

Computer
Application in Material
Science

计算机 在材料科学中的应用

李 琼 郝兴安 编著
李 勇 曹家龙



电子科技大学出版社

计算机在材料科学中的应用

Computer Application in Materials Science

李 琼 郝兴安 李 勇 曹家龙 编著

电子科技大学出版社

图书在版编目 (CIP) 数据

计算机在材料科学中的应用 / 李琼等编著. —成都: 电子科技大学出版社, 2007. 9

ISBN 978-7-81114-641-7

I. 计… II. 李… III. 计算机应用—材料科学 IV. TP3-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2007) 第 147926 号

内 容 提 要

计算机在材料科学中的应用日益广泛, 已经发展为材料科学与工程领域的一个新学科方向。本书系统地介绍了计算机在材料科学中应用的基本理论、基本方法和相关应用。全书共分 10 章, 内容由浅入深, 采用实例分析方法, 使专业应用在内容、方法上更加具体化, 可供材料科学与工程专业本科生和研究生教学使用, 也可供相关教师和科研人员参考。

计算机在材料科学中的应用

李 琼 郝兴安 李 勇 曹家龙 编著

出 版: 电子科技大学出版社 (成都市一环路东一段 159 号电子信息产业大厦 邮编: 610051)
策划编辑: 罗 雅 曾 艺
责任编辑: 曾 艺 罗 雅
主 页: www.uestcp.com.cn
电子邮件: uestcp@uestcp.com.cn
发 行: 新华书店经销
印 刷: 成都金龙印务有限责任公司
成品尺寸: 185mm×260mm 印张 11.625 字数 283 千字
版 次: 2007 年 9 月第一版
印 次: 2007 年 9 月第一次印刷
书 号: ISBN 978-7-81114-641-7
定 价: 18.00 元

■ 版权所有 侵权必究 ■

- ◆ 邮购本书请与本社发行部联系。电话: (028) 83202323, 83256027
- ◆ 本书如有缺页、破损、装订错误, 请寄回印刷厂调换。
- ◆ 课件下载在我社主页“下载专区”。

前 言

当前，计算机在材料科学中的应用（Computer Application in Materials Science）已经发展成为材料科学与工程的一个新的学科分支，涉及很多的学科和领域，需要把材料科学的专业知识与计算机技术、计算数学、信号与系统、物理、图形图像学、自动控制技术、机械等各方面的知识技术进行综合应用。本书从2002年起作为材料科学与工程专业的自编教材在我校已经应用了5年，在使用过程中不断完善补充，内容由浅入深，在讲授基本理论和方法的同时，着重体现学科前沿的最新发展动态，力求全面系统地涵盖该专业的基本内容。本书较为系统地阐述了计算机在材料科学中应用的基本理论、基本方法和相关应用。全书共分10章，主要内容包括计算机在材料领域中的应用概述、计算机网络技术在材料领域中的应用、微型计算机的测试与控制系统、工程常用数学的计算机处理、计算机模拟基础、蒙特卡罗方法、陶瓷材料设计、常用材料模拟软件简介、T8钢淬火温度场模拟及硬度预测、计算机在金属材料中应用的综合设计实验举例。本书采用实例分析方法，使专业应用在内容、方法上更加具体化。同时，书中附有编者自己编制的相关计算机模拟程序，可供读者参考。

限于编者水平，书中错误和不妥之处难免，敬请读者批评指正。

编 者

于成都理工大学

2007年8月

目 录

绪论.....	1
第 1 章 计算机在材料领域中的应用概述.....	2
1.1 计算机与数值计算方法的进展.....	2
1.1.1 计算机的发展.....	2
1.1.2 材料物性理论和数值计算方法的进展.....	2
1.1.3 计算机在材料科学领域中的应用.....	3
1.2 材料计算与设计在新材料研究开发中的作用.....	4
1.3 计算机与分子、原子设计.....	5
1.4 材料设计与虚拟技术.....	6
1.5 建立金相分析图文系统.....	8
1.5.1 前言.....	8
1.5.2 系统的设计.....	8
1.6 高分子科学中的计算机模拟.....	10
1.6.1 计算机模拟方法.....	10
1.6.2 计算机模拟在高分子科学中的应用.....	10
1.6.3 高分子结构与性能方面的模拟.....	11
1.6.4 高分子应用方面的计算机模拟.....	11
1.7 计算机模拟在无机材料科学中的应用.....	12
1.8 扩散型相变的计算机模拟.....	14
1.8.1 引言.....	14
1.8.2 扩散型相变的计算机模拟原理.....	14
1.8.3 模型建立和 TTT 曲线的计算机模拟.....	17
1.8.4 模拟结果与分析.....	19
第 2 章 计算机网络技术在材料领域中的应用.....	20
2.1 计算机网络基本知识.....	20
2.1.1 有关计算机网络技术的一些概念.....	21
2.1.2 计算机互连网络结构.....	23
2.1.3 计算机互联网的功能和应用领域.....	24
2.1.4 计算机网络的使用方法.....	25
2.1.5 计算机网络的功能.....	26
2.1.6 万方数据库简介.....	27

2.1.7	国家图书馆网上图书馆简介	28
2.1.8	EI 数据库网上简介	31
2.1.9	SDOS 数据库网上简介	31
2.2	计算机远程材料科学与工程教学应用	32
2.2.1	概述	32
2.2.2	计算机网络化教学的形式和内容	33
第 3 章	微型计算机的测试与控制系统	36
3.1	采样及其处理	36
3.1.1	采样周期 T_s 的选择	37
3.1.2	采样方式	37
3.1.3	数字滤波	38
3.1.4	标度变换 (工程量变换)	40
3.1.5	非线性补偿	40
3.2	控制方式和控制规律	42
3.2.1	直接数字控制系统 (DDC 系统)	42
3.2.2	计算机监督控制系统 (SCC 系统)	42
3.2.3	分级控制系统	43
3.3	测试与控制系统及仪表设备	45
3.4	过程控制的数学模型	46
3.4.1	经验法	46
3.4.2	理论分析法	46
第 4 章	工程常用数学的计算机处理	51
4.1	误差分析	51
4.1.1	粗大误差的剔除方法	51
4.1.2	系统误差判别	57
4.2	数值分析	58
4.2.1	方程求根	58
4.2.2	解方程组	60
4.2.3	插值法	62
4.2.4	最小二乘曲线拟合	63
4.3	最优化方法	65
4.3.1	一维搜索方法	65
4.3.2	多维搜索方法	66
第 5 章	计算机模拟基础	68
5.1	计算机模拟的意义	68
5.2	分子动力学方法的基本思想	68

5.2.1 经典分子动力学方法	70
5.2.2 恒温方法	70
5.2.3 恒压方法	71
5.3 固体的原子扩散	72
5.4 晶体生长模拟	74
第 6 章 蒙特卡罗方法	75
6.1 引言	75
6.2 蒙特卡罗方法基础	77
6.2.1 概述	77
6.2.2 随机过程	78
6.3 蒙特卡罗模拟算法	79
6.3.1 随机数的产生	80
6.3.2 产生随机数的程序	82
第 7 章 陶瓷材料设计	85
7.1 陶瓷材料中有关设计的概念及方法论	85
7.1.1 何谓材料设计	85
7.1.2 材料设计的方法论	87
7.1.3 特性设计及其方法问题	88
7.1.4 考虑陶瓷结构的情况	89
7.1.5 组分是主要特性的情况	89
7.2 玻璃材料设计的数值算法	90
7.3 小结	94
第 8 章 常用材料模拟软件简介	95
8.1 大型通用有限元分析软件 ANSYS	95
8.2 材料性能模拟软件 JMatPro	96
8.2.1 JMatPro 能够计算模拟的材料性能	97
8.2.2 主要特点	97
8.3 多物理场耦合分析软件 COMSOL Multiphysics (FEMLAB)	98
8.4 工程仿真软件 ALGOR 介绍	98
8.5 显式动力分析程序 LS-DYNA	100
8.5.1 LS-DYNA 应用领域	100
8.5.2 LS-DYNA 的特点	100
8.5.3 应用案例——金属成型	100
8.6 板料冲压成形模拟软件 DYNAFORM	101
8.6.1 主要应用	101
8.6.2 主要特色	101



8.7 复合材料设计分析软件 ESAComp.....	101
8.8 Materials Studio.....	102
第9章 T8 钢淬火温度场模拟及硬度预测.....	104
9.1 淬火及淬火的发展.....	104
9.1.1 钢的淬火工艺.....	104
9.1.2 数值模拟的特点及淬火过程计算机模拟的特点.....	105
9.1.3 国内外淬火模拟领域研究动态.....	106
9.2 淬火过程计算机数值模拟的基本原理.....	108
9.2.1 有限元方法及 ANSYS 软件介绍.....	108
9.2.2 温度场计算基本原理.....	113
9.3 T8 钢圆柱形试样淬火温度场的模拟过程及硬度预测.....	116
9.3.1 本文淬火模拟条件.....	117
9.3.2 T8 钢温度场模拟的主要步骤.....	118
9.4 结果分析.....	119
9.4.1 温度场模拟结果及分析.....	119
9.4.2 硬度预测.....	124
第10章 计算机在金属材料中应用的综合设计实验举例.....	126
10.1 概述.....	126
10.2 固态金属的扩散的计算机模拟.....	127
10.2.1 扩散理论.....	127
10.2.2 钢的表面热处理.....	131
10.2.3 渗碳钢及其性能.....	133
10.3 钢铁渗碳的计算机模拟.....	134
10.3.1 数学建模.....	134
10.3.2 钢铁的渗碳工艺.....	136
10.3.3 程序实现.....	137
10.4 相变扩散连接界面金属间化合物生长的数值模拟.....	140
10.4.1 概述.....	140
10.4.2 理论基础.....	141
10.4.3 数学模型.....	145
10.4.4 程序实现.....	149
10.5 合金设计中的计算机应用.....	154
10.5.1 合金设计.....	154
10.5.2 合金设计中计算机应用示例.....	155
参考文献.....	159
附录一 模拟系统源程序.....	162
附录二 模拟系统源程序.....	165



绪 论

计算机在材料科学中的应用是指以计算机为手段,通过理论和计算对材料的固有性质、结构与组分、使用性能及合成与加工进行综合研究的一门新学科方向,其目的在于使人们能主动地对材料进行结构、功能与工艺的优化与控制,以便按需要开发及制备新材料。

把计算机应用于材料科学的思想产生于 20 世纪 50 年代,其形成为一门独立的新兴学科则是 20 世纪 80 年代以后的事,在我国 20 世纪 90 年代逐步有学者进行这方面的研究尝试工作。近年来,现代科学(信息技术、量子力学、统计物理、固体物理、量子化学、计算科学、计算机图形学等)理论和方法技术的飞速发展,以及计算机能力的空前提为材料计算机模拟提供了理论基础和有力手段。

计算机在材料领域中的应用的发展将使材料科学从半经验的定性描述逐渐进入半定量到定量预测和控制的更为科学的阶段。材料的计算机模拟技术及应用已经成为现代材料科学研究中最为活跃的一个重要分支。目前计算机在材料领域中的应用在国际上还没有统一的通用术语,美国习惯称其为材料的“计算机分析与模型化”(Computer-based Analysis and Modeling),欧洲则称它为“计算材料科学”(Computational Materials Science),日本则称其为“材料设计”(Materials Design),等等。尽管在用语上不完全一样,各国在研究领域和特色上也不尽相同,但基本含义是相同的。

高技术新材料是现代知识经济的重要组成部分,其发展日新月异,这为材料的计算与设计提供了发展机遇和广阔空间。计算机在材料领域中的应用具有以下特点:

(1) 具有“前瞻性”;(2) 具有“创新性”;(3) 可减少或替代实验室工作;(4) 降低研究及生产成本。

目前,随着材料科学研究工作的广泛开展和不断深入,有关“计算机在材料科学中的应用”的科技文献资料迅速增多。但这些文献大都出现在学术期刊或会议文集之中,还缺少既包括基本原理也包括最新研究成果的系统性、综合性书籍,教材(面向本科生、研究生)就更少。但 21 世纪新材料在国民经济建设中的地位越来越重要,虽然目前我国在这方面出版的教材及参考书还不多,但我们还是决定开设此门课程,目的是要学生了解材料科学的新进展,让更多人接触这一新的发展方向,缩小与国外的差距。本课程的教学目标如下:

(1) 使材料科学与工程专业的学生了解计算机在材料科学中应用的现状和发展趋势,知道所从事的材料科学研究领域中应当掌握哪些计算机技术和知识;

(2) 通过本门课程的学习引导,使他们初步掌握一些计算机在材料科学中应用的入门知识和技能,在面对这个新领域时能比较轻松;

(3) 通过本门课程介绍计算机应用技术和软件在材料科学中的应用,希望提高材料科学工作者从事材料研究工作时的效率和水平。



第 1 章 计算机在材料领域中的应用概述

1.1 计算机与数值计算方法的进展

20 世纪最重要的科技进步当属数字计算机（简称计算机）的发明和发展，计算机是一种能自动、高速、精确地处理信息，并具有计算能力和逻辑判断能力的电子设备。从 20 世纪 40 年代计算机在美国诞生起，就已经改变了整个科学领域的面貌。

1.1.1 计算机的发展

计算机发展的四个阶段	}	1946~1957年	真空管 (ENIAC等), 第一代计算机;
		1958~1963年	晶体管广泛使用, 第二代计算机;
		1964~1970年	集成电路, 第三代计算机;
		1971~2000年	大规模 (LSI) 和超大规模集成电路, 第四代计算机

世界上最早的计算机 ENIAC (Electronic Numerical Intergator and Calculator) 是在 1946 年在美国宾夕法尼亚 (Pennsylvania) 大学开发成功的，即“电子数字积分计算机”。ENIAC 共计服役 9 年，重 30t，占地 170m²，耗电 140kW，做加减运算的速度为每秒 5000 次。

我国计算机的研制始于 1958 年，目前已开发出每秒 10 亿次的银河系列巨型机。

最近，各国科学家们在机器人、计算机视觉、音像识别与处理、语言自动互译等众多领域正努力工作，以期使计算机拥有接近人的智能特性。第五代计算机（20 世纪 80 年代以后）与前四代计算机的本质区别是：计算机的主要功能将从信息处理上升为知识处理，使计算机具有人的某些智能，因此第五代计算机又称人工智能计算机。

1.1.2 材料物性理论和数值计算方法的进展

1. 材料物性研究进展

① CP方法 (R. Car和P. Parrinello在20世纪80年代中期提出) ——第一性原理分子动力学方法

可进行的计算	}	固体表面的原子结构计算
		吸附层原子排列计算
		液态金属的结构计算

②LGF 算法 (改进晶格格林函数法的算法)
可以进行复杂晶格缺陷的结构和能量的计算。

③LGF 与分子动力学方法相比具有两个优点：

}	可正确地求出距位错和杂质原子等缺陷远的原子的位移
	不存在所考察原子排列落入准稳定状态的困难

2. 数值计算方法的发展

- ①蒙特卡罗方法 (Monte Carlo, 简称为 MC);
- ②量子蒙特卡罗方法 (QMC);
- ③集团变分法 (CVM);
- ④路径概率法 (Path Probability Method, 简称 PPM)。

蒙特卡罗方法是一种基于概率统计原理的随机模拟方法, 具有缩短计算时间的优点。

1.1.3 计算机在材料科学领域中的应用

1. 原来的材料研究方法

首先进行相关的实验研究, 而后通过理论计算与实验结果比较, 如果理论与实验相符, 理论就被接受, 否则不被接收。这种研究是经验式的, 带有一定的盲目性。

2. 计算机在材料科学领域中的应用

① 由于计算机和计算方法的发展, 已开始了理论指导实践的计算和模拟工作, 亦即离开实验, 纯粹利用计算机进行材料设计与研究工作, 计算机的介入为将材料科学由实验科学迈向理论化发展做出了重大贡献。

② 傅里叶变换这种数学技术是通过计算机才能与材料研究相结合的。计算机化的傅里叶变换技术在红外、质谱和核磁共振波谱分析中的应用为人们获取分子的微观结构信息打开了方便之门, 大大提高了分析速度和准确性。今天建立在计算机技术基础之上的傅里叶变换技术和其他数学方法正在加速其在材料领域中的普及速度。

③ 计算机互联网络技术和智能化数据库技术的材料信息和检索体系, 以及远程计算机登录技术为材料学家与材料信息之间建立了有效的桥梁和纽带, 正在逐步成为材料学家获取信息的主要手段。

④ 计算机模拟技术在材料领域中的应用。计算机仿真模拟技术从根本上改变了材料实验技术。许多材料生产与加工过程的高风险性和高消耗性, 在一定程度上阻碍了材料科学的发展, 基于现代计算机模拟技术的高温、高压、高险等材料生产加工过程模拟技术的发展加快了实验材料科学的发展并使材料研究成果的产业化过程加速。

⑤ 计算机智能化技术在材料专家系统中的应用。基于计算机强大逻辑分析与计算能力的人工智能技术在加工处理材料知识方面起着重大作用。基于计算机智能化技术发展起来的专家咨询、决策、分析系统成为材料工业知识化或者知识经济走向材料领域的重要生长点。

20世纪40年代电子计算机出现时, 人们对计算机的认识仅是它强大的计算能力, 随着发展, 网络技术是计算机技术发展过程中的又一个里程碑。目前的文献和信息, 不借助于计算机网络技术已经越来越难于管理和检索。为此, 20世纪60年代中期美国麻省理工学院等建立了局域文献联机检索系统, 60年代末美国开发成功全国性的联机检索系统——RECON, 70年代以来先后开发成功DIALOG、ORBIT、STN、ISI等国际性联机检索数据库。中国于1983年开始先后与上述网络连接进入联机检索系统。随着90年代以来国际互联网络的迅速普及, 上网联机检索手段也不局限于通过几个研究单位站点, 上网手段趋向多样化, 检索手段也从委托定题、定期检索发展到多种形式的终端型检索。与此同时, 计算机网络的发展也为大型计算机的共享使用提供有利条件。通过校园网和局域网, 人们可以通过自己的个人计算机作为终端直接使用远程的大型计算机来解决自己的计算问题和共享数据资源。计算机应



用于大型材料生产加工设备的中央控制系统当中,收集反馈信息,控制生产过程。除了强大的计算和控制能力以及网络覆盖功能之外,计算机图形化和多媒体技术近年来获得了快速发展。计算机在材料远程教学、数据智能化存储、实验设计与结果分析等方面也都获得了日益广泛的应用。

总之,计算机技术的飞速发展给材料科学与工程的发展带来了机遇,材料科学与工程的不断进步也为计算机科学提出了越来越高的要求。计算机在材料领域中的应用越来越广泛。

1.2 材料计算与设计在新材料研究开发中的作用

最近,材料研究的主流正在从原来以结构材料为主体转向以功能材料为中心的新材料研究。一般对新材料的研究开发需要投入大量的资金和时间。以美国宇航局(NASA)为例,在其国家规定的研究开发期限中所需要的研究期限平均为3年,开发期限平均为4年,合计时间为7年,投产收益率不超过33%。因此,为了促进新材料的开发,有必要灵活高效地发挥计算机的作用。若利用计算机进行模拟实验,对计算机调整输入参数就可实现改变实验条件和物质组分的目的,所以若采用可靠性高的计算机,则可大幅度节约研究开发费用和时间。

利用计算机进行材料模拟计算与设计,现在已被用于新型陶瓷等新材料的研究开发。在这类研究中,为了减少“错误实验”的运行次数和降低操作的复杂程度,则有必要尽快确立材料物性的设计方法。为了加快诸如光磁记录玻璃、非线性光学玻璃等材料的开发进程,进一步了解掺杂稀土、过渡金属离子周围的原子结构和晶格振动状态等材料内部的微观信息是非常必要的。例如,最近已开始将这些微观信息综合起来,尝试进行磷化玻璃组分选择的研究工作。此外,超急冷玻璃随时间而生成微粒子的情况,除利用电子显微镜(TEM)观察以外,也可利用模拟实验进行研究。作为利用分子动力学(MD)方法计算的例子,图1-1所示为关于MgO结晶、熔融和玻璃态的模拟情况。

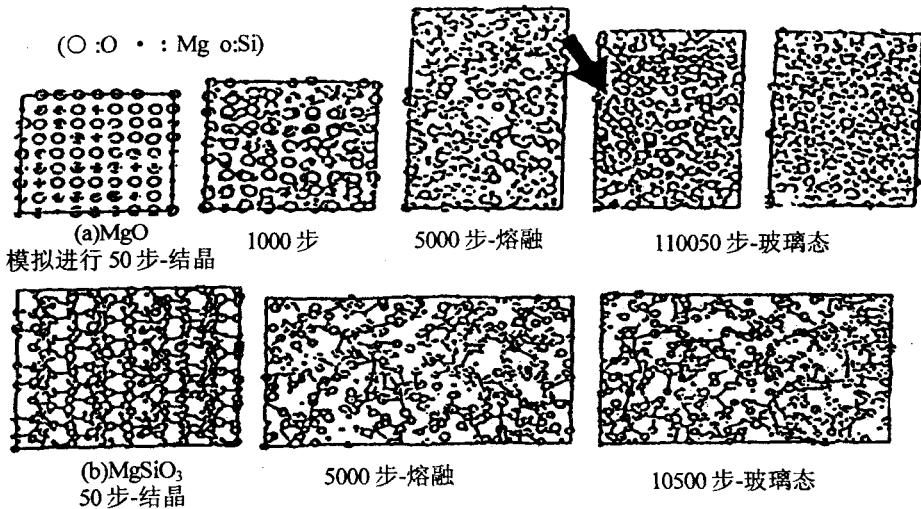


图 1-1 MgO 结晶、熔融及玻璃态的分子动力学方法模拟

为了促进新材料的开发研究,建立有关材料的数据库(DataBase)并进行有效利用是非常重要的。我国一些大学和研究所已开展了这方面的工作。为了有效地进行新物质、新材料的开发,图1-2给出了一个计算机辅助的物质与材料设计系统概念图。物质与材料设计系统(MDS)包括以下三个主要环节:①采用固体电子论和分子动力学的方法,预测新物质新材料的电子态、晶体结构、物性等,并以此为基础推出半经验定律;②建立数据库,并利用数据库导出半经验定律;③利用扩展系统,预测具有特殊功能的物质组成、原子空间排布等。就此系统而言,其特征是①,②和③三个关键环节有机地组合。可以预期,今后材料科学的研究将是“实验——数据库的更新——计算机模拟——实验合成新材料”的无限循环。

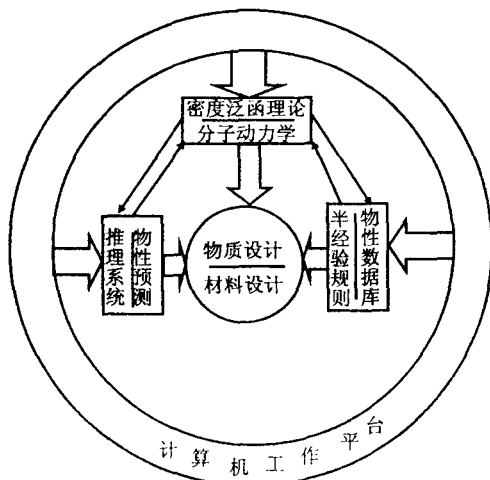


图 1-2 物质与材料设计系统 (MDS) 概念图

1.3 计算机与分子、原子设计

计算机用于分子设计比其用于物质与材料设计领域还要早一些。分子设计技术包括医药、农药方面的药物设计、聚合物分子结构设计以及陶瓷等无机化合物分子结构设计等多个方面。分子设计的目的是要明确分子具有的立体性结构、电子特性与分子功能的关系,从而设计制造出人们所希望的拥有各种使用特性的分子。为了使分子设计不过分依赖于经验和个体能力的差异,在理论计算当中,有效灵活地运用计算机技术已成为必不可少的手段。这样的趋势在最近的蛋白质工程领域已得到了充分的体现。对于立体结构不清楚的天然酵母菌,利用计算机进行结构模拟与功能预测已成为现实,并开始尝试根据功能改变而决定结构的理论计算与模拟。如图1-3所示为利用计算机设计的、具有新功能的巨大酵母蛋白酶的立体结构图。此外,在分子生物学领域,必须解读遗传信息传递结构和机理,这些研究也同样要借助计算机模拟和计算。目前,利用超级计算机在世界范围内广泛开展的人类基因组计划已取得可喜的成果。

扫描隧道显微镜 (STM) 的发明也是一件重要的事情。由于利用 STM 直接操纵原子和分子,现在已可以进行纳米尺度的物质表面探索和研究。作为直接观察从一个原子大小的埃 ($\text{\AA}=0.1\text{nm}$, 以下不再另行注明) 量级到数纳米尺寸的物质表面的一种有力手段,继 STM 之

后相继发明了原子力显微镜 (AFM)、磁力显微镜以及离子间结合力显微镜。利用 STM 技术,人们已从原有的微米级表面加工发展到现在所谓的单原子操作(有时称为超微细物质操作)。但是,通常情况下,利用超微细物质操作的表面,其原子水平的控制在今天也还是非常困难的事情。像在尖刃工具的微细加工方面,刃尖上原子水平显现的现象和特征,其机制很复杂,对其原因几乎还不能解释,而利用计算机进行模拟和解析是可能的。目前已开展微细和超微细加工方面的计算与模拟研究。

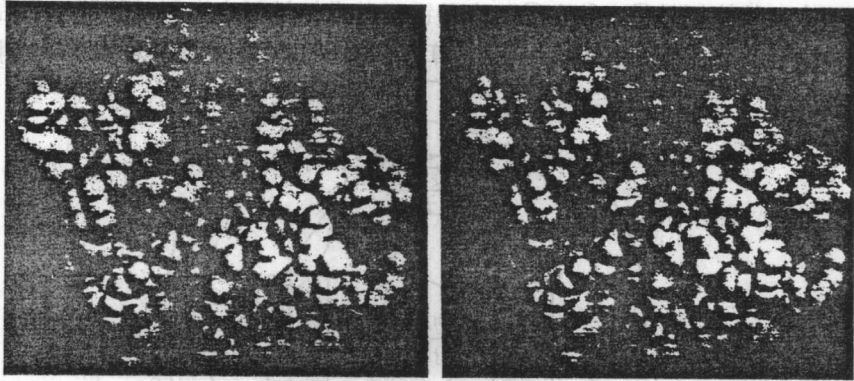


图 1-3 计算机模拟推定的新型酵母菌立体结构

1.4 材料设计与虚拟技术

下面讨论最近备受关注的虚拟现实技术在材料设计中的应用。所谓虚拟现实 (Virtual Reality, 简称为 VR) 技术是“将计算机中做出的假想世界让人感受为实际存在的技术”。它是一种先进的人-计算机接口技术,也就是利用计算机生成一种高度逼真的、模拟人在现实环境中进行视、听、动等行为的虚拟环境,通过多种传感设备使人(用户)“投入”到该环境中,实现人与环境间的自然交互,使人在虚拟世界的感受与在真实世界的感觉一样。它主要应用于机器人、软件开发、模拟 (Simulation) 外科、驾驶训练、艺术仿真等领域,其应用范围还在不断扩展。VR 技术已受到社会各界的广泛关注。据科学家们预测,在 21 世纪,虚拟现实将作为新兴产业而获得飞速发展。

VR 技术与计算材料科学进行有机地结合已开始应用于材料的物性和结构预测、加工与器件模拟等方面的研究工作,并取得了有意义的初步成果。原来的材料计算科学中所进行的计算,其模拟结果大都是用大量数值数据或二维、三维 CG 图(计算机图形学)来表示。但是,若采用 VR 技术则可对结果进行更丰富多彩的解析和表达,这对材料计算与设计来说将是一件非常诱人而重要的事情。

表 1-1 给出了关于 VR 技术针对材料的机械与力学性质诸方面可资应用的展望。若采用 VR 技术,可根据动、声、图像感受这些力学性质。例如,着眼于某特定原子,当使此原子在三维空间任意一方向运动时,由于这种运动是相应的作用力作用于该原子的结果,从而操作者会感受到(相反的)力的存在。作为处理这种力学性质的研究例子,有美国北卡罗林纳 (North Carolina) 大学的所谓“GROPEIII”分子结合系统以及 IBM 公司 Watson 研究所的“分子结构解析系统”。Watson 所的研究人员设计了一个分子伸缩感应平台,可将 AFM 的

结果直接作为指尖的触压而被感受到。如图 1-4 所示的是作为 VR 技术应用于分子设计的一个例子。

在抗癌药物中,为了弄清氧结合分子的设计情况,在计算机图解中连结着清晰的感觉显示系统,从而在分子设计中显示出自然交互(人机对话)的场景。此外,有了上述理念之后,应用 VR 技术,将有助于深入理解液体中原子分子的运动、原子的蒸发过程、辐照损伤中原子的状况、流体中涡流的形成等动力学问题;同时,对于异质界面问题的研究,仅知道原子的电子结构和原子排布情况是不够的,还要弄清楚结合强度、应力分布以及原子结合力等问题,而 VR 技术与材料科学相结合则为解决界面问题提供了一个有效途径。

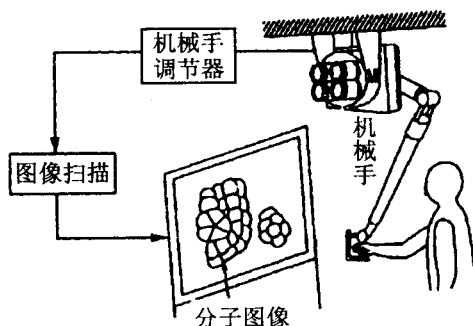


图 1-4 VR 技术应用于分子设计

综上所述,利用计算机进行新物质、新材料设计已渐渐为人们所认识和采用。但若考察材料研究与开发的整个领域,这种认识和应用还是不充分的,甚至赶不上计算机在房地产业、建筑业等领域的实用化程度。然而,应该指出的是,在面向 21 世纪的材料设计、开发中,为提高新材料开发的有效性和最大限度地减少因盲目或错误实验造成的浪费,灵活高效地运用计算机和 VR 技术必将成为材料计算与设计的一种必然趋势。

表 1-1 VR 应用于材料力学性质研究的展望

力学性质的种类	具体问题
静压	在非晶、液体、粉体中定域(局域)的静压,颗粒变小的情况
结合能	微粒团簇和原子团簇的结合能、吸附能等
弹性模量	局域弹性模量变化,纳米晶、人工晶格的超模数效应(Super Modulus),以及超屈服效应(Super Compliance)等
力	异质界面的结合力、结合强度、晶粒界面的原子间结合力、分子力;由于杂质偏析引起的粒界脆化、药物设计中的溴化甲基苯基戊酸二乙氨在乙脂(副交感神经阻滞药)的分子结合, MFM 及 AMFM(原子-分子力)模拟
应力、应变	裂缝前端的应力场、薄膜的内部应力、热应力、磁致伸缩异相界面、相变过程
材料强度(塑性形变、断裂)	屈服应力、硬度、弯曲强度、延展性、脆性、位错运动、微机械强度模拟、极限环境强度
摩擦	摩擦力、润滑、表面粗糙度、磨损耗、凝固(黏合)
振动	热振动、表面弹性波、热传导

1.5 建立金相分析图文系统

1.5.1 前言

随着计算机硬件技术的飞速发展,多媒体技术也越来越多地应用于工业生产的各个领域,如何把多媒体技术应用于金相分析领域是广大技术人员值得探索的问题。金属材料金相分析图文系统就是运用多媒体技术在金相检验工作中辅助工程科技人员的一个开放式软件系统,在实际应用中效果很好,通过本软件系统不仅可进行快速的标准查询、检索、图谱浏览、电子图谱参看对比等,可使技术工作者从繁杂琐碎的重复性、事务性工作中解脱出来,方便快速地获取所需要的数据和信息,还可按要求规范整理、打印金相报告及多媒体教学等。

1.5.2 系统的设计

本软件系统着眼于现代科技,在总体设计上完全采用国家标准,特别着眼于系统的通用性、信息的标准化与使用的方便性。

在编程方面尽可能采用模块化结构设计、可视化编程语言,方便日后调试、更新、完善。这种方法能方便地对建立系统的功能进行构造和概括。这些功能部件就是我们用可视化语言设计管理系统时所选取的对象,并且是以图形化方式表现出来的。设计要求对这些对象进行特征(属性)设置,再根据实际功能来选取和组合这些对象,便可达到构造应用系统的目的。在设计时每一步操作都反映在屏幕上,直观可视,完全以人机对话方式进行;对数据库设计、菜单设计、窗口设计、封面设计、报表设计等均可应用可视化编程语言生成,能大大提高软件开发能力及效率。

该系统具体实施步骤为:首先收集资料(包括金相分析数据资料和金相图谱等),建立大量资料库;再针对工作特性编制辅助分析的各个功能模块(如在线知识帮助功能、图谱对比功能、图像处理功能、报告输出功能等),最后组合这些功能编译成组件而完成,即根据系统流程图设计方案,如图 1-5 所示。

根据总体方案,针对各个功能模块进行调试、修改、完善,并衔接各个功能模块组合成整个系统。程序充分体现了 Windows 下的图形化操作特性;金相报告的输出要体现出所见即所得的效果;定位打印要准确;还要有程序容错及数据保护功能;最后投入生产实际运用后,再根据工作特点及需要对系统进行调整、优化或对程序界面进行美化。比如,在金相分析尤其是失效分析中需要大量的知识及经验参考、图谱对比等。以前在出失效分析报告时要参考许多文献资料,查阅很多图谱及标准,工作量繁琐。而编制图文分析系统就是收集这些资料进入电脑,组成失效分析案例数据库,随时迅速地提供给技术人员更科学、更准确、更全面的参考资料,及时地分析出可信的结论。另外建立失效分析案例库还可以根据工作特点形象地加入图形、动画甚至声音提示的视频播放,能在日后分析中随时提供图文资料参考、案例演示等。而电子图谱是在以往的图谱基础上增加了与图谱相对照材料的力学性能和化学成分,提高了图谱的参考价值,且查询更迅速、容量更大,一张电子图谱光盘可容纳照片千张以上,携带非常方便,相当于数十本图谱资料。总之,整个系统具有开放性,便于日后不断充实数据库,完善系统功能,力求达到程序操作方便、运行稳定、界面良好。

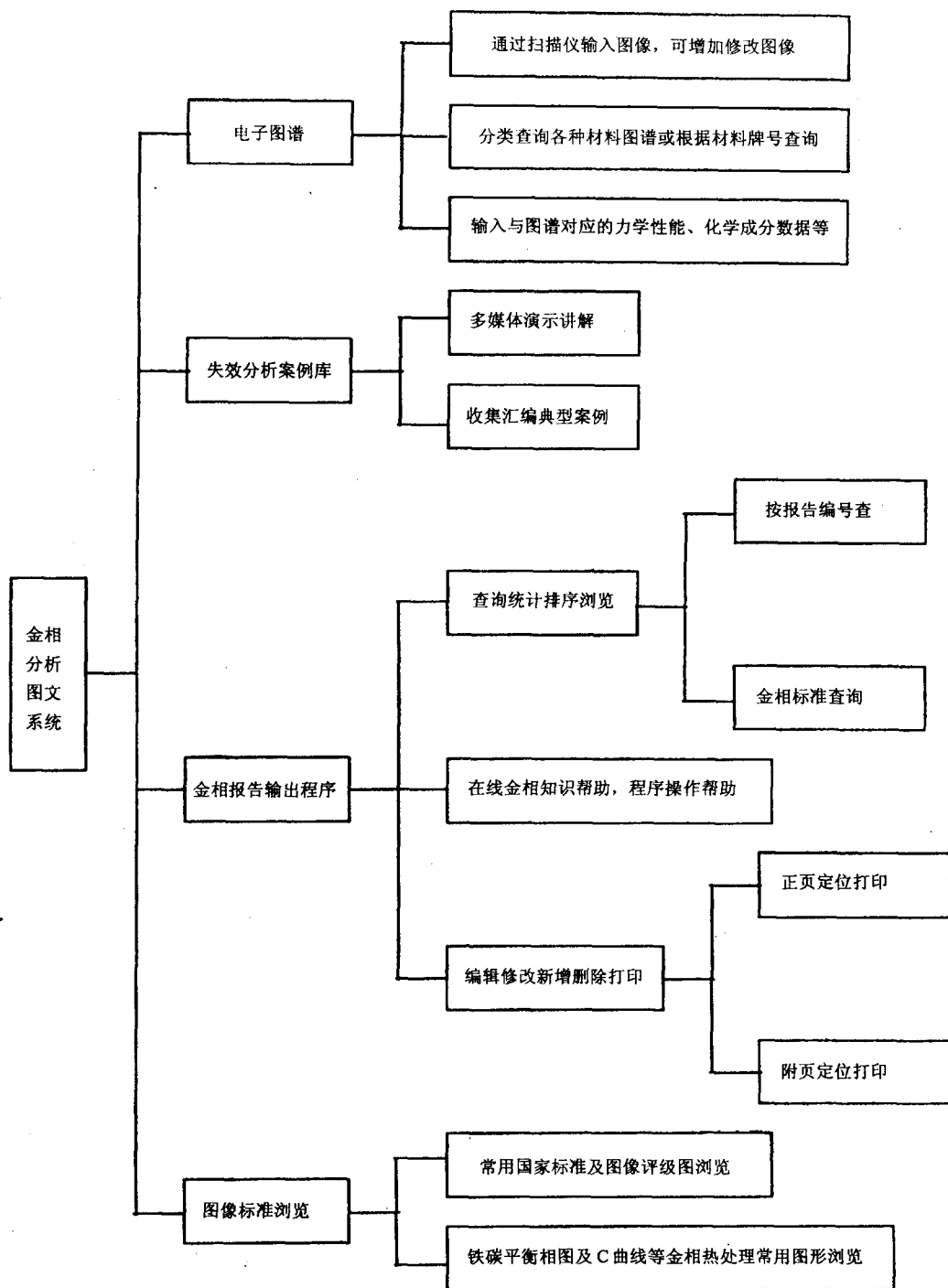


图 1-5 系统流程图

综上所述，本系统旨在建立金属材料金相辅助分析的软件系统，使计算机作为利用知识