



普通高等教育材料科学与工程“十二五”规划教材

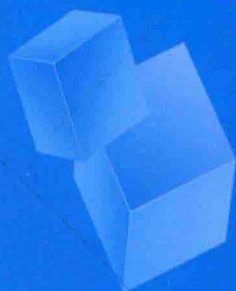
# 材料科学与工程中的 计算机应用

侯怀宇 张新平 编著



国防工业出版社

National Defense Industry Press



普通高等教育材料科学与工程“十二五”规划教材

# 材料科学与工程中的 计算机应用

侯怀宇 张新平 编著

国防工业出版社

·北京·

## 内 容 简 介

本书介绍了计算机技术在材料科学与工程中的应用,侧重于介绍各种常用的计算模拟方法和应用软件,使读者能够初步掌握如何在材料科学研究与工程实践中使用计算模拟方法,以及如何处理数据等。全书内容包括数据处理、图像处理、第一性原理计算及分子动力学模拟、有限元软件应用等。除了在介绍原子尺度模拟的两章中讲述了模拟原理之外,其他均不赘述基本概念,而是通过实例介绍相关软件的使用,使学生尽快地掌握软件基本操作方法,培养学生解决实际问题的能力。

本书可作为材料科学与工程各专业本科生及研究生教材,也可供相关领域研究人员参考。

### 图书在版编目(CIP)数据

材料科学与工程中的计算机应用/侯怀宇,张新平  
编著. —北京:国防工业出版社,2015.6

普通高等教育材料科学与工程“十二五”规划教材  
ISBN 978-7-118-09965-2

I. ①材… II. ①侯… ②张… III. ①计算机应用—  
材料科学—高等学校—教材②计算机应用—工程技术—  
高等学校—教材 IV. ①TB

中国版本图书馆CIP数据核字(2015)第142182号

※

国防工业出版社出版发行

(北京市海淀区紫竹院南路23号 邮政编码100048)

天利华印刷装订有限公司印刷

新华书店经售

\*

开本 787×1092 1/16 印张 12 $\frac{3}{4}$  字数 289 千字

2015年6月第1版第1次印刷 印数 1—3000册 定价 29.50元

(本书如有印装错误,我社负责调换)

国防书店:(010)88540777

发行邮购:(010)88540776

发行传真:(010)88540755

发行业务:(010)88540717

# 普通高等教育材料科学与工程“十二五”规划教材 编委会

主任委员 朱运田

副主任委员 徐 锋 崔 崇 吴 锵

委 员 (按姓氏拼音排序)

陈 光 丁锡锋 杜宇雷 侯怀宇

江金国 黄洁雯 赖建中 李建亮

刘 瑛 唐国栋 王 雄 王经涛

王天驰 熊党生 徐 跃 颜银标

杨 森 余 进 张士华 张新平

赵 军 赵永好 朱和国 周天乐

邹友生

# 前 言

随着计算机技术的飞速发展和材料科学与工程学科本身的日益进步,计算机在材料科学与工程中的应用已经非常广泛。计算机的应用在很大程度上促进了材料科学研究及材料工程技术的发展进步,而材料研究和工程领域技术进步的需求又给计算机软硬件的发展提供了动力。

目前计算机已经成为材料工作者不可缺少的日常工作和研究的工具,而且在理论研究和实验研究之外,各种层次和各种尺度计算机模拟方法也已经成为材料研究的重要方法。计算机与材料科学相结合,已经发展出一门新的交叉学科“计算材料学”。计算机在材料科学和工程中的应用不仅仅是提高了工作效率,而是全面促进了材料科学研究水平的提升和材料工程技术的发展,可以说相关的计算机软硬件技术的应用已经成为了材料科学与工程的一部分。因此,了解计算机技术在材料科学与工程中的应用状况,熟悉科技工作中的计算机常用软件,能够熟练应用计算机进行文字处理、数据作图与分析、图像分析处理等过程的操作,了解计算模拟等技术的基本原理和基本方法,已经成为当下的材料科学与工程各专业学生必须具备的基本技能和必须掌握的基础知识。

计算机在材料科学与工程领域中的应用非常广泛,涉及的基础知识范围各有不同,要在有限的课时内系统全面而又较为深入地讲述这方方面面的应用,恐怕难以做到。因此,作为一本教材,本书首先对计算机在材料科学与工程中的整体应用情况进行了较简单的概述,而后主要选择了几个在材料研究中应用较多的方面进行了重点的介绍。书中主要内容包括数据处理与图像处理方法,以及第一性原理计算、分子动力学模拟和有限元模拟等不同尺度的计算机模拟方法。在具体内容安排上力求突出重点,并侧重实际应用,尤其是较详细地介绍了一些软件的使用方法。全书仅在第一性原理计算和分子动力学模拟这两章中讲述了模拟计算的基本原理与方法,以照顾学生在相关基础知识方面的不足,而且在讲述中也注意避开复杂的理论处理及公式推导等,尽量用简单的语言介绍基础概念和基本方法,然后通过简单的实例,介绍相关软件的基本操作过程,以利学生在实践中进一步学习。而在数据处理、图像处理和有限元模拟这三章中,更是不再介绍计算原理和数学模型,直接通过实例介绍相关软件的实际应用,使学生既能了解相关方法的应用情况,又能了解掌握软件基本操作技能。这样也许更加有利于培养学生解决实际问题的能力,并为他们在后继的实践课程中和在今后的实际工作中更好地运用这些知识和操作相关软件打下一定的基础。

本书第1章、第4章和第5章由侯怀宇编写,第2章、第3章和第6章由张新平编写。由于计算机技术和本书中介绍的相关软件都在快速发展,加上编者水平所限,书中难免有错漏之处,欢迎同行和读者批评指正。

作者

2014年7月于南京理工大学

# 目 录

第 1 章 绪论	1
1.1 计算机技术发展简介	1
1.2 材料科学与工程中常用的计算机技术	3
1.2.1 计算机信息系统	4
1.2.2 计算机模拟技术	4
1.2.3 计算机检测与控制技术	6
1.2.4 计算机辅助设计与制造	8
1.2.5 计算机数据与图像处理技术	9
第 2 章 数据处理	11
2.1 Excel 软件在材料科学实验数据处理中的应用	11
2.1.1 计算标准偏差	11
2.1.2 粗差的剔除	11
2.1.3 基于 Excel 的 t 检验与方差分析	12
2.1.4 一元线性回归分析	15
2.1.5 一元非线性回归分析	16
2.1.6 多元线性回归分析	17
2.1.7 多元非线性回归分析	18
2.1.8 用 Excel 做逐步回归分析	18
2.1.9 基于 Excel 处理正交设计数据(极差分析法)	21
2.1.10 基于 Excel 构建均匀设计表构造	22
2.2 Origin 软件在材料科学实验数据处理中的应用	23
2.2.1 Origin 软件简介	23
2.2.2 Origin 软件数据管理	25
2.2.3 Origin 软件在材料科学实验数据处理中应用实例	30
2.2.4 利用 Origin 从图里获得原始数据	50
2.2.5 Origin 中相关的菜单英语单词	52
第 3 章 材料科学与工程中的图像处理	58
3.1 用 Photoshop 处理金相图片	58



3.1.1	修理金相图片	58
3.1.2	金相照片加标尺	61
3.1.3	合成全景照片	63
3.1.4	图像的焦聚融合	64
3.1.5	基于 Photoshop 软件的定量金相	66
3.1.6	绘制立体金相组织图	67
3.2	Matlab 实现定量金相	69
3.2.1	定量金相的发展	69
3.2.2	定量金相学中常用的参数符号和公式	69
3.2.3	定量金相的测量方法	70
3.2.4	定量金相分析的 Matlab 实现	71
<b>第 4 章</b>	<b>第一性原理计算</b>	<b>73</b>
4.1	波函数与薛定谔方程	73
4.2	Hartree - Fock 自洽场方法	75
4.3	密度泛函理论	77
4.3.1	Hohenberg - Kohn 定理	77
4.3.2	Kohn - Sham 方程	78
4.3.3	LDA 和 GGA	79
4.4	DFT 计算的主要方法	80
4.4.1	赝势平面波(PPW)方法	81
4.4.2	线性缀加平面波(LAPW)方法	83
4.4.3	线性 Muffin - tin 轨道(LMTO)方法	84
4.5	第一性原理计算的常用软件	84
4.5.1	使用赝势的计算软件	84
4.5.2	基于全电子方法的软件	86
4.6	几个简单的计算实例	88
4.6.1	ELK 和 PWSCF 程序的基态计算输入文件	88
4.6.2	结构优化及结合能的计算	92
4.6.3	晶体能带结构的计算	100
4.6.4	弹性常数的计算	102
<b>第 5 章</b>	<b>分子动力学模拟</b>	<b>105</b>
5.1	分子动力学模拟的基本方法	105
5.1.1	求解运动方程	106
5.1.2	初始构型和边界条件	108
5.1.3	势函数	110

5.1.4 温度与压力的控制方法 .....	118
5.2 体系结构与性质的计算 .....	121
5.2.1 热力学量 .....	121
5.2.2 结构性质——径向分布函数和结构因子 .....	122
5.2.3 动力学及输运性质 .....	123
5.3 分子动力学模拟软件及其应用 .....	125
5.3.1 MD 计算软件简介 .....	125
5.3.2 Lammmps 软件应用基础和实例 .....	128
<b>第 6 章 有限元软件 Deform 在材料科学与工程中的应用 .....</b>	<b>154</b>
6.1 Deform 有限元分析软件简介 .....	154
6.2 基于 Deform 软件的挤压过程模拟 .....	155
6.3 基于 Deform 软件的轧制过程模拟 .....	165
6.3.1 单板单道次同步轧制过程的有限元模拟 .....	166
6.3.2 单板单道次异步轧制过程的有限元模拟 .....	172
6.3.3 单板多道次轧制过程的有限元模拟 .....	173
6.3.4 多层板单道次轧制过程的有限元模拟 .....	174
6.4 基于 Deform 软件的拉深过程模拟 .....	174
6.5 基于 Deform 软件的冲裁过程模拟 .....	177
6.6 基于 Deform 软件的微观组织模拟 .....	181
6.7 基于 Deform 软件的热处理模拟 .....	184
6.8 基于 Deform 软件的模具磨损模拟 .....	188
<b>参考文献 .....</b>	<b>192</b>



# 第1章 绪 论

计算机技术已经在科学研究与工程技术领域获得了普遍的应用,并极大地促进了现代科学与技术的发展。高性能计算被称为“科学研究的加速器”,并且现在已经超越了科研计算的范畴,正走向更为广阔的商业计算和信息化服务等领域,如金融服务、电子政务、教育信息化和企业信息化等。

材料与能源、信息一起,被称为现代文明的三大支柱,是人类文明的基础。材料科学就是研究材料的科学,研究的是材料的组成、结构、性质、制备方法和性能以及它们之间的相互关系,其对象非常广泛。材料科学是一门以经验为基础的科学,到目前为止,人们对材料的认识还在很大程度上依赖于经验的积累,但是随着数学、物理学和化学等基础科学的发展及其在材料科学中应用的深入,材料研究的理论性也越来越强。现在的材料科学正与基础科学和工程应用密切结合,向着更高层次的科学化发展。随着现在高新技术的迅速发展,人们对材料性能要求也越来越高,这既是为材料科学的发展提供了机遇,又给材料研究工作带了挑战。这就需要材料科研工作者改变以前那种通过大量实验摸索的做法,而是在总结和归纳已有实践经验和理论知识的基础上,通过计算和模拟等方法,以较低的成本和较高的效率研发出高性能的材料。近年来,材料科学呈现出高速发展的趋势,而计算机在材料科学中的广泛应用,正是这一趋势的重要推动力。

## 1.1 计算机技术发展简介

世界上第一台计算机 1945 年在美国宾夕法尼亚大学诞生。这台计算机的运算速度只有 5000 次每秒,造价却高达 40 万美元。然而,这台计算机的诞生却标志着一个新时代的到来,人类社会由此开始进入到了数字时代和信息时代。数十年来,计算机技术经历了迅速的发展和普及,今天,计算机已经成为人们工作和生活中不可缺少的工具。

计算机的发展,迄今为止已经经历了四代。第一代电子计算机采用电子管作为基本的逻辑元件,不但体积庞大,耗电较多,成本高昂,而且计算速度慢,存储容量也很小。编程使用机器语言或者汇编语言,主要用于科学计算。第二代计算机则是采用晶体管作为逻辑元件,体积大大缩小了。内存采用了磁芯存储器,并且开始使用磁盘作为外部存储介质。同时计算机软件也发展起来,出现了以批处理为主的操作系统,以及 FORTRAN、COBOL 等高级编程语言及其编译程序。这时的电子计算机已经可以进行事务处理和工业控制等工作。第三代计算机开始采用半导体集成电路作为逻辑元件,内存也变成了半导体存储器。集成电路具有体积小、耗电省、寿命长等优点,极大地提高了计算机的整体性能。计算机产品也走向了标准化和通用化。在计算机应用方面则进入到了文字和图形图像处理等领域。自 20 世纪 70 年代以来,发展起了逻辑元件和主存储器都采用大规模集成电路的第四代计算机,计算机的成本进一步大大降低,应用领域则迅速拓宽。计算机开

始向着微型化方向发展。1971年末,第一台微处理器和微型计算机在美国旧金山南部的硅谷诞生,微型机时代就此来临。到了80年代,个人计算机迅速从军事部门、大型科研单位或商业部门来到一般单位和普通家庭。现在的计算机呈现两极化发展趋势,一极是向巨型化和高性能方向发展,仍然是面向军事、科学计算等应用。现在世界上最强大的超级计算机的浮点计算性能已经达到了20千万亿次每秒浮点运算。另一极是往微、小、便宜的方向发展,进入个人家庭和日常生活。计算机同时又向着网络化和人工智能化方向前进。网络技术和多媒体技术,使得个人计算机已经应用到人们工作和生活的方方面面,成为不可或缺的工具。目前便携式计算机、平板电脑,以及包含了嵌入式计算机的智能手机等已经被广泛使用,还出现了智能眼镜、智能手表等,这些都是计算机技术与通信、传感技术发展的结果。现然生活中到处都有计算机的应用,我们周围的各种电器、电子产品、工业设备中都设计有嵌入式计算机,即把运算器、控制器,以及存储器、输入输出接口电路等都集成在一块芯片上的计算机,也称单片计算机。实际上现在世界上90%的计算机(微处理器)都以嵌入方式在各种设备里运行,有的嵌入式计算机的计算能力甚至可能超过普通商用个人计算机。

计算机技术包括硬件技术和软件技术两部分。除了硬件的发展,在软件方面,几十年来也有飞速的进步。计算机软件包括系统软件、支撑软件和应用软件。系统软件是指管理、监控和维护计算机资源,并提供用户与计算机之间的界面等工具的软件。常见的系统软件有操作系统、各种程序语言,用于程序诊断、调试、编辑等用途的工具软件,以及用于杀毒、备份、联网等增强计算机系统服务功能的实用程序等。支撑软件又称软件开发环境,是支撑各种软件开发与维护的软件。应用软件则是指利用计算机软、硬件资源,为某一应用领域解决某个实际问题而专门开发的软件。应用软件又分为通用应用软件和专用应用软件。通过应用软件支持最基本的应用,广泛用于几乎所有的专业领域,如办公与字处理软件、各种图形图像处理软件、财务管理软件、游戏软件等。专用应用软件则是专门为某一个专业领域、行业、单位特定需求而专门开发的软件,如企业的人事信息管理系统、工资管理系统、学校的教学管理系统、海关报关申报软件等。软件技术的进步总是会受计算机应用和计算机硬件技术发展的推动和制约。计算机软件的发展大概经历了如下几个阶段。第一个阶段是从1946年出现第一条用机器语言编写的程序,到20世纪50年代高级程序设计语言的出现。这期间计算机的应用领域基本限于科学与工程领域的数值计算,所用的程序设计语言为机器语言和汇编语言。机器语言只包含“0”和“1”组成的二进制编码,汇编语言则是用一些简单的英文字符串来替代特定的二进制命令。1954年IBM公司发明了第一种用于科学与工程计算的FORTRAN语言,这也是世界上第一种计算机高级语言,这标志着计算机软件进入到第二个发展阶段。此后其他高级语言如COBOL、BASIC等被陆续开发出来,并且出现了计算机操作系统。使用高级语言编程的人不需要懂得机器语言和汇编语言,降低了对应用程序开发人员在硬件知识及对机器指令方面掌握程度的要求,使得这个时期有更多的应用领域而不是计算机专业领域的人员参与程序设计。同时随着计算机应用领域的扩大,出现了大量涉及非数值计算领域的程序和软件。软件发展的第三个阶段大约是开始于1968年提出的软件工程的观念。随着计算机程序规模的扩大以及大型软件的出现,软件开发的难度越来越大,成本越来越高,软件维护也越来越困难。此前的个体化编程方式和个体化程序已经不能满足应用的需求,只有采用

工程方法才能适应,即把软件开发视为类似工程的任务。在软件工程阶段,出现了结构化程序设计技术,PASCAL 语言就是采用结构化程序设计规则制定的,BASIC 语言也被升级为具有结构化的版本,此外,还出现了灵活且功能强大的 C 语言。运用这些高级语言的结构化程序设计在数值计算领域取得了优异成绩。此外更强大的操作系统被开发出来。贝尔实验室开发了多用户、多任务的分时操作系统 Unix,为 IBM PC 开发的 PC-DOS 和为兼容机开发的 MS-DOS 则成了微型计算机的标准操作系统,Macintosh 机的操作系统引入了鼠标的概念和点击式的图形界面,彻底改变了人机交互的方式。20 世纪 80 年代以来,随着微电子和数字化声像技术的发展,在计算机应用程序中开始使用图像、声音等多媒体信息,并出现了多媒体计算机,使计算机的应用进入了一个新阶段。此外还出现了多用途的应用程序,这些应用程序面向没有任何计算机经验的用户。典型的应用程序是电子表格制作、电脑文字处理,以及数据库管理软件。进入 20 世纪 90 年代以来,随着在计算机软件业具有主导地位的 Microsoft 公司的崛起、面向对象的程序设计方法的出现,以及计算机网络的普及,计算机软件的发展进入到了一个新的飞速发展的阶段。

现在计算机软件,不论是在程序语言设计、计算技术和计算方法上,还是在各种应用软件的开发和更新方面,都在快速发展。目前软件产业的发展速度已超过硬件产业,给人类社会带来翻天覆地的变化。今天的计算机软件产业已经成为整个信息产业中成长最快及最具盈利性的领域,是后工业时代规模最大、最成熟、研究最深入的产业之一。美国对外贸易将近 80% 是知识产权贸易,其中软件贸易是最为重要的部分。当今世界对软件产业的依赖已经到了无以复加的地步,计算机软件技术对人类社会的生产生活产生了难以置信的影响。

## 1.2 材料科学与工程中常用的计算机技术

计算机软、硬件技术是在许多学科和各类工业技术的基础上产生和发展起来的。计算机的发展与电子工程、应用物理、机械工程、现代通信技术和数学等学科的发展是紧密结合在一起并且互相渗透的。计算机技术的发展和进步离不开这些相关技术领域的发展,而计算机技术已经在几乎所有科学技术和国民经济领域中得到广泛应用,又极大地促进了这些相关领域的发展和进步。就材料研究而言,材料科学有一个很重要的属性,就是多学科交叉,它不但与材料的应用领域所涉及的学科有密切的联系,而且与许多基础学科密不可分,如固体物理和固体化学、量子化学、电子学、声学、光学、液态物理、数学、计算机科学等,材料科学是这些基础学科和许多应用学科相互融合与交叉的结果。而且,材料科学与工程成为一门学科只是近几十年之内的事,它是一个正在发展的科学,不像物理学、化学等已经有一个相当成熟的体系,材料科学正随着各有关学科的发展而不断充实和完善。目前材料研究在很大程度上还依赖于事实和经验的积累,系统的材料研究还有很长的路要走,特别是计算机科学在材料科学与工程中的应用研究,是未来材料科学发展的必然趋势。

这里所说的计算机技术,指的是计算机应用技术,即计算机软硬件知识的应用,主要是各种软件的应用技术。材料科学与工程中常用的计算机技术主要包括以下几个方面。

### 1.2.1 计算机信息系统

随着全球以信息技术为主导的科技革命进程的加快,人类社会逐步由工业社会进入信息社会。信息资源是经济和社会发展的重大战略资源。一个国家的信息化程度已成为衡量其现代化水平和综合实力的重要标志。“信息”一词的含义非常广泛,并没有一个统一的确定的概念。我们这里所说的信息,主要是指以适合于存储、通信等方式来表示和处理的知识或消息。计算机信息系统,是指由计算机及其相关的配套设备和设施(包括网络)构成的,按照一定的应用目标和规则对信息进行采集、加工、存储、传输、检索等处理的人机系统。计算机信息系统主通常主要由支持环境(如计算机硬件、操作系统和网络系统)、数据库系统以及应用软件等几部分组成。用户可以通过人机交互界面来实现数据的维护(补充及修改)、查询、统计分析以及规划、决策等功能。

计算机信息系统技术在材料科学与工程中的应用主要反映在材料数据库和专家系统的建立和应用。数据是计算机技术中发展最快的重要分支之一,它已成为计算机信息系统和计算机应用系统的重要技术基础和支柱。计算机最重要的应用是数据处理,数据处理的中心则是数据管理,数据库是计算机管理数据的主要方式。现在世界上可供使用的工程材料有数十万种,将这些材料进行分类,并把各种材料的成分、结构、性质和使用性能等信息搜集在一起,建立起材料数据库,并建立可以完成各种事务性操作(如比较、判断和推理等)并具有决策功能的专家系统,这是非常有必要的工作,对于材料的研究以及材料的选择与使用都有重要的意义。长期以来,材料应用的选择都是依靠工程设计者的经验或者通过材料手册进行筛选,工程选材往往跟不上新材料的开发。材料数据库最主要的应用就是供工程技术人员方便地选用最合适的材料,此外就是为材料研究与开发人员提供已有的结果和数据。现在世界各国都开发了很多材料数据库。例如美国国家标准局建立了很多材料数据库,如合金相图数据库、陶瓷相图数据库、材料力学性能数据库、材料腐蚀数据库、材料摩擦磨损数据库等,具有相当高的权威性。我国也建立了一些材料数据库,如用于反应堆核材料管理的核材料数据库、用于航天技术的航天低温材料数据库、用于模具工程技术的冷冲模具数据库、用于热喷涂技术的热喷涂材料数据库,还有机械工程材料数据库、材料自然腐蚀数据库、磨损数据库、稀土数据库等。

各种材料数据库已经在科研领域中获得广泛的应用。随着现代网络技术的发展,科研工作者可以很方便地实现文献、数据和软件程序等资源的共享。材料数据库已经走向网络化和商业化,在材料研究、理化测试、产品设计和决策咨询中得到了广泛的应用。材料数据库的特点是数据量庞大。各种材料的种类非常多,材料的成分、结构、性能和使用,构成了极为庞大的信息体系,而且这一体系正在不断地更新和扩充。另一方面,用户对于材料数据库应用的需求也在不断发展,不断提出更高的要求,比如,数据库不但要存储数据信息量大,还应查询方便,满足智能化搜索的要求,能够通过不同的搜索方式得到所要的信息。而且数据库不但要能够查找数据,还应能构建模型,还应与知识库和人工智能相结合,建立专家系统,实现分析预测功能。因此材料数据库还将会随着计算机信息技术的发展而继续发展,不断满足人们的各种需求。

### 1.2.2 计算机模拟技术

计算机模拟或仿真,是在理论研究与真实的实验研究之外的“第三类研究方法”,它



是理论与真实实验之间的桥梁。计算机模拟仿真技术是指在已知的科学规律的基础上,针对所研究的对象建立解析模型,由计算机完成相关的计算、分析和可视化等工作,从而可以利用模型来再现实际系统(或者假想系统)中所发生的本质过程。

随着各种新型算法和模拟技术的涌现,以及计算机运算功能越来越强大,现在人们已经可以相当细致和精确地分析所研究的物质内部的状况以及所研究的过程的细节,并且可以突破实验上的困难,在诸如超高温、超高压、高速冲击、粒子辐射等极端条件下实现经济而高效的“计算机实验”。这使得计算机模拟与仿真在材料科学与工程中的应用越来越广泛,成为一种非常重要的研究方法,由此产生了一门新的材料科学分支,即“计算材料学”。计算材料学与材料模拟仿真技术覆盖了材料物理、材料化学、材料加工等各个学科领域,在材料结构与性能的研究、材料制备加工过程研究、材料服役行为研究,以及新材料设计开发等方面都有非常重要和广泛的应用。

计算材料学中有很多材料模拟方法,这些方法一般按照模拟对象的空间和时间尺度来分类。材料微结构在空间和时间上有很大的分布范围,例如原子团簇分布在纳米尺度范围,合金中的亚晶粒、晶粒尺寸大约在微米以上尺度,实验样品则在毫米以上尺寸,同时观察和描述各种微结构的运动和弛豫的时间尺度也不相同,如晶格振动、晶体中点缺陷的运动可以要在纳秒( $10^{-9}$ s)以内的时间尺度上描述,而如果在原子级别上理解再结晶与晶粒生长等过程,相应的时间尺度大约在 $10^{-9} \sim 10^{-5}$ s,如果描述合金中沉淀物的长大和粗化,则对应的的时间尺度一般在毫秒至秒级,而宏观尺度上的涉及材料使用行为的研究,如材料的疲劳与蠕变失效研究、材料的老化及寿命预测等,则可能涉及长达数年甚至数十年的时间尺度。计算材料学的核心实际上就是各种对应于各种空间和时间尺度的多尺度模拟方法的发展及其应用。

在原子尺度或称纳观尺度上的模拟方法有第一性原理计算、经典分子动力学方法、Metropolis 蒙特卡罗方法等。其中经典分子动力学方法应用非常普遍,它是根据粒子间相互作用力模型,用经典力学方法计算多粒子系统的结构和动力学过程,可以模拟和计算各种物系的结构和性质。近年来随着计算机计算能力的提高,运用第一性原理而不依靠原子间相互作用的经验模型的从头计算分子动力学方法的应用也越来越多。目前分子动力学方法所模拟的时间尺度一般在纳秒范围以内,最多可以模拟数千万至上亿个原子。

在微观尺度至介观尺度上的模拟方法有位错动力学方法、相场动力学和元胞自动机方法等。其中,位错动力学是在微观至介观层次上模拟位错运动的方法,它把时间和每个缺陷的即时位置作为自变量,进行单个位错动力学的离散模拟,而后在牛顿位错动力学的框架下,对于由单个位错线的偏微分方程随机耦合而得到的方程组进行时间和空间上的离散求解。该方法可以用于材料的塑性变形等过程的研究。相场动力学方法在材料研究中的应用较为常见,它是以扩散相变理论为基础,在同时考虑浓度场、晶体场、结构场的时间和空间变化的情况下以离散化形式处理固态和液态相变动力学。近年来还发展起了微观相场方法,可以处理原子层次的问题。相场方法在材料研究中的应用包括晶粒生长、亚稳分解、凝固与枝晶生长、沉淀析出等过程的模拟。元胞自动机方法则是一种时间和空间都离散的动力学系统研究方法,其中散布在规则网格中的每一个元胞依照同样的规则做同步更新,大量元胞通过简单的相互作用构成动态系统的演化过程。元胞自动机方法可以用于研究很多一般现象,包括通信、生长、复制、竞争与进化等,广泛应用于社会、经济、

军事和科学研究的各个领域,在材料研究领域则可用来模拟再结晶、晶粒生长和相变等演化现象。

在介观至宏观尺度上的模拟方法主要是各种基于连续性介质的各种流体力学、弹塑性力学模型,断裂力学方法,以及有限差分 and 有限元模拟方法等。有限元或者有限差分方法实际上是一些用来求解数理方程的数值计算方法,或者称数值分析技术。它们一般用于研究所谓的“场”问题,包括位移场、应力场、电磁场、温度场、流场、振动特性等,就是在给定条件下求解其控制方程的问题的数值解。而控制方程通常是根据研究对象的特性和相应的原理建立起来的一组常微分或偏微分方程,这些方程描述的对象通常处于多场耦合状态下,并有不规则的几何形状和比较复杂的边界条件,难以获得解析解。其中有限元方法在工程上应用非常广泛,目前有很多专门的有限元计算软件,可用于材料的热学、力学分析,或者流场、温度场、磁场等条件下及多场耦合条件下的材料及过程的模拟计算,从而可提供不同工艺条件下的材料制备成形过程和材料加工过程,以及材料服役过程的模拟结果。

计算材料学与计算机模拟方法,其模拟的直接对象是给定条件下的材料的结构和性能,以及材料结构和性能在一定条件下随时间的演变过程,或随外部条件的改变而发生的变化过程,对这些对象或问题的模拟研究,可以了解材料内部结构和性能及其变化的各种细节,深化对于材料的理解。在此基础上,更进一步的目标是发展材料设计方法。所谓材料设计,指的是应用已知的知识和信息,通过理论和计算的方法,来预报具有特定成分和结构的材料的性能,或者预报具有特定性能的新材料的成分与结构,并且提出新材料的优化制备加工方法,简单说就是通过理论分析与计算,实现按需制备和加工满足特定要求的新材料。材料科学与工程长期以来都是以经验为基础的学科,材料设计主要是依据大量的实验,而实验也多是依靠经验和“感觉”,进行所谓的“炒菜”式的大量试验。开发一种材料所产生的经验往往不能照搬进另一种材料的开发。这些情况都使得新材料的开发要消耗大量的人力和时间成本,并且制约着材料科学及相关应用领域的发展。目前我们当然还不大可能完全离开实验来进行纯理论的材料设计,但是可以把计算模拟技术与实验验证相结合,更多地运用计算机模拟来代替真实实验,并且通过计算机模拟来发展材料科学基础理论,渐渐发展到以更丰富和更加量化的理论为指导,结合计算机模拟和少量真实实验来实现材料设计。

对应于材料模拟的尺度划分,材料设计也可分为纳观到微观尺度的材料设计、微观至介观尺度的材料设计,以及介观至宏观尺度的材料设计等。将不同结构层次和不同性质间的理论和模拟结果互相沟通并形成有机的联系,就构成了多尺度材料模拟和多尺度材料设计方法。

### 1.2.3 计算机检测与控制技术

计算机检测与控制技术,是指在科学实验、工业生产等过程中应用计算机来进行数据检测和操作控制的技术。利用计算机进行自动检测与控制,可以控制机器操作的精度,提高产品的质量和产量,并降低原材料和能源的消耗,同时还可以改善劳动条件,提高工作效率并保证操作安全。计算机控制与人工系统的控制一样,一般由两部分组成,即获取信息的部分和判断并实现控制的部分。在试验和生产过程中,首先通过各种传感器等信

息采集系统获得受控对象与环境的基本数据。传感器采集产生的数据大多是电流或电压等信号,各传感器输出信号的形式和幅度并不一致,要用信号调节器将它们转化为统一的形式和适当的幅度范围。信号调节器为传感器提供激励源,并具有放大、平衡、补偿、滤波、校验等功能。多路转换器在计算机控制下按一定的次序将输入数据通路逐个与模数转换器接通,将各通路的模拟量数据转换成数字量送入计算机。多路转换器的转换开关常用继电器或场效应晶体管构成。在自动化程度较高的系统中,检测和控制通过计算机建立相互的实时联系。

在一般的计算机检测与控制系统中,被测试和控制的某一参量(如温度、压力、流量等)首先通过传感器采集,并将这些非电物理量转换成电信号,再将信号放大,满足模数转换器(A/D)的要求,放大后把电信号传递给A/D,由A/D将电信号转换成数字信号,再经输入输出接口(I/O)输入计算机,再由计算机按事先编好的检测和控制程序进行运算、逻辑判断、比较,再将结果由I/O接口输出。输出的数字信号经数模转换器(D/A)转为模拟信号(如电压、电流信号),经放大器放大后,用于带动相应的执行机构,从而实现对生产过程中的各种参数的实时检测与控制。

计算机过程检测与控制已经在材料加工等材料工程领域中得到广泛的应用。材料加工是制造和处理材料的重要手段,主要包括铸造、锻造、压力加工、热处理及粉末冶金等。各种材料加工过程都可以采用计算机进行自动控制,从而提高加工效率,改善工作条件,并大幅度提高产品的加工精度和质量。例如连铸连轧过程的计算机控制、化学热处理过程的计算机控制、全自动焊机,以及自动控制的热处理炉、烧结炉,等等,这些都可以利用微型机和可编程控制器来实现。其基本控制原理与上述类似,即根据材料加工的尺寸或性能要求向计算机输入相关数据,将得到的信息经过A/D转换成数字信号输入计算机,计算机经过自己的程序处理,最后将处理的数字信号经D/A转换器变成模拟信息,进而将模拟信息传输到相应的执行设备以达到自动控制效果。

随着计算机技术及其应用水平的提高,以及为满足日益复杂的、大规模的、高速和高精度的测试要求,在检测与控制方面已经逐渐兴起了一门新型综合性学科,即计算机辅助测试(CAT)。CAT所涉及的范围包括微型计算机技术、测试技术、数字信号处理、现代控制理论、软件工程、可靠性理论等诸多门类。计算机辅助测试系统是材料研究的重要手段,由于计算机灵活的编程方式,强大的数据处理能力和很高的运算速度,使得CAT系统可以实现手动方式不能完成的许多测试工作,提高了材料研究的水平和测试的精度。

计算机辅助测试在材料检测中的应用主要集中于材料的物相及成分分析与检测、材料的组织结构检测、力学性能和物理性能测试,以及材料和机械零部件的无损检测等方面。材料检测的基本方法是使用某种探测装置将探测到的信号转化为数字信号,经由计算机软件程序的处理和分析,得到相应的结果。现在材料研究中经常使用的大型分析设备有扫描电镜、透射电镜、扫描探针显微镜等。在元素成分分析中常用的方法有光谱分析、电子探针等,在物相分析中应用最广泛的则是X射线衍射分析。现在的材料检测分析设备基本上都是由计算机控制运行的,各种设备的计算机系统提供了不同的设备控制软件和功能强大的数据和图像处理分析软件,以及计算模拟软件等,可以实现过去用人工分析方法很难做到的高精度和高准确度分析。此外,计算机测控系统的使用已经使一些设备成功地用于工程现场的在线测试分析。如炼钢中的临线快速成分分析系统,即是在



炼钢平台上建立的半自动全封闭的光谱实验室。首先将取样器插入钢液取样,而后经水冷却后放到自动磨样机上制样,再由光谱仪对试样进行成分分析,生成的数据可存储于计算机中,或传输到需要数据的终端。从取样到把数据传输到现场的全过程不超过 150s,并可在现场 24h 不断地进行样品分析,帮助实现在线过程质量控制。

在材料显微组织测试和性能测试方面,计算机的应用也已经非常广泛。比较典型的如金相定量分析,早期的金相分析都是人工进行,采用的方法有称重法、网格法等,不但工作效率低,而且准确性较差,数据重现性不好。所以一直以来金相组织难以实现定量测量,多是定性分析。而随着模式识别技术发展起来的计算机金相图像分析系统则可以对灰度反差较大的金相组织实现较高精度的定量分析和测量。图像分析系统可连接金相显微镜、数码相机和扫描电镜等设备,有丰富的图像编辑、增强、变换和切割功能,可对特征物自动完成测量,所以图像分析系统在金相定量检测方面得到了广泛的应用。目前开发了许多符合国家标准的金相定量检测专用软件,如金属平均晶粒度测定软件包、球墨铸铁球化率评级软件包、汽车渗碳晶粒度测定软件包等,满足了材料检测、科学研究和部分金相定量评级的要求。在材料力学性能和物理性能研究中,各种测试手段如拉伸实验、冲击实验、疲劳实验,以及声、电、热、磁等各方面的性能测试,都有多种测试方法和测试设备。这些测试设备中,设备动作的控制、被测参数的测量,以及测试数据的处理,都可以通过计算机来完成。

#### 1.2.4 计算机辅助设计与制造

计算机辅助设计简称 CAD,是技术人员利用计算机软、硬件系统,对产品或者工程进行设计、绘图、分析以及技术文档编制等设计活动的总称,其实最主要的就是通过向计算机输入设计资料,由计算机完成设计方案的优化并绘制出产品或零件图的过程,也就是利用计算机和图形设备来进行设计工作。计算机负担的是数值运算、数据分析与存取,以及绘图等工作。计算机辅助设计的基本技术主要包括交互技术、图形变换技术、曲面造型和实体造型技术等。CAD 的发展开始于 20 世纪 50 年代计算机图形学的诞生。CAD 技术最早主要是用来开发交互式图形系统,即利用计算机绘图来代替人工制图,绘制机械和工程图样。随着计算机技术的进步,CAD 历经二维平面图形设计、三维线框模型设计、三维实体造型设计、自由曲面造型设计、参数化设计、特征造型设计等发展过程,现在已经在各个工程技术领域得到了广泛的应用。

计算机辅助制造简称 CAM。广义的 CAM 的定义是,通过直接的或者间接的计算机与企业的物质资源或人力资源的连接界面,把计算机技术有效地应用于企业的管理、控制和加工操作。照此说来,计算机辅助制造包括了企业生产信息管理、计算机辅助设计和计算机辅助生产制造三个部分。其中计算机辅助生产制造又包括连续生产过程控制和离散零件自动制造两种控制方式。而现在一般所说的计算机辅助制造则主要是指利用计算机通过各种数值控制设备完成离散产品的加工、装配、检测和包装等制造过程,其核心是计算机数值控制(数控)和程序控制(程控),其中最重要的环节是编制零件加工程序。20 世纪 50 年代,麻省理工学院开发了数控机床的零件加工编程语言 APT,其中包括了几何定义、刀具运动控制等语句,从而形成了早期的 CAM 系统。现在的 CAM 技术则可以直接在 CAD 系统上建立起来的参数化、全相关的三维几何模型(实体+曲面)上进行加工编

程,生成正确的加工轨迹。

计算机辅助设计与制造 CAD/CAM 系统包括特征造型、参数化设计、变量化设计、变量装配设计、工程数据库等关键技术。常用的 CAD/CAM 系统有 Unigraphics NX(UG)、Pro/Engineer(Pro/E)和 SolidWorks 等。利用 CAD/CAM 系统不但可以减轻人工劳动,而且可以大大增加设计方案的可靠性,提高设计、制造的一次成功率,从而缩短生产准备时间,加快产品更新换代。目前 CAD/CAM 技术在材料加工等领域有非常广泛的应用。比如金属材料的加工过程中所使用的模具的设计和制造,就是 CAD/CAM 最为典型的应用。传统的模具设计,往往有太多的经验成分和人为因素,经常要反复试模和返修,设计周期长,成本高。而应用模具 CAD/CAM,可以直接生成模具的三维空间造型,而且可以生成和分析真实实体的各种物理性质和力学特性,如密度、热导、比热容、硬度、弹性模量等,还能对模具的工作情况进行动态模拟与仿真,并且可以通过数控编程实现高效率和高精度的模具制造与加工。

20 世纪 90 年代开始兴起,目前正蓬勃发展的三维打印(3D 打印)技术,就是典型的 CAD/CAM 技术,也可以把它看成是 CAD/CAM 技术的最新应用和发展。三维打印技术,实际上是一种快速成形技术,即是一种依据工件的三维 CAD 模型,在由计算机控制的快速成形机上直接形成三维工件而不需要采用传统的加工机床和加工模具等工具的技术,也称自由成形。自由成形工艺只需要传统加工方法 30%~50%的工时和 20%~35%的成本就能制作复杂的三维工件。自由成形的发展只是近 20 年来的事情,目前已经实现三维自由成形工艺的商业化机器产品有激光固化、激光切纸、激光烧结、三维打印和熔融挤压等快速成形机。近年来已经将熔融挤压式快速成形机归并入三维打印机,称其为熔融挤压式三维打印机,以区别于喷墨粘粉式三维打印机。喷墨粘粉式三维打印机是基于喷墨打印原理,借助热泡式喷头喷射粘结剂来使粉材选择性粘结成形,这种热泡式喷头能喷射的粘结剂有限,很难喷射黏度较大的粘结剂以及非水溶液性粘结剂。而熔融挤压喷头只能使用一定直径的可熔融塑料丝材。这种情况使得这两种三维打印机的可用原材料(“墨水”)的范围很受限制,难以满足新材料成形的要求。为突破这些限制,目前已经开发了一些新型的喷头,从而研制出一些先进三维打印机,如采用压电喷墨式喷头的压电喷墨式打印机,采用气压驱动式或气动雾化式等气动喷头的气动式三维打印机,电动式三维打印机,采用电磁阀操控式喷头或者电动微注射器式喷头的电动式三维打印机,以及电流体动力喷射式三维打印机等,还有可以混合使用几种不同喷头的混合式三维打印机,等等。这些新出现的三维打印机,连同它们所使用的原材料和相关工艺,被统称为“先进三维打印技术”。目前的三维打印机可以将多种材料,包括金属、陶瓷、聚合物等,喷印成三维工件。先进三维打印技术可以成功解决生物医学和机电制造等领域的新材料(特别是微纳米材料)的复杂功能器件的成形难题,正在成为发达国家争先发展的一项高新技术。三维打印技术在材料领域中的应用主要包括陶瓷构件、金属器件、金属焊料、铸造蜡模等的三维打印成形等。近年来出现的三维打印折叠成形工艺,可以使打印成形的面片通过折叠技术构成复杂的三维形体,然后经过热处理使其成为三维金属件、陶瓷件等。

### 1.2.5 计算机数据与图像处理技术

计算机一直有三大主要应用领域,即科学计算、数据过程和过程控制。数据处理是计