操作，具体介绍如下。

图 5-3 数据输入区

①材料选择：

3D Material: 三维材料

2D Material: 二维材料

②数据读入模式选择：

Single: 单个材料的弹性刚度矩阵的输入

FromFile: 从文件中读取弹性刚度矩阵

FromWorkSpace: 从 MATLAB 工作空间读取弹性刚度矩阵

③晶体结构类型选择/文件类型选择：

数据读入模式为 Single 时：

材料选择为 3D 材料：

Cubic: 立方体系，独立晶格常数: C11、C12、C44

Tetragonal_1: 四方体系，独立晶格常数: C11、C12、C13、C33、C44、C66

Tetragonal_2: 四方体系, 独立晶格常数: C11、C12、C13、C16、C33、C44、C66
 Orthorhombic: 正交体系, 独立晶格常数: C11、C12、C13、C22、C23、C33、C44、C55、C66
 Hexagonal: 六方体系, 独立晶格常数: C11、C12、C13、C33、C44
 Trigonal_1: 三方体系, 独立晶格常数: C11、C12、C13、C14、C33、C44、C66
 Trigonal_2: 三方体系, 独立晶格常数: C11、C12、C13、C14、C15、C33、C44、C66
 Monoclinic: 单斜体系, 独立晶格常数: C11、C12、C13、C15、C22、C23、C25、C33、C35、C44、C46、C55、66
 Triclinic: 三斜体系, 独立晶格常数: C11、C12、C13、C14、C15、C16、C22、C23、C24、C25、C26、C33、C34、C35、C36、C44、C45、C46、C55、C56、C66

材料选择为 2D 材料时:

Hexagonal: 六方体系, 独立晶格常数: C11、C12
 Square: 正方体系, 独立晶格常数: C11、C12、C66
 Rectangular: 矩形体系, 独立晶格常数: C11、C12、C22、C66
 Oblique: 倾斜体系, 独立晶格常数: C11、C12、C16、C22、C26、C66

数据读入模式为 FromWorkSpace 时, 此处显示 MATLAB 工作空间变量的名字, 尺寸以及类型。

④弹性刚度矩阵的显示或输入: 当输入模式为 Single 时, 可以手动输入弹性刚度矩阵, 当为其他时, 不可输入, 只能显示

⑤绘图类型选择: 3D 为绘制三维图形; 2D 为绘制坐标平面内图

⑥绘图平面, 只对三维材料生效

绘图类型为 3D 时:

对于绘图属性⑦为 *B* 或 *E* 或 *H* 时, 未生效, 当 *G* 或 ν 时:

Ave: 绘制 *G* 或 ν 的平均值
 Min: 绘制 *G* 或 ν 的最小值
 Max: 绘制 *G* 或 ν 的最大值
 All: 绘制 *G* 或 ν 的上述三个面

绘图类型为 2D 时:

xy: xoy 平面图
 xz: xoz 平面图
 yz: yoz 平面图

⑦绘图属性:

B: 体弹模量, GPa
E: 杨氏模量, GPa
G: 剪切模量, GPa
 ν : 泊松比
H: 硬度, GPa

- ⑧绘图数据点：对于三维图形来说表示每个坐标轴方向的数据点数目，对于二维图表示整个图形的数据点数目，默认 200
- ⑨名称：表示该材料的名称，只对 Single 时候生效
- ⑩绘图：对上述设置进行绘图，对于多个弹性刚度矩阵(如从文件中读取或从工作空间读取时)，可以利用 next 与 previous 对下一个与上一个进行浏览。

5.4 数据保存区

数据保存区如图 5-4 所示，主要实现对数据的保存操作。

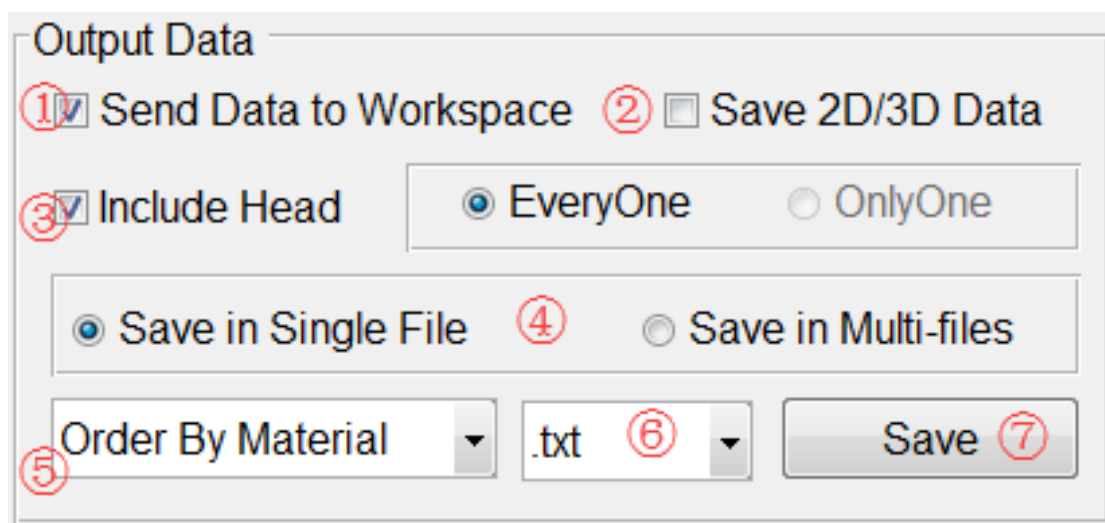


图 5-4 数据保存区

- ①是否将所得数据输出到工作空间
- ②是否保存二维或三维数据
- ③是否包括头文件
- ④保存为单个文件或者多个文件
- ⑤对多晶弹性常数的排序（针对保存到单个文件用）
- Order By Material：即根据材料排序
- Order By Property：即根据属性排序
- ⑥保存文件的后缀
- .txt：文本文件
- .xlsx：EXCLE 文件格式
- .mat：MATLAB 数据文件格式
- ⑦保存按钮：进行保存

5.5 绘图区

绘图区界面如图 5-5 所示，该区域主要对图形进行显示，可以结合工具栏工具对该去显示的图形进行操作。

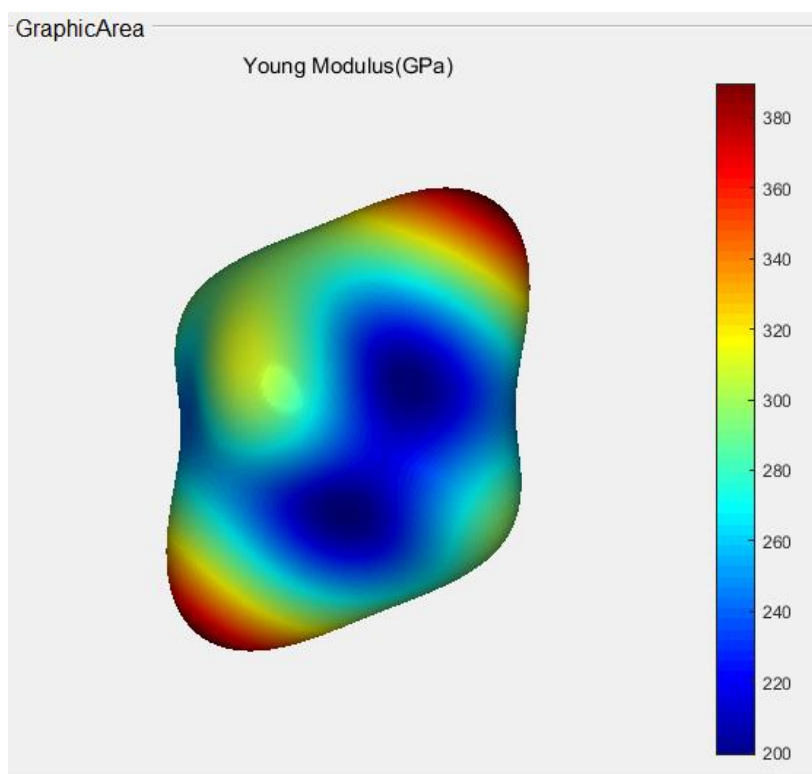


图 5-5 绘图区

5.6 图形定制区

图形定制区整体界面如所示，其主要分为三部分：三维视角区、切片区以及图形设置区。

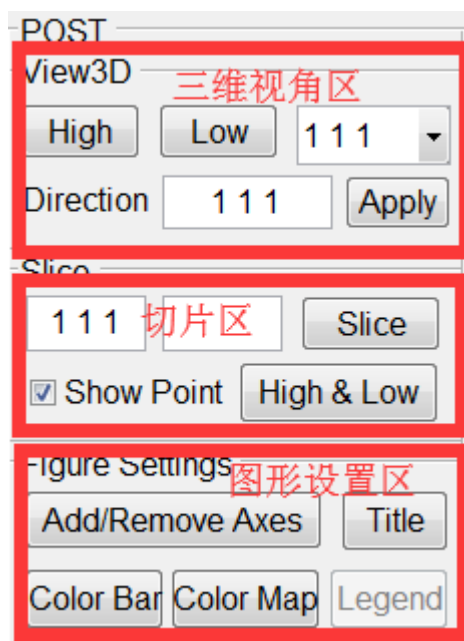


图 5-6 图形定制区

5.6.1 三维视角区

三维视角区如图 5-7 所示，其主要功能为实现三维图形的不同方位的观看。

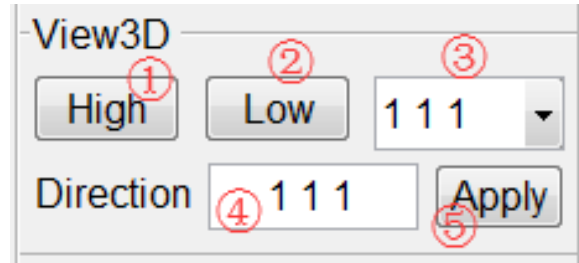


图 5-7 三维视角区

- ①从属性最大值处观看
- ②从属性最小值处观看
- ③从内置的一些常见的方向观看
- ④指定任意的方向，可以是三个浮点数，中间可以以空格或逗号或分号分隔
- ⑤从上述指定的任意方向进行观看

5.6.2 切片区

切片区如图 5-8 所示，其主要功能为对三维图进行切片显示。

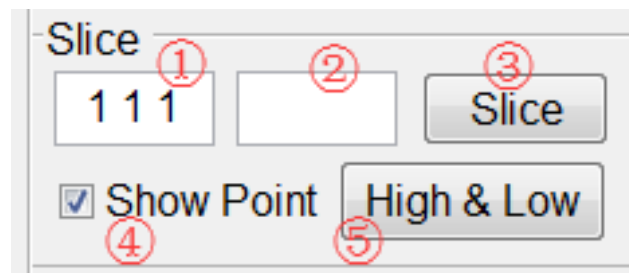


图 5-8 切片区

- ①和②控制切片的方向，三个浮点数，中间可以用空格或逗号或者分号分隔，若有一个留空时，切片方向为指定方向的法向，若指定两个方向时，切片方向指定两个方向所确定的面
- ③对上述指定的面切片
- ④对⑤操作显示最高点与最低点
- ⑤对最高点方向与最低点方向所确定的面进行切面

5.6.3 图形设置区

图形设置区如图 5-9 所示，其主要功能为对图形进行一个附加功能的选项。

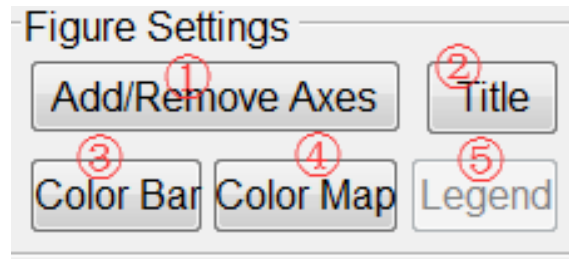


图 5-9 图形设置区

- ①显示或隐藏坐标轴
- ②显示或隐藏标题
- ③显示或隐藏 color bar
- ④更改 color map
- ⑤显示或隐藏图例

5.7 图形保存区

图形保存区如图 5-10 所示，其主要功能为实现图形与设置的保存。

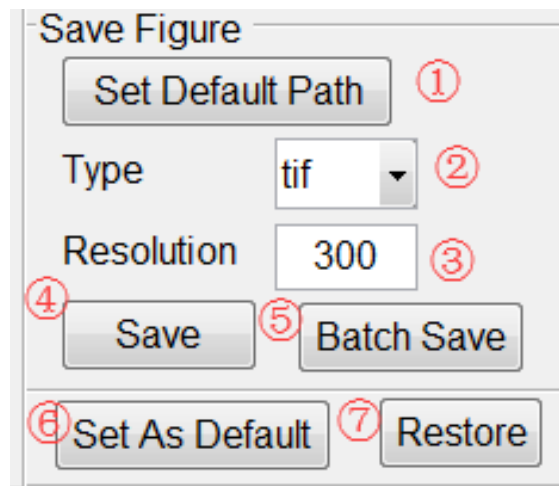


图 5-10 图形保存区

- ①设置保存路径
- ②保存图片的格式
 - tif: 保存图片为 tif 格式，位图
 - jpg: 保存图片为 jpg 格式，位图
 - eps: 保存图片为 eps 格式，矢量图
 - fig: 保存图片为 fig 格式，矢量图
 - pdf: 保存图片为 pdf 格式，矢量图
 - emf: 保存图片为 emf 格式，位图
- ③对位图设置分辨率
- ④保存当前单个图片
- ⑤批量保存图片
- ⑥设置当前设置为默认设置
- ⑦恢复默认设置

5.8 提示区

提示区如图 5-11 所示，其主要功能为对操作出现的错误与警告进行提示，错误与警告一般用红色的字表示。



图 5-11 提示区

第6章 函数手册

本部分介绍命令行模式下的各个函数功能、输入以及输出。

6.1 Bulk_3D

$$B = \text{Bulk_3D}(S, \theta, \phi)$$

功能：根据柔度系数矩阵(S), 计算与 Z 轴的夹角为 θ , 以及与 X 轴的夹角为 ϕ 位置处的三维材料体弹模量 B 。

输入：

输入	说明	备注
S	柔度系数	$S=C^{-1}$, GPa^{-1}
θ	与 Z 轴夹角	$[0, \pi]$, 可以为一个数或一个矩阵, 与 ϕ 同尺寸
ϕ	与 X 轴夹角	$[0, 2\pi]$, 可以为一个数或一个矩阵

输出：

输出	说明	备注
B	三维材料体弹模量	单位 GPa , 与输入的 θ 同尺寸

6.2 Young_2DM

$$E = \text{Young_2DM}(S, \phi)$$

功能：根据柔度系数矩阵(S), 计算与 X 轴的夹角为 ϕ 位置处的二维材料的杨氏模量 E 。

输入：

输入	说明	备注
S	柔度系数	$S=C^{-1}$, GPa^{-1}
ϕ	与 X 轴夹角	$[0, 2\pi]$, 可以为一个数或一个矩阵

输出：

输出	说明	备注
E	二维材料杨氏模量	单位 GPa , 与输入的 ϕ 同尺寸

6.3 Young_3D

$$E = \text{Young_3D}(S, \theta, \phi)$$

功能：根据柔度系数矩阵(S), 计算与 Z 轴的夹角为 θ , 以及与 X 轴的夹角为 ϕ 位置处的三维材料的杨氏模量 E 。

输入：

输入	说明	备注
S	柔度系数	$S=C^{-1}$, GPa^{-1}
$theta$	与 Z 轴夹角	$[0, \pi]$, 可以为一个数或一个矩阵, 与 phi 同尺寸
phi	与 X 轴夹角	$[0, 2\pi]$, 可以为一个数或一个矩阵
输出:		
输出	说明	备注
E	三维材料杨氏模量	单位 GPa , 与输入的 $theta$ 同尺寸

6.4 Shear_2DM

$$G = \text{Shear_}3D(S, phi)$$

功能: 根据柔度系数矩阵(S), 计算与 X 轴的夹角为 phi 位置处的二维材料的剪切模量 G 。

输入:

输入	说明	备注
S	柔度系数	$S=C^{-1}$, GPa^{-1}
phi	与 X 轴夹角	$[0, 2\pi]$, 可以为一个数或一个矩阵
输出:		
输出	说明	备注
G	二维材料剪切模量	单位 GPa , 与输入的 phi 同尺寸

6.5 Shear_3D

$$[Gmin, Gave, Gmax] = \text{Shear_}3D(S, theta, phi)$$

功能: 根据柔度系数矩阵(S), 计算与 Z 轴的夹角为 $theta$, 以及与 X 轴的夹角为 phi 位置处的三维材料的剪切模量 G 。

输入:

输入	说明	备注
S	柔度系数	$S=C^{-1}$, GPa^{-1}
$theta$	与 Z 轴夹角	$[0, \pi]$, 可以为一个数或一个矩阵, 与 phi 同尺寸
phi	与 X 轴夹角	$[0, 2\pi]$, 可以为一个数或一个矩阵
输出:		
输出	说明	备注
$Gmin$	三维最小剪切模量	单位 GPa , 与输入的 $theta$ 同尺寸
$Gave$	三维平均剪切模量	单位 GPa , 与输入的 $theta$ 同尺寸
$Gmax$	三维最大剪切模量	单位 GPa , 与输入的 $theta$ 同尺寸

6.6 Shear_4D

$$G = \text{Shear_4D}(S, \theta, \phi, \chi)$$

功能：根据柔度系数矩阵(S), 计算与 Z 轴的夹角为 θ , 以及与 X 轴的夹角为 ϕ 位置处的三维材料的剪切模量 G 。

输入：

输入	说明	备注
S	柔度系数	$S=C^{-1}$, GPa^{-1}
θ	与 Z 轴夹角	$[0, \pi]$, 可以为一个数或一个矩阵, 与 ϕ 同尺寸
ϕ	与 X 轴夹角	$[0, 2\pi]$, 可以为一个数或一个矩阵
χ		$[0, 2\pi]$, 可以为一个数或一个矩阵, 与 ϕ 同尺寸

输出：

输出	说明	备注
G	三维剪切模量	单位 GPa , 与输入的 θ 同尺寸

6.7 Poisson_2DM

$$\nu = \text{Poisson_2DM}(S, \phi)$$

功能：根据柔度系数矩阵(S), 计算与 X 轴的夹角为 ϕ 位置处的二维材料的泊松比 G 。

输入：

输入	说明	备注
S	柔度系数	$S=C^{-1}$, GPa^{-1}
ϕ	与 X 轴夹角	$[0, 2\pi]$, 可以为一个数或一个矩阵

输出：

输出	说明	备注
ν	二维材料泊松比	与输入的 ϕ 同尺寸

6.8 Poisson_3D

$$[\nu_{\min}, \nu_{\text{ave}}, \nu_{\max}] = \text{Poisson_3D}(S, \theta, \phi)$$

功能：根据柔度系数矩阵(S), 计算与 Z 轴的夹角为 θ , 以及与 X 轴的夹角为 ϕ 位置处的三维材料的泊松比 ν 。

输入：

输入	说明	备注
S	柔度系数	$S=C^{-1}$, GPa^{-1}
θ	与 Z 轴夹角	$[0, \pi]$, 可以为一个数或一个矩阵, 与 ϕ 同尺寸
ϕ	与 X 轴夹角	$[0, 2\pi]$, 可以为一个数或一个矩阵

输出:

输出	说明	备注
G_{min}	三维材料最小剪切模量	与输入的 $theta$ 同尺寸
G_{ave}	三维材料平均剪切模量	与输入的 $theta$ 同尺寸
G_{max}	三维材料最大剪切模量	与输入的 $theta$ 同尺寸

6.9 Poisson_4D

$$\nu = \text{Poisson_4D}(S, \theta, \phi, \chi)$$

功能: 根据柔度系数矩阵(S), 计算与 Z 轴的夹角为 θ , 以及与 X 轴的夹角为 ϕ 位置处的三维材料的泊松比 ν 。

输入:

输入	说明	备注
S	柔度系数	$S=C^{-1}$, GPa^{-1}
θ	与 Z 轴夹角	$[0, \pi]$, 可以为一个数或一个矩阵, 与 ϕ 同尺寸
ϕ	与 X 轴夹角	$[0, 2\pi]$, 可以为一个数或一个矩阵
χ		$[0, 2\pi]$, 可以为一个数或一个矩阵, 与 ϕ 同尺寸

输出:

输出	说明	备注
ν	泊松比	与输入的 θ 同尺寸

6.10 Hardness

$$H = \text{Hardness}(G, B)$$

功能: 根据体弹模量(B)与剪切模量(G)计算硬度(H)。

输入:

输入	说明	备注
B	体弹模量	GPa , 可以为一个数或矩阵
G	剪切模量	GPa , 与 B 同尺寸

输出:

输出	说明	备注
H	硬度	GPa , 与 B 同尺寸

6.11 Hardness_3D

$$H = \text{Hardness_3D}(S, \theta, \phi)$$

功能: 根据柔度系数矩阵(S), 计算与 Z 轴的夹角为 θ , 以及与 X 轴的夹角为

ϕ 位置处的三维材料的硬度 H 。

输入:

输入	说明	备注
S	柔度系数	$S=C^{-1}$, GPa
θ	与 Z 轴夹角	$[0, \pi]$, 可以为一个数或一个矩阵, 与 ϕ 同尺寸
ϕ	与 X 轴夹角	$[0, 2\pi]$, 可以为一个数或一个矩阵

输出:

输出	说明	备注
H	硬度	单位 GPa, 与输入的 θ 同尺寸

6.12 ElasticPlot_2D

$handles = ElasticPlot_2D(handles, S, n, flag, flag_plane, flag_save, Name)$

功能: 根据柔度系数矩阵(S), 在给定图形句柄上绘制二维图形。

输入:

输入	说明	备注
$handles$	图像句柄	
S	柔度系数	$S=C^{-1}$, GPa
n	每个维度的数据 点个数	整数, 默认为 200
$flag$	计算的属性类别	{'B', 'G', 'E', 'v', 'H'} 其中之一
$flag_plane$	绘制的平面	{'xy', 'xz', 'yz'} 其中之一
$flag_save$	是否保存	0 不保存, 1 保存
$Name$	保存的名字	字符串, 保存的名字

输出:

输出	说明	备注
$handles$	图像句柄	更新的图形句柄, 其中更新了 X, Y, V

6.13 ElasticPlot_2DM

$handles = ElasticPlot_2DM(handles, S, n, flag, flag_save, Name)$

功能: 根据柔度系数矩阵(S), 在给定图形句柄上绘制二维材料的二维图形。

输入:

输入	说明	备注
$handles$	图像句柄	
S	柔度系数	$S=C^{-1}$, GPa
n	每个维度的数据	整数, 默认为 200

	点个数	
<i>flag</i>	计算的属性类别	{'G', 'E', 'v'}其中之一
<i>flag_save</i>	是否保存	0 不保存, 1 保存
<i>Name</i>	保存的名字	字符串, 保存的名字
输出:		
输出	说明	备注
<i>handles</i>	图像句柄	更新的图形句柄, 其中更新了 X, Y, V

6.14 ElasticPlot_3D

handles = ElasticPlot_3D(handles, S, n, flag, flag_amm, flag_save, Name)

功能: 根据柔度系数矩阵(*S*), 在给定图形句柄上绘制三维图形。

输入:

输入	说明	备注
<i>handles</i>	图像句柄	
<i>S</i>	柔度系数	$S=C^{-1}$, GPa
<i>n</i>	每个维度的数据 点个数	整数, 默认为 200
<i>flag</i>	计算的属性类别	{'G', 'E', 'v'}其中之一
<i>flag_amm</i>	针对 G 和 v 时的 表现	Ave, Min, Max, All 其中之一
<i>flag_save</i>	是否保存	0 不保存, 1 保存
<i>Name</i>	保存的名字	字符串, 保存的名字
输出:		
输出	说明	备注
<i>handles</i>	图像句柄	更新的图形句柄, 其中更新了 X, Y, V

6.15 Plot_Slice

handles = Plot_Slice(handles, S, n, flag, slice_plane, flag_save, Name)

功能: 根据柔度系数矩阵(*S*), 在给定图形句柄上绘制三维图形切片图形。

输入:

输入	说明	备注
<i>handles</i>	图像句柄	
<i>S</i>	柔度系数	$S=C^{-1}$, GPa
<i>n</i>	每个维度的数据 点个数	整数, 默认为 200

<i>flag</i>	计算的属性类别	{'G', 'E', 'v'}其中之一
<i>slice_plane</i>	切片的面	由其法向量控制, 如[1 1 1]
<i>flag_save</i>	是否保存	0 不保存, 1 保存
<i>Name</i>	保存的名字	字符串, 保存的名字
输出:		
输出	说明	备注
<i>handles</i>	图像句柄	更新的图形句柄, 其中更新了 X, Y, V

6.16 Elastic_Read

$[Cij, ComName, State] = Elastic_Read(filename)$

功能: 从 EXCEL, MAT 或文本文件中读取弹性刚度矩阵(*CIJ*), 返回弹性刚度矩阵、命名以及读取状态。

输入: *filename*

格式	后缀	具体格式说明
EXCEL 文件	*.xlsx/*.xls	①可以多个表单, 但是表单之间数据格式保持一致。 ②数据列数保持为 3 列 (二维材料) 或者 6 列 (三维材料或二维材料)。 ③允许为每一个刚度系数添加名字, 放在相应刚度系数的上一行的第一列, 并且要加就需要全部加, 否则不加则自动按照文件名+数字编号 ④允许刚度矩阵之间存在空行 e.g. Example.xlsx
文本格式	*.txt/*.dat/任意后缀	①保持数据为 3 列或 6 列 ②允许为每个刚度系数添加名字, 放在相应刚度系数的上方, 且名字中一定要有字母。注意: 要加就全部加, 否则就都不加。 ③刚度矩阵之间允许存在空行 e.g. Example.txt
MATLAB 数据格式	*.mat	①允许多个数据变量, 每个变量的列数为 3 列或 6 列 ②最多允许一个命名变量, 若有则需要给所有的刚度系数依次命名。 e.g. Example.mat

输出: *Cij, ComName, State*

变量	说明	格式
<i>Cij</i>	弹性刚度矩阵	6x6xm double(<i>m</i> 为刚度矩阵的个数)
<i>ComName</i>	弹性刚度矩阵的命名	mx1 cell(<i>m</i> 为刚度矩阵的个数)
<i>State</i>	读取状态	'OK'

一些错误或警告，如下表

错误或警告：

种类	问题	解决方案
No Data Error	没有数据或只有一个不全的数据	数据有问题，检查数据
No Effective Data Error	没有有效的 CIJ	列数只能为 6（二维或三维材料）或者 3（二维材料）
Extra Data Warning	有不全的 CIJ	数据的总行数不能被 3 或者 6 整除

6.17 D2toD3

$$Cij6 = D2toD3(Cij3)$$

功能：将 3x3 的弹性刚度矩阵(二维弹性刚度矩阵)转换为 6x6 弹性刚度矩阵，支持多个矩阵。

输入： $Cij3$

$Cij3$	二维材料弹性刚度矩阵	3x3
输出： $Cij6$		
$Cij6$	三维材料弹性刚度矩阵	6x6

6.18 D3toD2

$$Cij3 = D3toD2(Cij6)$$

功能：将 6x6 的弹性刚度矩阵转换为 3x3 弹性刚度矩阵，支持多个。

输入： $Cij6$

$Cij6$	三维材料弹性刚度矩阵	6x6
输出： $Cij3$		
$Cij3$	二维材料弹性刚度矩阵	3x3

6.19 Ang2Direction

$$[theta, phi] = Direction2Ang(x, y, z)$$

功能：将笛卡尔坐标系下坐标 x, y, z 转换为欧拉角。

输入：

输入	说明	备注
x	笛卡尔坐标 x	数或者矩阵
y	笛卡尔坐标 y	数或者矩阵，尺寸同 x

z	笛卡尔坐标 z	数或者矩阵, 尺寸同 x
输出:		
输出	说明	备注
$theta$	欧拉角(xy 面投影与 x 轴夹角)	数或者矩阵
phi	欧拉角(与 z 轴夹角)	数或者矩阵, 尺寸同 $theta$

6.20 Direction2Ang

$[x, y, z] = Ang2Direction(theta, phi)$

功能: 将欧拉角转换为笛卡尔坐标系下坐标 x, y, z (模为 1)。

输入:

输出	说明	备注
$theta$	欧拉角(xy 面投影与 x 轴夹角)	数或者矩阵
phi	欧拉角(与 z 轴夹角)	数或者矩阵, 尺寸同 $theta$

输出:

输入	说明	备注
x	笛卡尔坐标 x	数或者矩阵
y	笛卡尔坐标 y	数或者矩阵, 尺寸同 x
z	笛卡尔坐标 z	数或者矩阵, 尺寸同 x

6.21 ElasticVRH3D

$output = ElasticVRH3D(C)$

功能: 采用 Voigt-Reuss-Hill 近似计算材料多晶弹性常数以及相关性能

输入:

输入	意义	备注
C	弹性刚度矩阵	GPa

输出:

输出	意义	备注
$output$	计算的性能	$B_V \quad B_R \quad B_H \quad B_A \quad AU \quad AL$
		$G_V \quad G_R \quad G_H \quad G_A \quad AU \quad AL$
		$E_V \quad E_R \quad E_H \quad E_A \quad AU \quad AL$
		$H_V \quad H_R \quad H_H \quad H_A \quad AU \quad AL$
		$HC_V \quad HC_R \quad HC_H \quad HC_A \quad AU \quad AL$
		$HT_V \quad HT_R \quad HT_H \quad HT_A \quad AU \quad AL$
		$\nu_V \quad \nu_R \quad \nu_H \quad \nu_A \quad AU \quad AL$
		$B2G_V \quad B2G_R \quad B2G_H \quad B2G_A \quad AU \quad AL$

注意: 下标 V,R,H 分布为 Voigt, Reuss 和 Hill 近似的结果, 下标 A 为各采用

Chung 模型描述的各向异性。 B, G, E, ν, H 分别为体弹模量，剪切模量，杨氏模量，泊松比和硬度。 HC, HT 分别为 Cheng 和 Tian 模型下的硬度， $B2G$ 是体弹模量与剪切模量的比值。 AU, AL 为 UAI 和 Christopher 模型下的各向异性。

6.22 StableofMechanical

$flag = \text{StableofMechanical}(C)$

功能: 计算 Born 稳定性。

输入:

输入	意义	备注
C	弹性刚度矩阵	GPa

输出:

输出	意义	备注
$flag$	是否稳定	1 为稳定，0 为不稳定

References:

- [1] R. Hill, The Elastic Behaviour of a Crystalline Aggregate, Proceedings of the Physical Society. Section A. 65 (5) (1952) 349. <https://doi.org/10.1088/0370-1298/65/5/307>
- [2] A. Marmier, Z. A. D. Lethbridge, R. I. Walton, C. W. Smith, S. C. Parker, K. E. Evans, ElAM: A computer program for the analysis and representation of anisotropic elastic properties, Comput. Phys. Commun. 181 (12) (2010) 2102-2115. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2010.08.033>
- [3] X. Chen, H. Niu, D. Li, Y. Li, Modeling hardness of polycrystalline materials and bulk metallic glasses, Intermetallics. 19 (9) (2011) 1275-1281. <https://doi.org/10.1016/j.intermet.2011.03.026>
- [4] Y. Tian, B. Xu, Z. Zhao, Microscopic theory of hardness and design of novel superhard crystals, International Journal of Refractory Metals and Hard Materials. 33 (2012) 93-106. <https://doi.org/10.1016/j.ijrmhm.2012.02.021>
- [5] C. Jasiukiewicz, T. Paszkiewicz, S. Wolski, Fourth-rank tensors of $[[V2]2]$ -type and elastic material constants for 2D crystals, physica status solidi (b). 245 (3) (2008) 557-561. <https://doi.org/10.1002/pssb.200777712>