

计算材料科学

数理模型及计算机模拟

周志敏 孙本哲 著



科学出版社

计算材料科学数理模型 及计算机模拟

周志敏 孙本哲 著

科学出版社

北京

内 容 简 介

本书主要以凝固和形变再结晶过程中的微观组织演变为主线,介绍了从宏观至介观尺度的多尺度模拟方法及基本理论,同时对微观至宏观尺度的主要模拟方法,如第一性原理、分子动力学、元胞自动机,以及准连续介质多尺度模拟方法等,进行了较详细的介绍。主要内容如下:计算材料科学数理模型的建模基础内容及方法,常用的数值分析方法,合金凝固过程的多尺度模拟方法及理论,形变再结晶过程的多尺度模拟,分子动力学模拟方法,准连续介质的多尺度模拟方法及基本理论,密度泛函理论和基于密度泛函理论的第一性原理计算方法,以及常用的数据处理方法。

本书可用作材料科学与工程学科的研究生和高年级本科生相关课程的教材或参考书,也可供从事材料科学研究的教师和研究人員参考。

图书在版编目(CIP)数据

计算材料科学数理模型及计算机模拟/周志敏,孙本哲著. —北京:科学出版社,2013

ISBN 978-7-03-036795-2

I. ①计… II. ①周…②孙… III. ①材料科学-数学模型-高等学校-教材②材料科学-计算机模拟-高等学校-教材 IV. ①TB3

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2013)第 037839 号

责任编辑:张中兴 / 责任校对:宣 慧
责任印制:阎 磊 / 封面设计:迷底书装

科学出版社 出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

骏立印刷厂印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2013 年 3 月第 一 版 开本:720×1000 B5

2013 年 3 月第一次印刷 印张:22

字数:430 000

定价:69.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换)



前 言

材料是人类社会发展的重要基础,材料科学与工程是当今最为重要的科学研究领域之一,具有优异力学性能的新型结构材料和优异光、电、磁、热等功能的新型功能材料是当前高新技术领域中备受青睐的研究对象. 新型材料的研究包括材料的组成成分、微观结构、加工和使用性能及制备和加工工艺等几个方面,其中材料的成分和组织性能研究是新型材料研究的基础,材料的制备和加工是新型材料开发的关键. 随着科技的发展,人们对材料的性能不断提出更高的要求,对其研究也迫切地需要由实验室的试错研究方式向科学的数值设计与优化转移,根据预定性能设计新材料与新工艺. 计算机是 20 世纪产生影响最为深远的发明之一,它使科学研究和工程实践发生了巨大转变,数值模拟与计算已经成为几乎所有学科的基本手段,更使人们能够对各种深层次的科学问题进行更为精准有效的分析和研究. 20 世纪 80 年代,计算机科学与计算机技术的飞速发展使得数值模拟和预测方法在材料科学与工程领域的应用上取得了长足的进步,材料的计算与设计已发展成为一门独立的学科——计算材料科学,它综合了材料科学、计算机科学、数学、物理、化学以及机械工程等众多学科的科学内容与技术手段,将材料科学所包含的科学信息有效地提取出来进行定量的分析与描述,通过理论计算来探索材料的组分、微结构、性能及制备工艺之间的关系,实现对研制具有特定性能的新型材料的指导.

计算材料学作为材料科学领域中的新兴学科,已经引起国内外许多材料学家的广泛关注. 材料科学与工程领域的数值计算与模拟使人们看到了定量预测材料性能及优化制备加工工艺方面的潜力,也促使国内高校相继开设“计算材料科学”和“计算机在材料科学中的应用”等相关课程,以培养学生利用数值计算技术解决专业问题的基本知识和能力. 本书作者近十几年来在东北大学为材料物理专业本科生讲授“计算机在材料科学中的应用”课程,为研究生讲授“计算材料科学”课程,同时在科研中针对连续铸造、形变再结晶、微纳加工等过程进行了温度场、应力应变场和微观组织演变的多尺度模拟方法的研究,对相关的数理模型及数值模拟算法进行了较为细致的探讨. 作者在教学和科研实践中深感信息科学发展之迅速,很多早期需要在课堂上讲授的计算机相关知识,如今已成为学生普遍熟悉并掌握的普及性知识,而与材料科学相关的专业问题的建模和数值模拟技术则一直是学生进一步深造和从事科研必须了解和掌握的内容. 为此,作者总结了多年来的授课实践及相关科研工作经验撰写本书,以满足在校本科生和研究生的学习需要,同时也可供材料科学与工程领域的科研工作者参考. 本书以凝

固和形变再结晶这两个最基本的材料制备与成形过程为主线,详细介绍从宏观至介观尺度的多尺度模拟的基本理论和方法.考虑到在校本科生尚未接触数值分析方面的知识,书中简要介绍材料科学的数学建模基础、数值分析方法、C语言编程基础和数据处理的基本知识等内容.为了满足研究生学习并保持本书内容在材料科学数值模拟的完整性,本书对微观至宏观尺度的主要模拟方法进行较详细的介绍,如第一性原理、分子动力学、元胞自动机、多尺度模拟方法,以及当前受人关注的准连续介质多尺度模拟方法等.

各章节内容及特点如下.

第1章:计算材料科学数学建模,简要介绍数学建模基础和数学建模方法,并以位错运动速率模型、位错组态演化模型及其在亚微米晶材料的流动应力预测方面的应用为例,说明材料科学问题的建模方法及过程.

第2章:常用的数值分析方法,介绍材料科学数值模拟中常用的有限差分法、控制容积积分法、元胞自动机方法,以满足在校本科生进行数值模拟时对数值算法知识的基本需求;介绍C语言编程方面的基本知识,以期使学生在较短的时间内掌握实际编程技能,并给出 Gauss-Seidel 方法和超松弛方法求解线性方程组、温度场数值模拟编程例子及相应的 C 语言参考代码,供学生上机练习编程时参考.

第3章:合金凝固过程多尺度模拟,包括多尺度模拟及合金热力学基础理论、温度场模拟、材料制备过程中组织演变模拟三大内容.本章内容是作者从事多尺度模拟相关理论和实践研究的工作总结,多数内容属尚未发表的最新结果.在多尺度模拟方面,较为详细地说明了其作用、基本原理及存在的问题;在合金热力学基础理论方面,介绍相变热力学基本理论及相变预测,并着重介绍目前常用的 Miedema 模型、作者对二元 Miedema 模型修正的结果,以及以此为基础建立的三元形成焓模型;在温度场模拟部分,重点给出连续铸造条件下温度场模型的建立、边界条件的处理、潜热的处理及温度场模拟的有限容积方法,并以铝硅合金半连续铸造过程为例进行模拟;在组织演变模拟部分,以介观尺度上的元胞自动机方法为基础,较详细地论述形核计算(需要相对较大网格)与长大计算(需要较细网格)之间存在的矛盾及解决的方法;在形核部分利用概率论方法建立临界形核概率模型及相应的 C 程序参考代码,测试网格尺寸及网格细分对临界形核概率的影响,这一结果改变了目前常用的形核计算模型和方法(如 Rappaz 模型);在生长模型部分给出基本参量的确定方法,尤其在溶质再分配和界面前沿溶质浓度分布方面,介绍作者根据几何关系建立的理论模型,顺便指出该内容有待进一步研究完善,但不影响其对 CA 建模的参考作用;在国内外学者关注的近邻元胞开动模型及算法上,作者将相界面近似为垂直于晶体生长方向的平面,给出一个全新二维和三维模型,实现物理模型与元胞自动机规则较完美的统一,无需在计算过程中对生长过程进行分段处理或对生长方向不断调整,消除元胞形状对晶体生长方向的影响.本章以近液相线半连续铸造制备半固态铝合金坯料为例,介绍多尺度模拟温度场和微观组织以及进行工艺优化的理论和方法.

第4章:形变再结晶过程多尺度模拟,内容包括再结晶概论、塑性变形力学基础、再

结晶组织演变模型及应用实例。考虑到材料物理专业学生在塑性变形力学方面的知识欠缺及本章内容的系统性,对再结晶基础知识和塑性变形力学基础两部分内容进行必要的论述,为形变和再结晶过程的多尺度模拟的理论建模和分析奠定基础。本章的介观尺度计算方法同第3章,但在数理模型建模方面,作者给出利用宏观尺度模拟(如有限元分析)计算形变储能分布的方法,并给出临界形变储能理论模型,将组织模拟所需的微观参量与宏观尺度上的变形和热处理温度等参量的模拟结果联系起来。本章以定向凝固高温合金的形变再结晶过程为例对所建模型进行数值模拟分析和验证。

第5章:分子动力学模拟方法,介绍微观至纳观尺度模拟基本原理,着重介绍分子动力学模拟的基本理论和方法,并以一个合金凝固的具体实例说明分子动力学模拟的应用。

第6章:准连续介质多尺度模拟方法,介绍当今备受国内外学者关注的一种多尺度模拟方法。本章详细介绍准连续介质方法的基本原理,并利用该方法模拟材料表面微纳级精度加工的过程,说明该方法在现代微纳制造加工领域中的应用。

第7章:第一性原理计算方法,着重介绍密度泛函理论和基于密度泛函理论的第一性原理计算方法,并以NiAl合金为例说明加入合金化元素Mo和Ru时系统电子结构的第一性原理计算,以态密度计算结果来分析合金元素的占位倾向性。

第8章:常用的数据处理方法,主要介绍数据处理的基本方法,包括利用C语言编程进行数据拟合、用Excel分析软件进行数据拟合、用Origin分析软件进行数据处理,以及用Origin和Matlab进行平面图形的绘制等,以便对数值模拟和计算的数据进行处理和分析。

本书共8章,其中第5章和第7章由孙本哲撰写,其他章节由周志敏撰写。本书可作为在校本科生的“计算机在材料科学中的应用”、研究生的“计算材料科学”等相关课程的教材或参考书,也可供从事材料科学研究的教师和研究人員参考。本书已经在东北大学教学使用过十多年,并且在使用过程中不断更新和完善。应该说明的是,书中一些内容是作者新近研究工作的总结,尚属首次与读者见面,肯定存在许多不完善的地方,将这些内容写进本书的目的是想借此向在校学生介绍建模和进行材料模拟实践的思路,并与同行进行交流。在数值计算与计算机技术发展日新月异的今天,计算材料科学领域中的新方法、新应用不断出现,由于作者时间仓促和学识有限,书中疏漏和不足之处在所难免,敬请广大读者批评指正。

最后,感谢作者的学生们在校期间所做工作对本书的贡献,感谢中国科学院金属研究所高温合金研究部和清华大学摩擦学国家重点实验室对本书部分研究工作的支持,同时也感谢科学出版社的大力支持。感谢国家自然科学基金(项目编号:50674032, 51034002)对本书部分研究工作的支持。本书的出版得到东北大学“计算机在材料科学中的应用”出版立项的支持。

作 者

2012年12月于东北大学



目 录

前言

绪论	1
第 1 章 计算材料科学数学建模	6
1.1 建模基础	6
1.1.1 模型及其作用	6
1.1.2 模型的分类	7
1.1.3 建模步骤和原则	8
1.1.4 常用的建模方法	9
1.2 建模实例	10
1.2.1 位错运动速率模型	10
1.2.2 位错组态演化模型	15
参考文献	25
第 2 章 常用的数值分析方法	27
2.1 有限差分方法	27
2.1.1 差分方程的建立	28
2.1.2 差分方程的求解方法	29
2.1.3 误差分析	32
2.2 控制容积方法	33
2.2.1 控制方程的守恒性	33
2.2.2 控制容积法的空间区域离散	34
2.2.3 控制容积法	35
2.3 元胞自动机方法	37
2.3.1 基本原理	38
2.3.2 邻居类型	39

2.3.3 计算方法	39
2.4 C语言编程基础	40
2.4.1 基本语句	40
2.4.2 指针及其应用	44
2.4.3 结构应用	47
2.4.4 编程实例	49
参考文献	61
第3章 合金凝固过程多尺度模拟	62
3.1 多尺度模拟及合金热力学基础理论	62
3.1.1 多尺度模拟概述	62
3.1.2 合金热力学理论	70
3.1.3 二元合金形成焓模型	77
3.1.4 三元合金形成焓模型	86
3.2 合金凝固温度场数理模型及模拟	95
3.2.1 合金凝固温度场数理模型	95
3.2.2 半连续铸造温度场数值模拟	103
3.3 凝固组织演变模拟理论与方法	113
3.3.1 液固相变的元胞自动机模型	114
3.3.2 微观组织演变数理模型	115
3.4 半固态铝合金凝固组织模拟及工艺优化	155
3.4.1 微观组织评估的量化模型	156
3.4.2 铝合金凝固组织的多尺度模拟与实验比较	157
3.4.3 基于多尺度模拟的半固态合金设计及工艺优化	162
参考文献	171
第4章 形变再结晶过程多尺度模拟	183
4.1 再结晶概论	183
4.1.1 影响再结晶的主要因素	184
4.1.2 再结晶基本理论	188
4.2 塑性变形力学基础	194
4.2.1 基础变量及其表示方法	194
4.2.2 静力平衡方程和几何方程	196
4.2.3 塑性本构方程	198
4.3 再结晶组织演变模型	208
4.3.1 形核模型	209

4.3.2	晶核长大模型	213
4.3.3	晶粒长大模型	213
4.3.4	元胞自动机模型	214
4.4	形变再结晶过程多尺度模拟实例	214
4.4.1	塑性变形数值模拟	214
4.4.2	再结晶组织演变数值模拟	217
	参考文献	221
第5章	分子动力学模拟方法	224
5.1	微观至纳观尺度模拟基本原理	224
5.1.1	波函数与薛定谔方程	224
5.1.2	玻恩-奥本海默近似	227
5.2	分子动力学方法简介	229
5.2.1	分子动力学基本思想	231
5.2.2	分子动力学计算流程	232
5.3	分子动力学基本理论	233
5.3.1	分子动力学系综	233
5.3.2	原子势函数	238
5.3.3	边界条件、初始条件	243
5.3.4	数值求解方法	244
5.4	分子动力学模拟实例	247
	参考文献	250
第6章	准连续介质多尺度模拟方法	253
6.1	准连续介质方法的基本原理	254
6.1.1	系统计算总体构架	255
6.1.2	有限变形的连续体构形	256
6.1.3	复杂 Bravais 晶格的原子级本构关系	260
6.1.4	局域/非局域交界面的耦合	264
6.1.5	有限温度效应模型	267
6.1.6	网格的自适应	269
6.2	材料表面微纳级精度加工的 QC 方法模拟	269
6.2.1	单晶铜微纳加工过程模拟	270
6.2.2	单晶硅微纳加工过程模拟	276
6.2.3	硅/铜复合材料微纳加工分析	280
	参考文献	281

第 7 章 第一性原理计算方法	285
7.1 概述	285
7.2 密度泛函理论	289
7.2.1 近似方法.....	289
7.2.2 Hohenberg-Kohn 定理	290
7.2.3 Kohn-Sham 方程	291
7.2.4 交换-关联泛函.....	292
7.2.5 自洽计算.....	293
7.3 基于密度泛函理论的第一性原理计算方法	294
7.3.1 原子轨道线性组合法	294
7.3.2 正交化平面波方法	294
7.3.3 赝势方法.....	295
7.3.4 线性缀加平面波方法	296
7.4 电子结构的第一性原理计算	298
7.4.1 电子结构.....	298
7.4.2 计算软件介绍	301
7.4.3 电子结构计算结果分析的经验方法	312
7.5 第一性原理计算实例	315
参考文献.....	318
第 8 章 常用的数据处理方法	320
8.1 数据拟合方法及其计算分析	320
8.1.1 基本原理.....	320
8.1.2 参考程序代码	322
8.1.3 数据拟合程序应用	325
8.2 用 Excel 分析软件进行数据拟合	329
8.3 用 Origin 分析软件进行数据分析	331
8.3.1 理论建模初步	331
8.3.2 实验数据的拟合分析	333
8.4 二维平面图形的画法	338
8.4.1 用 Origin 软件画温度场	338
8.4.2 用 Matlab 软件画温度场	339
参考文献.....	341



绪 论

材料是人类生产和生活水平提高的物质基础,是人类文明进步的重要支柱和标志。材料的发展取决于社会生产力的提高和科学技术的进步,同时材料的发展又推动了社会经济和科学技术的发展。自 19 世纪以来,人们对新材料的需求日益增加,对材料的认识也不断深入,并且科学技术的进步促进了材料科学学科的形成。到 20 世纪,以新材料技术为基础的信息技术、新能源技术、生物工程技术、空间技术和海洋开发技术的新技术群,使材料科学得到飞速发展。到 20 世纪 60 年代,材料、能源和信息一同被称为当代文明的三大支柱;经过之后 10 年的发展,新型材料又与信息技术和生物技术一起被人们视为新技术革命的主要标志。

材料科学与工程是研究材料组成、结构、性能、制备工艺和使用性能以及它们之间相互关系的科学。人们在长期实践中认识到,材料的性质是材料对电、磁、光、热、机械载荷等功能的反映,这些性质不仅依赖于材料的化学成分,而且在很大程度上取决于材料的微观组织结构。迄今为止,人们生活和生产中使用的材料种类繁多,并且材料的成分都已系列化。因此,从某种意义上说,材料的微观结构研究对于提高材料的性能具有更普遍的意义。理论上讲,微结构的演变方向可依据热力学原理判断,而微结构演变的实际路径则是由动力学决定的。在工程材料中,热力学非平衡机制可给出各种可能的、复杂的微结构,这样的微结构不是平衡态,而是处于远离平衡的状态,正是这些非平衡状态使得材料显示出各种独特性质。因此,材料科学与许多基础学科(如固体物理学、固体力学、电子学、光学、声学、数学与计算机科学等)有着不可分割的联系。

随着计算机技术的不断进步,计算机运行速度和存储能力不断提升,数值模拟与计算在科学研究和工业应用方面的应用越来越广泛,并且随着人类对物质不同层次的结构及动态过程了解的深入,可以用计算机精确模拟的对象日益增多。在材料科学领域,人们对定量预测要求的不断增加,大大促进了数值模拟在材料科学中的应用。针对材料科学不同领域的数值分析和计算方法不断出现和完善,在数值模拟技术的发展过程中产生了不少通用的模拟软件。这些软件在实践应用中经历了不断的发展、融合、完善,最终形成了一些具有品牌效应的商业软件,如:目前比较流行的 ANSYS、MARC、ABAQUS 等宏观通用有限元软件、应用针对性更强的 ProCAST 等(凝固)专业模拟软件、微观至纳观尺度上的分子动力学模拟软件和集成多种模拟方法的 Materials Studio 材料模拟软件等。这些应用软件对解决实际问题起到了十分重要的作用,使计算机模

拟成为材料科学与工程领域中不可或缺的研究手段。材料的计算模拟与设计已逐渐发展成为独立于材料科学、物理学、计算机科学、数学等学科的一个新的跨学科领域——计算材料科学,并且正在迅速成熟和完善。1992年末,由 Institute of Physics Publishing 出版的 *Modeling and Simulation in Materials Science and Engineering* 和由 Elsevier Science Publishers 出版的 *Computational Materials Science* 两个关于计算机模拟的专业性杂志的问世,大大推动了材料领域数值模拟与计算研究的发展,是材料科学领域中研究方法变革的重要标志之一。

数值计算与计算机模拟几乎已渗透到材料科学与工程的各个方面。在材料物理领域,可借助第一性原理、分子动力学等方法在原子尺度上预测微结构的一些现象;在介观层次上可以利用蒙特卡罗方法、元胞自动机方法或相场方法等预测凝固相变或再结晶过程中的晶粒形貌和微观组织的演化过程;在机械工程学方面,可以利用有限元方法模拟解决大尺度的结构问题。

一、材料制备与加工过程的数理模型与计算机模拟

利用数值计算模拟技术对真实的系统进行模拟“实验”并指导新材料研发是进行材料设计的有效方法之一。材料设计中的计算机模拟对象遍及材料研制到使用的全过程,包括成分、结构、性能、制备和使用等。一般来讲,当相关的科学理论比较成熟时,用计算机模拟方法进行研究要比真实的实验方便快捷,受到的客观条件的限制少,而且速度快、成本低,根据计算机模拟的结果可以预测可能的实验方案,提高实验效果。因此,计算机模拟可以部分地代替实验。此外,计算机模拟对于理论的发展也有重要的意义,可以对实验室中无法实现的探索研究进行详细的预测,获得有价值的信息。例如,材料在极端压力或温度下经历的相变过程;再如材料科学中一些发展极快的过程。用现有的测试技术无法监测的问题,也可以借助计算机模拟技术进行详尽的研究,从而超越过去只能根据最终状态的测试结果对过程中的变化机理进行推论的传统研究方法的局限。

就材料科学领域而言,研究的主要目标有两个:一个是弄清材料性能与其组分和微观组织结构之间的关系,另一个是弄清微观组织结构与制备工艺之间的关系。目前,材料科学还是一门发展不完善的学科,还没有相对完备的理论和数理模型能够普遍描述材料领域的规律,人们对材料性能及其制备过程中的一些变化规律及其产生的机理还没有完全掌握,对材料的认识很大程度上还依赖于已有事实和经验的积累,正因如此,使得计算与数值模拟在材料科学研究中起着举足轻重的作用。

1. 宏观尺度上工艺过程的数理建模与计算模拟

材料科学研究的目的就是得到优异的具有特定使用性能的材料,而这些材料的获得要通过一定的制备和加工工艺过程才能实现。材料在一系列的温度、压力等环境因素作用下,其内部结构演变成一定的形态,从而具备我们期望的性能。材料的制备与处

理的最基本方法莫过于凝固(铸造)和形变再结晶(加工和热处理)。在凝固过程中,影响微观组织的基本参量就是温度,温度的高低、分布、变化速率将直接决定材料最终的组织及性能;对于形变再结晶过程来说,除了温度场之外,塑性变形的应力应变是影响再结晶组织的主要因素。因此,要利用数值模拟与计算来预测材料的组织和性能,首先要知道材料所处的环境条件以及由此引起的材料内部的温度场、应力应变场、电磁场等影响组织演变的物理量的大小和分布。在绝大多数情况下,我们无法通过实验确定这些在很小的尺度范围内的参数,通过数值模拟是满足这一要求的唯一经济有效的途径。目前,用于宏观尺度物理量数值模拟的常用方法是有限元分析,如前述的商业有限元软件;还可根据实际问题进行建模,采用适当的数值分析方法进行数值求解以获得所需要的结果。

2. 微观组织演变的数理建模与计算模拟

材料的性能是由其化学成分和微观结构决定的,对于化学成分一定的材料(如金属合金),其微观组织由制备工艺过程及技术参数决定。就材料相关的数理模型研究与数值模拟技术的发展来看,人们在材料力学行为的数值模拟方法的研究方面发展较为成熟,而对微观组织数值模拟的发展相对滞后,主要因为对微观组织的数值模拟不但要求较严格的材料科学理论基础,而且对计算机的能力和计算技术有较高的要求。

对材料性质的研究是在不同尺度层次上进行的,相应地计算机模拟也可根据模拟对象的尺度范围而划分为若干层次,如电子层次(如电子结构)、原子分子层次(如结构、力学性能、热力学和动力学性能)、微观结构层次(如晶粒生长、烧结、位错、极化和织构等)以及宏观层次(如铸造、焊接、锻造和化学气相沉积)等,其对应的空间尺度大约为 $0.1\sim 1\text{nm}$, $\sim 10\text{nm}$, $\sim 1\mu\text{m}$ 以及 $1\mu\text{m}$ 以上的尺度。正因为计算机模拟技术可以从微观上研究原子间的相互作用,对于一些现有的观测手段无法直接观察到的过程,如各种组织形成的规律、凝固过程、非晶态的形成、固态相变中原子间的相互运动和晶体缺陷及其运动、晶界结构、裂纹的产生和扩展等问题都可以用计算机模拟方法进行深入精细的研究。

由于微结构组分在空间和时间上分布范围很大,加之晶格缺陷之间各种可能的相互作用的复杂性,要从物理上量化地预言微结构的演化与微结构性质之间的关系,在一定的尺度上构建合理的数理模型并采用适当的模拟方法就显得十分必要。尤其是对不能给出严格解析解或不易在实验上进行研究的科学问题更是如此。就工程问题而言,应用数值近似方法进行预测计算可以有效地减少为优化材料和设计新工艺所必须进行的大量实验,极大地促进新材料及其制备工艺的优化和发展。

就常见的凝固和形变再结晶过程中组织变化而言,在材料制备时通常要了解几个基本参数,如晶粒形貌、大小和分布,析出的第二相的形态、大小和分布等信息,通过介观至微观尺度上的模拟计算可以获得这些相关信息。对于微纳加工过程,我们关注的微结构变化与原子的状态有关,因此可用微观至纳观尺度上的分子动力学或准连续介质方法模拟。

二、材料科学研究中的数值模拟与计算方法

作为理想的微结构模拟方法应该满足三个方面的要求:其一,能够正确定量地给出与路径无关的微结构性质;其二,有助于进一步理解各种空间和时间尺度上支配微结构演化的复杂的热力学规律和与路径无关的物理定律;其三,通过模拟可以代替实验或者弥补实验方法上的不足。从工程角度来讲,微结构模拟应该能够针对技术应用中未曾研究过或未经实验检验的情况,给出对材料性质及其微结构演化的预言和理解。为了适应这一要求,并同时模型的预测结果进行优化,越来越多的数值计算方法被应用到了材料计算中。

微结构是所有热力学非平衡态的晶格缺陷在空间分布的集合,其空间尺寸可以从纳米量级到微米量级,所对应的时间尺度从数皮秒到数年。因此,在计算机模拟时要求在不同的尺度上进行建模,并采取合适的计算技术,以适应计算机的运算能力的要求。通常,可以把不同层次的微结构模型大致分为纳观、微观、介观和宏观等系综。纳观尺度是指原子层次,微观尺度对应小于晶粒尺寸的晶格缺陷系综,介观尺度对应于晶粒尺寸大小的晶格缺陷系综,而宏观尺度则对应于材料的宏观几何尺寸。在很多情况下,要模拟微结构的变化,需要知道一些物理量在不同尺度上的变化,如前所述的凝固过程中的温度,需要通过宏观尺度上的数值模拟确定其在特定的工艺条件下的分布,在组织模拟时又需要在介观尺度上确定其与相变的相互作用。因此,同一个过程的计算涉及不同尺度上的耦合问题。近年来出现的多尺度模拟方法是通过不同模拟层次之间尺度的转换使计算机编码进行耦合,实现对材料制备与微观组织演变过程的模拟。通常,多尺度模拟的编码耦合过程由同步集成或顺序集成来实现,前者是在一个计算机实验中同时调用各种有相互影响的模拟代码,而后者通过一个恰当的参数变换来实现不同模拟层次之间的转换,并根据时间顺序逐步调用。

宏观尺度上的数理建模通常都采用连续介质方法。对于空间尺度大于 $1\mu\text{m}$ 的材料对象,模拟时已不用考虑材料中个别原子的行为,而采用所谓“连续介质模型”(如材料的弹/塑性、断裂力学、扩散、热传输和相变等)。而对于更大的空间尺度,则涉及材料的工程模拟和使用中的行为模拟(如寿命预测、环境稳定性和老化等)。宏观尺度上最为常用的模拟方法是有限元方法,另外控制容积方法也是材料计算中常用的方法,还有其他许多方法。总体来看,宏观尺度上的模拟是迄今发展最为完善的方法。

介观至微观尺度上的数理建模与计算模拟是近来发展最为迅速的一个方向。通过介观尺度模拟可以获得材料科学研究及工程应用领域中人们最为关注的基本问题,如晶粒的形貌、大小和分布等。介观尺度模拟介于宏观与微观之间,既不能采用宏观的“连续介质模型”,也不能采用微观尺度上的反映原子形态变化的方法。相关的模拟方法不断出现,但均需进一步发展完善。介观尺度上比较有代表性的模拟方法有元胞自动机方法、蒙特卡罗方法和相场方法等,这些方法各具特点,其中元胞自动机方法从物

理基础、建模特点、计算效率等综合考虑具有较好的适用性,是最有希望像有限元方法一样广泛应用于实际的一种方法。

微观至纳观尺度上的数理建模与计算模拟的最具代表性的模拟方法是分子动力学方法,这也是发展比较成熟的一种方法,它通过原子间的相互作用,跟踪原子的运动轨迹和位置,从而获得微观结构的特点,研究材料的性能。目前,有关分子动力学的基础理论及算法较多,并且有不少商业软件,也可很容易地获得相关的开放程序代码。但是应指出的是,分子动力学方法中较为关键的是描述原子间相互作用的势函数。对于一般较为复杂的工业合金体系,用分子动力学模拟的一个问题是势函数建模问题。另外,可计算的尺度范围和效率也是分子动力学的一个问题。近年来,一个新的多尺度模拟方法——准连续介质方法将有限元计算与分子动力学方法有机地融合起来,可以模拟分子动力学可以分析的问题,同时计算的尺度范围显著扩大,计算效率大大提升。小于纳观尺度模拟的代表方法是第一性原理或从头计算方法,仅利用有限参数即可对一些微观特性(如合金相的尺寸特性等)进行计算,从头计算也是发展较为完善的一种方法。

三、计算与实验数据的可视化和模型化处理

在材料科学研究中要通过实验获得大量的数据,是非常重要的原始数据,可借助计算机进行保存、处理(计算、绘图、拟合分析等)和快速查找。目前,用于数据管理、分析以及绘图的软件很多,有些功能非常强大,有些虽相对简单,但比较专业化。

材料性能与其结构有着密不可分的关系,这些结构包括原子组成、晶体结构以及在此基础上形成的微观组织。这些结构中与美国性能直接相关的是微观组织结构(如材料的晶体结构将对其力学性能产生很大影响)。这些技术往往以二维图像方式表述材料的凝聚态结构,如何从这些图像中获取有用的结构信息,如晶体的大小、分布、聚集方式等,并将这些信息与材料性能相联系,是材料研究的基本技巧。

本书旨在向材料工作者及在校学生介绍计算材料科学领域数理模型的建模方法、宏观至纳观尺度上具有代表性的模拟方法,以及多尺度模拟理论及方法,以期将反映微观组织演变及工艺参数联系起来,实现组织性能的数值模拟及计算机科学预报。

参 考 文 献

- [1] 罗伯 D. 计算材料学. 项金钟,等,译. 北京: 化学工业出版社, 2002.
- [2] 荆涛. 凝固过程数值模拟. 北京: 电子工业出版社, 2002.
- [3] 吴兴惠, 项金钟. 现代材料计算与设计教程. 北京: 电子工业出版社, 2002.
- [4] 许鑫华, 叶卫平. 计算机在材料科学中的应用. 北京: 机械工业出版社, 2003.
- [5] 熊家炯. 材料设计. 天津: 天津大学出版社, 2000.
- [6] 周志敏. 位错组织演化. 沈阳: 东北大学出版社, 2003.



第 1 章 计算材料科学数学建模

数学模型与计算机模拟在现代科学技术发展中的作用越来越突出,在各学科领域中所涉及的科学问题及其规律的描述日益量化、精准化和合理化,科学的数学模型和精细的计算模拟已成为当代科学研究的一个重要发展趋势。数学模型是对实际问题进行定量的数学描述,并利用数学理论进行科学分析和表达。数学建模是一种具有创新性的科学方法,它将现实问题简化和抽象为数学问题或数学模型,然后采用适当的数学方法求解,进而对现实问题进行定量的分析和研究,最终达到解决实际问题的目的。计算机技术的发展为数学模型的建立和求解提供了有效平台,极大地推动了数学与其他科学技术领域间的相互联系与发展。

材料科学作为 21 世纪的重要科学领域之一同样离不开数学。适当的数学建模和定量的计算机模拟已成为当今材料科学研究和处理实际问题的重要手段之一,从材料的制备、加工、性能、微观组织和结构的表征到材料的应用都可以通过建立相应的数学模型进行研究,有关材料科学的许多研究论文都涉及数学模型的建立和求解,以至产生了一门新的交叉学科——计算材料科学(computational materials science)。本章将概要介绍数学建模涉及的基本概念,并通过实例说明材料领域数学建模的方法和应用。

1.1 建模基础

1.1.1 模型及其作用

数学在科学的发展中起着非常重要的作用,利用数学模型可以量化地描述科学领域的现象、基本原理和规律等,如牛顿三定律、热力学定律等都是最经典的数学模型,这些反映某一类现象客观规律的数学表达式就是这些现象的数学模型。

我们通常把客观存在的事物及其运动形态统称为实体。模型则是对实体的特征及其变化规律的一种表示或抽象。数学模型就是利用数学语言建立的描述某一系统的特征和数量关系的符号系统。它是用数学公式、符号、程序和图表等刻画客观事物的本质属性与内在联系,是对客观事物的抽象、简化。它源于实践,却不是对原型

的简单复制,而是一种更高层次的抽象。它能够解释特定事物的各种表现形态,并对其变化结果进行预测,对其变化过程进行最优化控制,其目标是解决实际问题。因此,数学模型在科学发展、科学预见、科学预测、科学管理、科学决策等众多方面起着极为重要的作用。

对材料科学领域的对象及其变化规律和机制的精准的数学表述是材料科学发展的一个重要标志。在材料科学发展成为当今重要科学支柱的过程中,数学的应用起着非常重要的作用,它对于深刻认识和研究材料科学领域的基本规律,促进新材料的研发和应用具有十分重要的作用。在当今材料科学的研究和应用中,对相关问题的研究离不开合理的数学模型和科学的计算。

当代计算机科学的发展和广泛应用更加体现了数学模型的作用,同时也促进了数学模型的发展,加速了数学向各个学科的渗透。在材料科学与工程领域,数学模型与模拟受到人们的广泛关注和大量应用,其作用达到了几乎与实验研究同等重要的位置,广泛应用于新型材料的设计、工艺的优化与控制、生产过程分析和改进等,大大节约了人力、物力和财力,甚至完成实验无法完成的任务。

1.1.2 模型的分类

数学模型按照不同的分类标准有着多种不同分类。

(1)按照人们对实体的认识过程,数学模型可以分为描述性模型和解释性模型。描述性模型是从特殊到一般,从分析具体客观事物及其状态开始,最终得到一个数学模型,客观事物之间量的关系通过数学模型被概括在一个具体的数学结构之中。解释性模型是从一般到特殊,从一般的公理系统出发,借助于数学理论和方法,对公理系统给出正确解释。

(2)按照建立模型的数学方法,可以分为初等模型、微分方程模型、随机模型等。初等模型指采用简单的初等方法建立的数学模型,该类模型包括采用代数法、图解法等建立的数学模型。微分方程模型是在所研究的现象或过程中,通过对问题局部或瞬间的分析,找出有关变量和未知变量的微分关系,从而获得系统的数学模型。微分方程模型在材料科学研究中的应用很广泛,如对材料中的传热、传质、流动等现象和过程的描述。随机模型是利用概率统计方法建立的描述随机现象的数学模型。例如,对合金凝固时的相变形核这一典型的随机过程的描述。

(3)按照模型的特征,可以分为静态模型和动态模型、确定性模型和随机模型、离散模型和连续性模型、线性模型和非线性模型等。在许多系统中,由于受到一些复杂和不明因素的影响,使得系统在有确定的输入时得不到确定的输出,称该系统为随机系统,它的数学模型为随机模型。反之,当系统有确定的输入时,输出就确定,这样的系统称为确定性系统,它的数学模型为确定性模型。如果系统的有关变量是连续变量,则称其为连续系统,它们的数学模型为连续性模型。如果系统的有关变量是离散变量,则称该