



21世纪高等学校新理念教材建设工程

计算机在材料科学与工程中的应用

主 编 刘兴江



东北大学出版社
Northeastern University Press



21 世纪高等学校新理念教材建设工程

计算机在材料科学与工程中的应用

主 编 刘兴江

副主编 齐锦刚 曹丽云

东北大学出版社

·沈阳·

©刘兴江 2007

图书在版编目 (CIP) 数据

计算机在材料科学与工程中的应用 / 刘兴江主编. — 沈阳 : 东北大学出版社,
2007.7

(21 世纪高等学校新理念教材建设工程)

ISBN 978-7-81102-426-5

I. 计… II. 刘… III. 计算机应用—材料科学 IV. TB3-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2007) 第 115153 号

出版者: 东北大学出版社

地址: 沈阳市和平区文化路 3 号巷 11 号

邮编: 110004

电话: 024—83687331 (市场部) 83680267 (社务室)

传真: 024—83680180 (市场部) 83680265 (社务室)

E-mail: neuph@neupress.com

Web: <http://www.neupress.com>

印刷者: 沈阳市第六印刷厂书画彩印中心

发行者: 东北大学出版社

幅面尺寸: 184mm×260mm

印 张: 12.25

字 数: 313 千字

出版时间: 2007 年 7 月第 1 版

印刷时间: 2007 年 7 月第 1 次印刷

责任编辑: 王兆元

责任校对: 闻 艳

封面设计: 唐敏智

责任出版: 杨华宁

ISBN 978-7-81102-426-5

定 价: 28.00 元

前 言

本书由辽宁工业大学出版基金资助出版。

计算机技术的飞速发展,已使计算机成为自电力发明以来最具生产潜力的工具,在当今世界的各个领域日益发挥着巨大作用。同样,计算机技术在材料科学与工程领域得到了广泛的应用,并已成为材料学科的技术前沿和最为活跃的研究领域。材料科学与工程是一门研究材料的组成、结构、性能、制备工艺、使用性能以及它们之间相互关系的科学。为了适应高校的教育改革、结合专业调整改革的现状,根据材料类专业学生学习的需要,我们编写了本书。目的是增强学生的学习兴趣,拓宽其专业知识面。

本书力求加强基础理论,阐明基本方法和基本问题;反映国内外材料科学领域计算机应用的状况和最新进展,开拓学生的思路和视野。本书内容全面、新颖、系统,并且有所侧重。全书共分七章。其中,第一章介绍计算机在材料科学中的应用概况;第二章介绍基于经验电子理论对材料成分设计的计算机辅助设计,相结构因子和界面结合因子与相变及各种强化因素的关系;第三章介绍晶体凝固理论的计算机模拟研究,以及蒙特卡罗积分与模拟、分子动力学模拟、元胞自动机(CA)等方法在凝固过程中的研究应用,并针对科学研究中经常遇到的试验数据处理,介绍常用的有限差分方法及有限元的基本原理;第四章介绍热处理过程中温度场、相变过程、应力场的模拟计算方法,详细介绍了不同坐标系下渗碳浓度的计算方法,计算机的应用使材料工艺控制水平大大提高;第五章在介绍计算机检测与控制系统的构成的基础上,介绍计算机炉温控制方法、碳势控制原理和控制方法、碳势测量装置及微机碳势控制系统的构成;第六章介绍数据库、专家系统和人工神经网络的

基本原理及其在材料科学与工程中的应用实例；第七章介绍材料设计中的计算机常用软件。本书既可以作为教材使用，同时也可供其他材料科学工作者参考。

全书编写体系和章节内容由刘兴江确定。齐锦刚编写第三、六、七章；史艳华编写第一章；王冰编写第二章；赵海燕编写第四章；第五章第一节由陈晓英编写，第二~第五节由刘兴江编写。本书绘图由曹丽云完成。

在本书编写过程中，得到了辽宁工业大学的大力支持，作者对所有关心和帮助本书编写与出版的同志表示衷心的感谢！另外，各章末尾列出了主要参考文献，在此对所有参考文献的作者表示衷心感谢。

由于材料科学领域的计算机应用涉及面广，且计算机技术的发展日新月异，加之作者水平所限，书中错误和不足在所难免，敬请读者批评指正。

编者

2007年4月

目 录

第一章 绪 论	1
1.1 材料科学与工程	1
1.1.1 材料科学的研究领域及特点	1
1.1.2 材料科学的研究方法和手段	1
1.2 现代计算机技术与应用	2
1.2.1 现代计算机技术的发展	2
1.2.2 计算机技术的应用范围及特点	2
1.2.3 计算机硬件与软件	3
1.2.4 计算机的操作系统	4
1.3 材料科学与工程中的计算机应用	4
1.3.1 计算机技术在材料设计中的应用	4
1.3.2 材料科学与工程中的数据库	4
1.3.3 人工智能 (AI) 理论与材料科学	5
1.3.4 计算机模拟在材料科学中的应用	6
1.3.5 计算机用于材料性能检测	7
1.3.6 材料成型过程中的计算机应用	7
参考文献.....	9
第二章 材料价电子结构及性能的计算机分析	11
2.1 价电子理论基础.....	11
2.1.1 原子的结构与键合	11
2.1.2 余氏理论	14
2.1.3 程氏理论	19
2.1.4 余氏理论与程氏理论之间的关系	20
2.2 合金电子结构在合金成分设计中的应用.....	21
2.2.1 相结构因子	21
2.2.2 相结构因子与热力学相变的关系	22
2.2.3 界面结合因子	22
2.2.4 界面的电子结构与力学性能的关系	24
2.2.5 相结构因子和界面结合因子在合金设计中的应用	24
2.3 计算机在合金电子结构计算中的应用.....	25
2.3.1 计算机在合金相空间电子结构计算的应用	25
2.3.2 合金相界面电子结构计算	27
2.4 计算机辅助合金成分设计实例.....	31

2.4.1 耐磨材料的设计	31
2.4.2 低合金超高强度钢成分设计	34
参考文献	39
第三章 材料科学中的计算机模拟	41
3.1 计算机模拟概述	41
3.1.1 计算机模拟的历史	41
3.1.2 计算机模拟的研究范畴	43
3.1.3 材料研究的主要模拟技术	43
3.2 蒙特卡罗模拟方法	45
3.2.1 MC方法的发展	45
3.2.2 MC方法基础	46
3.2.3 MC方法在材料科学领域的应用	49
3.3 分子动力学模拟方法	51
3.3.1 MD方法的发展	51
3.3.2 MD方法基础	52
3.3.3 MD方法在材料科学领域的应用	55
3.4 元胞自动机模拟方法	59
3.4.1 CA方法概述	59
3.4.2 CA方法在材料科学领域中的应用	61
3.5 有限差分法与有限元法	64
3.5.1 有限差分方法	64
3.5.2 有限元法	68
参考文献	81
第四章 材料科学与工艺过程的计算机应用	82
4.1 计算机在材料组织转变过程中的应用	82
4.1.1 TTT和CCT曲线	82
4.1.2 TTT(等温转变)曲线的模拟	83
4.1.3 CCT(连续冷却转变)曲线的模拟	85
4.2 相图及其计算	88
4.2.1 相图计算原理	88
4.2.2 采用计算机计算相图	89
4.2.3 计算相图软件简介	95
4.3 计算机在金属热加工工艺中的应用	99
4.3.1 加热和冷却过程中相变与温度及应力之间的关系	99
4.3.2 加热和冷却过程中温度的分布计算	100
4.3.3 加热和冷却过程中溶质浓度的分布计算	103
4.3.4 金属固态相变过程的计算问题	105
参考文献	106

第五章 材料研究中的计算机控制与检测系统	108
5.1 计算机控制系统基础	108
5.1.1 计算机控制系统的构成	108
5.1.2 计算机控制系统的分类	110
5.1.3 用于工业控制的计算机分类及选择方法	111
5.1.4 计算机测控系统的输入输出部件	113
5.2 材料热加工设备的计算机控制	113
5.2.1 温度测量与控制	113
5.2.2 碳势控制原理	115
5.2.3 氮化工艺的计算机控制	116
5.3 用于材料检测的电子显微镜	117
5.4 材料组织结构的检测	118
5.4.1 金相图像分析系统	118
5.4.2 材料缺陷的计算机分析	120
5.4.3 材料显微组织的计算机仿真	121
5.5 计算机在材料性能检测中的应用	123
5.5.1 差热分析系统 (DSC)	123
5.5.2 X-射线衍射系统	124
5.5.3 材料试验机中的计算机辅助测试系统	126
参考文献	127
第六章 材料科学中的数据库及人工智能的应用	129
6.1 数据库技术	129
6.1.1 数据库技术的发展	129
6.1.2 数据库系统中的数据模型	130
6.1.3 数据库系统结构及其特点	131
6.1.4 工程数据库特点及其应用	131
6.2 材料科学领域的数据库	132
6.2.1 材料数据库的特点及发展现状	132
6.2.2 工业部门对材料数据库的需求	133
6.2.3 常用合金钢数据库的设计与实现	134
6.2.4 用于分析物质结构的 PDF 检索系统	140
6.2.5 数据库技术在材料成型领域中的应用	144
6.3 专家系统及其在材料科学中的应用	145
6.3.1 专家系统构成及工作原理	145
6.3.2 专家系统的特点及类型	146
6.3.3 材料领域应用的专家系统	147
6.3.4 典型专家系统发展与应用	150
6.4 人工神经网络技术及其在材料科学中的应用	153

6.4.1 神经网络基本理论	154
6.4.2 神经网络在材料科学中的应用	156
6.4.3 神经网络应用于材料领域的现存问题及展望	161
参考文献	161
第七章 材料科学研究中的数据与图像处理	163
7.1 利用 Origin 7.0 进行数据处理	163
7.1.1 Origin 7.0 基础	163
7.1.2 Origin 7.0 数据操作	165
7.1.3 图形绘制	168
7.1.4 曲线拟合	174
7.1.5 Origin 7.0 在材料科学研究中的应用举例	176
7.2 计算机图像处理在材料科学研究中的应用	181
7.2.1 图像处理基础	181
7.2.2 利用 Photoshop 对材料图像分析与处理	181
7.2.3 体视学与图像分析技术在材料科学中的应用	183
7.2.4 分形理论及其在材料科学中的应用	186
参考文献	188

第一章 绪 论

1.1 材料科学与工程

1.1.1 材料科学的研究领域及特点

材料是人类赖以生存的重要物质基础之一，是人类文明的重要支柱和进步的里程碑。材料的进步取决于社会生产力和科学技术的进步，同时材料的发展又推动了社会经济和科学技术的发展。19世纪以来，科学的进步和生产的不断发展，对材料的要求越来越高，从而促进了人类对材料从依靠到创造的转变，人们对材料的认识也逐渐由匠人的经验发展到形成一门科学。由于材料的获得、质量的改进和使材料成为人们可以使用的器件和部件都离不开生产工艺的制造技术等工程知识，因此，人们通常将“材料科学”与“工程”相提并论，称为“材料科学与工程”。

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。材料的有效性总体上取决于以下三个层次的结构因素：

分子结构：属于原始基础结构，决定材料所具有的潜在功能。

分子聚集态结构：决定材料所具有的可表现的实际功能。

构筑成材料的外形结构：决定材料具有某种特定的有效功能。

在分子结构层次上研究材料的合成、制备、理论以及分子结构和聚集态结构、材料性能之间关系的科学，属于材料化学的研究领域。在分子聚集态结构的基础上研究分子的聚集态结构与材料工艺、材料性能之间关系的规律性，以及材料宏观性能的结构物理学基础的科学，属于材料物理的研究领域。研究材料的外形结构与使用性能之间关系的科学，属于材料工程的研究领域。这三个层次综合起来属于材料科学与工程研究的领域，并构成材料科学的核心内容。它是在物理、化学、数学、工程等学科的基础上发展和成长起来的一门交叉学科。

1.1.2 材料科学的研究方法和手段

现代科学技术的迅猛发展，为材料科学的研究提供了越来越多、越来越先进的研究方法和手段，包括金相检测技术（宏观及微观包括扫描电镜、透射电镜、隧道显微镜、高温扫描显微镜等）、能谱分析技术、X射线衍射技术及近年来发展起来的各项模拟加速试验等等。这些技术手段中的数据采集、图像处理、复杂的数学计算及分析，大多依靠计算机来完成。材料科学实质上还是一门发展不成熟的学科，目前对它的研究在很大程度上还依赖于事实和经验的积累，系统地研究材料还是一个很长的过程。正是以上这些特点，使得计算机在材料科学的研究中起着举足轻重的作用。

1.2 现代计算机技术与应用

1.2.1 现代计算机技术的发展

计算机是一种无须人工干预就能按程序的引导对各种信息及数据进行存储、处理和输出的电子设备。计算机技术的产生是人类在 20 世纪最杰出和最重大的科学成就之一，以计算机技术为代表的信息技术的发展水平、运用水平已经成为衡量科学和社会进步程度的重要标志。

1946 年 2 月，世界上第一台电子计算机 ENIAC (The Electronic Numerical Integrator And Calculator) 在美国宾夕法尼亚大学研制成功。它的问世标志着科学技术进入了电子计算机时代，开辟了计算机科学的新纪元。

自从 ENIAC 问世以来，在短短的几十年时间里，计算机技术连续经历了几次重大的技术革命。可以说，电子器件的发展是推动计算机发展的主要动力。通常按照计算机所采用的电子器件的不同，包括电子管、晶体管、中小规模集成电路、大规模及超大规模集成电路，将计算机的发展划分为四代。

20 世纪 80 年代末到 90 年代初，随着计算机网络的迅速发展，计算机的应用又经历了一次革命性的发展。网络环境不仅为计算机系统提供了极为方便的全球性的信息互通，也出现了诸如企业管理、生产控制、金融业务处理等各行各业电子化工作管理方式及面向目标的多媒体信息应用。

目前，以超大规模集成电路为基础的电子计算机正朝着微型、网络、多媒体和智能化等方向发展。

1.2.2 计算机技术的应用范围及特点

随着科学技术的发展，计算机几乎应用于一切领域，归结起来主要有以下几个方面。

(1) 数值计算

数值计算也称科学计算，就是用计算机来完成科学研究和工程设计中提出的一系列复杂的数学问题的计算。对于人工难以完成甚至无法完成的数值计算问题，计算机都可以完成。

(2) 数据处理和信息加工

数据处理也称非数值计算，使用计算机可以对大量的数据进行分析、合并、分类和统计等加工处理，以形成有价值的信息。

(3) 实时控制

利用计算机可以对不断变化的生产过程和其他过程及时检测数据，进行分析判断，按最佳值进行自动控制或自动调解控制对象。这个过程也称为过程控制。

(4) 计算机辅助工作

计算机可以帮助人们完成各种设计工作，实现电子自动化处理。例如：计算机辅助设计 (CAD) 就是利用计算机辅助各类设计人员进行设计工作，广泛应用于机械、建筑、电气等领域；计算机辅助制造 (CAM) 是利用计算机通过各种设备自动完成对零件的加工、装配和包装过程，实现无图纸加工；计算机辅助教育 (CAE)，包括计算机辅助教学 (CAI)、计算机辅助测试 (CAT) 和计算机管理教学 (CMI) 等，使用计算机作为教学辅

助手段。

(5) 人工智能

人工智能是指研究如何设计计算机使之具有人的智能特征,即具有“推理”、“学习”的功能,这是近年来计算机应用的新领域。

(6) 多媒体技术应用

随着电子技术和计算机技术的发展,文本、动画、图像、图形、音频、视频等各种媒体综合起来构成了全新的概念——“多媒体”(Multimedia)。多媒体技术在医疗、教育、商业、银行、保险、行政管理、军事、工业、广播和出版等领域中得到了广泛的应用和发展。

(7) 计算机网络应用

计算机网络是现代计算机技术与通讯技术高度发展和密切结合的产物,它利用通信设备和线路将地理位置不同、功能独立的多个计算机系统互相连接起来,通过功能完善的网络软件实现网络中的资源共享和信息传递。

1993年9月,美国正式宣布实施“国家信息基础设施”计划,俗称“信息高速公路”计划,就是将美国所有的信息库及信息网络连成一个全国性的大网络,再把大网络连接到所有的机构和家庭中去,它将我们通常所使用的通信工具如电视、广播、报纸、电脑、传真、电话等所有的信息传递到网络用户终端,从而使人们获得信息的方式发生根本改变。面对信息化浪潮,我国也提出了发展“信息高速公路”计划的设想,将加速国民经济信息化进程摆在了突出的地位。

20多年来逐步演变和发展的Internet已为“信息高速公路”勾画出一个雏形,并为整个信息基础设施打下了一定的基础。在当今的网络时代,人们通过计算机网络可以实现数据与信息的查询、高速通信服务(电子邮件、电视电话、电视会议、文档传输等)、电子教育、电子娱乐、电子商务、远程医疗和会诊、交通信息管理等功能。

1.2.3 计算机硬件与软件

硬件系统是构成计算机的实际物理设备,是看得见、摸得着的有形实体,是计算机运行程序的物理基础。

计算机硬件系统,由主机和外围设备组成。从功能角度而言,它必须包含运算器、存储器、控制器、输入设备和输出设备五部分。微型计算机的核心部件包括微处理器(CPU)、内存储器、I/O接口电路和总线四个部分。计算机性能在很大程度上取决于硬件配置。

软件系统是使计算机实现某种特定目的所需要的程序,以及程序运行时所需要的数据和有关技术文档资料。软件系统是计算机系统的灵魂,软件需要在硬件的基础上运行。软件也是计算机硬件系统与用户之间的桥梁。

根据软件用途的不同,通常将计算机的软件系统分为两大类:系统软件和应用软件。

(1) 系统软件

系统软件是为了管理、控制和维护计算机系统,为人们方便地使用计算机而设计的。系统软件主要包括操作系统、各种语言解释程序(Basic解释程序、C编译程序等)、各种服务性程序(机器的调试、故障检查与诊断程序等)、数据库系统(Foxpro、Oracle等)等。

在软件系统中,操作系统(Operating System, OS)最重要,是每台计算机必备的系

统软件。它能对计算机系统中的软件和硬件资源进行有效的管理和控制，为用户提供一个使用计算机的基础平台，起到用户与计算机硬件之间的接口作用。目前微机上常见的操作系统有 DOS, OS/2, UNIX, XENIX, LINUX, Windows 9X/Me/2000/NT/XP, NetWare 等。

(2) 应用软件

应用软件是针对人们在某一方面的实际需要而设计开发的软件，面向应用领域和用户。应用软件主要包括文字处理软件、杀毒软件、财务会计管理软件、教学辅助软件、计算机辅助设计软件、学习软件等。

1.2.4 计算机的操作系统

操作系统是系统软件，是整个计算机系统的控制和管理中心，它能对计算机系统内的软件和硬件资源进行有效的管理和控制，合理地组织计算机的工作流程，为用户提供一个使用计算机的基础平台，起到用户与计算机硬件之间的接口作用，用户可以通过操作系统提供的各种命令方便地使用计算机、开发和使用应用系统。

操作系统说明资源的使用情况，实现多用户共享计算机系统的各种资源，为用户有效地使用计算机资源创造条件。计算机操作系统具有处理器管理、存储器管理、文件管理、设备管理、作业管理等功能。

1.3 材料科学与工程中的计算机应用

1.3.1 计算机技术在材料设计中的应用

材料设计是指依赖积累的经验、所归纳的实验规律和总结的实验原理制备具有明确目标性能材料的最佳过程。一个完善的材料设计应当包括许多环节，其核心是确定成分、工艺及性能间的关系。长期以来，材料研究采用的是依赖大量实验，进行大面积筛选的方法，消耗大量人力、物质资源和时间。由于大量尚未理论化的经验和实验规律的存在，在相当长的一段时间内，人们还不可能完全脱离经验和不进行探索性实验来进行材料设计。在这种条件下，人们的眼光转向理论辅助的材料设计和预测，先进的理论计算方法和超级计算机的结合，使材料的设计、性能预测和优化成为可能。将先进的计算机技术应用于现代材料设计，可以摆脱实验先行的研究方法，用较少的实验获得较为理想的材料，达到事半功倍的效果。

计算机辅助设计 (Computer Aided Process Planning) 是将产品零件设计信息和加工条件，通过计算机借助于工艺数据库，转换成零件的加工工艺规程，简称 CAPP。近年来，计算机辅助设计在材料设计方面的应用越来越受到重视，并逐渐开始进行这方面的实践。

近年来，人工神经网络作为一种好的信息处理方法被引入材料领域，并成为材料设计的一种有效手段，目前在材料设计方面的应用已取得了一定的进展。

1.3.2 材料科学与工程中的数据库

21 世纪，世界全面进入了信息时代，信息成为各学科发展的重要资源。随着材料学的不断发展，各种新材料层出不穷，各种材料所具有的成分、性能及其他参数成为一个庞大繁杂的信息网，技术人员需要一种可靠而快捷的查询工具对各种材料成分、性能及国内

外牌号对照等方面信息进行查询；选购材料时也需要及时了解相关信息，如生产厂家信息及其产品信息等。毫无疑问，如采用数据库系统来完成这项工作，必然会给人们的工作带来极大的方便，因此，建立各种材料数据库是非常必要和及时的。

目前已开发了多个材料学数据库，包括焊接材料数据库、超硬材料数据库、电厂金属材料数据库、复合材料数据库、冷冲模具数据库等。

1.3.3 人工智能 (AI) 理论与材料科学

人工智能 (Artificial Intelligence) 是当前科学技术中的一门前沿学科，它是一门研究如何构造智能机器 (智能计算机) 或智能系统，使它能模拟、延伸、扩展人类智能的学科。人工智能的研究范畴不只局限于计算机科学和技术，同时也涉及认知科学、思维科学、信息科学和系统科学等多种学科。

人工智能从 1956 年诞生以来，经过 50 多年的发展，取得了一定成就。20 世纪 50 年代，人工智能以博弈、游戏为对象进行研究。Samuel 研制成功了具有自学习能力的启发式博弈程序。Newell 等研制了启发式程序 LogicTheorist，开创了利用计算机研究思维活动规律的先河。1958 年 McCarthy 建立了人工智能程序设计语言 LISP，为人工智能研究提供了重要工具。60 年代前期，人工智能以搜索算法、通用问题求解的研究为主。1965 年，Feigenbaum 研制成功了 Dengral 化学专家系统，使人工智能的研究从着重算法转向知识表示的研究，这也是人工智能走向实用化的标志。70 年代前期，人工智能研究以自然语言理解、知识表示为主。1977 年，Feigenbaum 提出了知识工程。知识工程是利用人工智能的原理和方法，为那些需要专家知识才能解决的应用难题提供求解手段。80 年代，专家系统开始广泛应用，出现了专家系统开发工具，兴起人工智能产业。

总体来说，人工智能分为两大类：一类是符号智能，一类是计算智能。符号智能是以知识为基础，通过推理进行问题求解；计算智能是以数据为基础，通过训练建立联系，进行问题求解，包括模糊系统、专家系统、人工神经网络、遗传算法等。当今时代是智能技术的时代，在制造加工领域中，人们积极引入人工智能技术，并取得了很多成果。目前人工智能技术有三个主要分支：人工神经网络，模糊控制技术和专家系统。

(1) 人工神经网络技术

人工神经网络 (Artificial Neural Network) 是由大量简单的非线性单元以一定的拓扑结构相互连接的高度非线性系统，具有自学习、容错性、并行处理信息的能力，适合模拟输入与输出关系为高度非线性的系统，这一点使它特别适合于处理复杂问题。人工神经网络是人工智能的一个重要组成部分，其研究成果也日益成熟。人工神经网络有许多不同的模型结构，如 BP 网络模型、Hopfield 网络模型、Boltzmann 机等，同时建立模型也有许多学习方式，典型的有 BP 算法等。人工神经网络技术是材料研究软计算建模的重要方法，其应用几乎涉及到材料研究的各个方面。

(2) 模糊控制技术

模糊控制技术 (Fuzzy Control Technology) 是在模糊集合论、模糊语言变量及模糊逻辑推理的基础上发展起来的计算机控制技术，可实现对复杂过程对象的有效控制。从 20 世纪 60 年代中期以来，由于美国的 L. A. Zadeh 和 E. H. Mamdani 等人分别在模糊集合和模糊控制上的开创性工作，模糊控制逐渐发展成为特具吸引力和富有成果的研究领域。同建立在精确数学模型上的经典控制理论和现代控制理论相比，模糊控制更适合于多输入非线性、时变或具有高度不确定性的系统控制，而且控制器的规则设计可充分利用熟

练操作人员及专家的经验。此外, 现已将自适应和学习能力引入到模糊控制中, 使模糊控制规则、隶属函数和模糊量化在控制中可自动调整和完善。

(3) 专家系统技术

专家系统 (Expert System) 一直是人工智能领域中最活跃的分支, 它使计算机系统具有人类专家解决问题的能力, 在各个领域中已得到广泛的应用。专家系统依靠大量的专门知识来解决特定领域中复杂的问题。它的核心问题是对特定领域中用于解决问题的知识的刻画和对这些知识的利用, 因而, 拥有大量的专门知识是专家系统与其他计算机系统之间的主要区别。专家系统的理论和实际技术都还处于不断发展的时期。目前专家系统的结构没有固定的模式。通常, 一个以规则为基础、以问题求解为中心的专家系统, 主要包括下述 5 个组成部分: ①知识库; ②推理机或推理机制; ③综合数据库; ④解释接口或人机界面; ⑤知识的获取。专家系统技术在实际应用中具有很大的优越性, 它能高效、准确无误、周密地工作, 能避免人类专家在实际工作过程中难免会因疏忽、疲倦等各种因素而可能产生的错误。专家系统可汇集众多专家的经验 and 解决问题的能力, 且不受时空的限制而保留并推广应用, 因而专家系统的发展有着广阔的前景。

近些年来, 随着计算机技术、信息技术的迅猛发展, AI 技术获得较快的发展, 已引起了各行业越来越多的重视, 并进行了深入的研究和应用, 在材料学领域的应用也取得了一定的进展。如在材料成型领域、塑性加工及材料设计等领域得到了成功的应用。以轧制过程为例, 目前在轧制过程中的各个环节, 从生产计划的编排、坯料的管理、加热中的优化燃烧控制、轧制中的设定计算, 到厚度和板形控制以及成品库的管理等, 都有人工智能方法成功应用的例子, 人工智能已经成为现代化轧机高精度控制的一个非常有效的工具。同样, 人工智能技术也被成功地应用到铸造生产中, 如工艺设计、缺陷诊断、冲天炉控制、智能检测、合金设计等方面, 从而大大提高了铸造生产的生产效率, 并取得了良好的经济效益。

1.3.4 计算机模拟在材料科学中的应用

计算机模拟就是用数学模型来描述过程, 采用数值方法求解。在计算机上研究的过程, 是一种根据实际体系在计算机上进行的模拟实验。在许多情况下, 用计算机模拟比进行真实实验节省时间和成本, 因此可根据计算机模拟的结果预测有希望的实验方案, 以提高实验效率; 在某些情况下, 计算机模拟可以部分地代替实验。由于材料性质的研究是在不同层次尺度上进行的, 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。一般来说, 可分为电子层次 (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。它们对应的空间尺度大致为 $0.1 \sim 1\text{nm}$, $1 \sim 10\text{nm}$, $10\text{nm} \sim 1\mu\text{m}$ 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, 如各种组织的形成规律、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、晶界构造、裂纹的产生和扩展过程等问题, 都可以用计算机模拟方法进行透彻的研究。

计算机模拟方法已应用于材料科学的各个方面, 包括分子液体和固体结构的动力学、水溶液和电解质、胶态分子团和胶体、聚合物的结构、力学和动力学性质、晶体的复杂结构、点阵缺陷的结构和能量、超导体的结构、沸石的吸附和催化反应、表面的性质、表面的缺陷等。

目前,美国 BIOSYM Technologies 公司已经研制出多套材料的计算机模拟软件,如电子、光子和磁性材料的模拟软件,固态化学研究软件,模拟无机材料的结构和性能的软件等。应用这些软件已经解决了不少实际问题。计算机模拟在材料科学中已被证明是一个不可估价的研究工具,有人直接称材料科学中的计算机模拟为计算机材料科学。

1.3.5 计算机用于材料性能检测

材料的性能,是由多种因素决定的,例如材料的组分、组织结构以及材料的制备或加工工艺,它们之间是典型的非线性关系,难以用数学模型予以准确描述;而材料性能的评价指标往往具有多种形式。以材料的力学性能为例,常用的评价指标有断裂韧性(KIC, JIC),常规拉伸的屈服强度 σ_s ,抗拉强度 σ_b ,弹性模量 E ,疲劳裂纹扩展速率 da/dn 等。虽然对于常规材料,部分数据可以在手册中查到,但是由于材质本身的不均匀性及熔炼、轧制、热处理、时效和机械成型等工艺的差异,各项数据总存在着一定的分散范围,因此在实际应用中就存在如何合理确定及评价的问题。

软计算是随着信息技术和计算机智能化的发展而产生的几种计算技术的总称,其中主要包括模糊逻辑、神经网络、进化计算、模拟退火算法以及概率推理等。与传统的“硬计算”不同,软计算并不完全追求问题的精确解,而是允许存在不精确性和不确定性,所得到的的是精确或不精确问题的近似解。总地来说,这些技术是互补的,而不是竞争的,它们各有自己的优点和长处。软计算为材料性能预测提供了新的途径,同时也是进一步优化和控制其制备工艺、加工工艺或热处理工艺的高效而准确的方法。例如人工神经网络不需要建立精确的数学模型,因而用神经网络方法对少数试验结果进行学习,使其能从已有的实验数据中自动总结规律,进而预测任意组合的试验条件的结果是可行的,将它应用于材料的性能预测具有方便、快捷等优点。目前其应用主要涉及高分子材料的性能预测和共聚物的组成预测。

1.3.6 材料成型过程中的计算机应用

现代材料加工过程反映了对综合自动化和信息集成的需求和复杂性,因此,了解计算机在材料加工过程中的应用现状以及在虚拟制造技术中的地位和作用,掌握未来的发展方向,对于推动我国先进制造技术的进步,赶超世界先进水平,具有十分重要的意义。计算机在材料加工中的研究与发展主要有以下几方面。

(1) 有限元模拟系统

以有限元法为主要内容的数值模拟技术在金属塑性成型过程中的应用进行了十几年,当前,二维大变形弹-黏)塑性有限元法模拟技术业已日臻成熟,已成功地应用在工程实际中。三维问题分析在数学模型和图形处理的复杂程度上增加了计算量,与二维问题的计算量相比,高出几十倍甚至上百倍。近年来计算机软件技术的发展和各种数值计算方法的不断改进完善,有助于分析三维问题。此外,人们在计算速度方面,提出了大规模计算问题的并行计算方法(Parallel Computation),利用并行处理机中多CPU可同时工作的特点,配以软件编程中的并行处理方法,使计算速度大为加快,目前国际上许多商业软件都推出了并行版,如ANSYS, MARC, LS-DYNA 3D等;同时,在改善计算方法方面,有关研究开发人员正致力于改进三维网格重划的自适应能力和自动化程度,改进新旧网格间信息传递的插值方法,已取得了明显的进步。同时,开发了ALE法(Arbitrary Lagrangian Eulerian Method)和显式解法(Explicit Solution)。ALE方法已在MSC/DY-

TRAN、PressForm 等软件中得到成功的应用, 而显式解法主要是在解决非线性问题隐式求解时为保证求解精度需反复迭代、使计算量猛增的问题, 目前该方法已成功地应用于 LS-DYNA 3D 中。另外, 随着计算机软硬件的迅速发展, 计算速度问题也将逐步得到解决。

(2) 改进与发展工艺设计与优化的反向设计技术与专家系统

在给定的成型工艺中, 最终产品的材料状态和几何形状取决于诸多工艺参数(加载条件、模腔形状、模具润滑条件、初始坯料几何尺寸等), 若考虑某些工艺参数固定不变, 则通过对另一些工艺参数的反复模拟和修改, 以得到所希望得到的最终产品的材料状态和几何尺寸, 成型工艺的设计可认为是对于初始坯料和随后的各预成型坯及模具的设计, 但这种反复迭代的方法需要花费大量的计算时间。20 世纪 80 年代中期, S. Kobayashi 等系统研究了这一问题, 提出了反向模拟技术 (Backward Tracing Technique), 即从给定的最终形态, 沿着相反的加载路径, 反向模拟实际的工艺过程。该方法为工艺设计开辟了新途径。近十年来, 反向模拟技术得到了一定的进展和应用, 但始终未取得突破性进展, 其主要原因是从最终形态反向模拟时, 无法给定初始场量, 因此获得的初始毛坯设计在理论上存在缺陷, 无法估计设计它所带来的误差。近年来, 工艺设计与优化的技术取得了新的进展, 提出了敏感性分析 (Sensitivity Analysis) 的反向设计方法 (Inverse Method)。该方法将预成型设计和模具设计问题处理为优化问题, 用严密的数学公式进行描述, 将优化问题的目标函数定义为一组给定设计变量中所希望的最终状态和数值计算状态之间的误差的某种度量。敏感性分析是一种广泛应用于计算目标函数梯度的方法, 由于所求解的问题高度非线性并具有历史依赖性, 因此, 最适合应用直接差分法 (Direct Differentiation Method), 控制方程直接由敏感性场的场量公式差分得到。该方法已被成功地应用于坯料和模具形状的优化设计中。另外, 在材料加工领域中, 许多设备和工艺问题主要还是利用已经总结出来的经验公式和参数, 加上仍存在于专家头脑中的经验知识来解决。在实际生产中, 经验知识的运用往往多于数学分析运算, 且很有效, 因此, 如何充分发挥这些知识的作用, 充分利用这一资源, 具有非常重要的意义。专家系统就是很好的解决方法, 它利用知识的显式表示、事实和推理技术, 以解决通常需要专家才能解决的问题。一个典型的专家系统包括: 知识获取的装置, 收集专家们在该领域的规则和知识, 这一装置也包括规则编辑器, 允许用户改进现有规则和增加新的规则; 存储事实和规则的数据库, 该数据库通常可与其他数据库系统结合; 一个推理机, 以确定如何应用知识规则来解决问题; 一个用户界面, 以允许非专家的用户使用该系统来解决特殊问题。该方法正被广泛应用于材料加工的工艺设计中。

(3) 建立变形场-温度场-组织场耦合的模拟系统

金属在高温下的塑性成型是一个复杂的热力学过程, 成型过程不仅应力应变分布不均匀, 而且受温度和组织的不均匀性、硬化和再结晶、应变速率等许多因素的影响。产品质量除形状和尺寸精度要求外, 主要取决于锻件的内部质量和性能, 这就必然受到冶金和物理化学过程的影响。随着核电站、船舶等容量和吨位的成倍增长, 对大锻件的要求越来越高, 高强度和大型化是锻件的发展方向, 因此, 只有通过控制锻造工艺参数, 包括加热规范、锻造温度范围、变形量、变形速率、工具形状和锻后冷却规范等, 来控制锻件的组织 and 性能, 消除铸态缺陷, 得到合格锻件。而在大锻件锻造中, 影响晶粒组织变化的因素既包括塑性变形中的动态再结晶, 也包括变形间隔中和变形后的亚动态和静态再结晶。另