

 材料科学与工程专业
本科系列教材

计算机在材料工程中的应用

Jisuanji Zai Cailliao Gongcheng Zhong De Yingyong

汤爱涛 胡红军 杨明波 主编



重庆大学出版社

<http://www.cqup.com.cn>

内 容 提 要

本书采用较多的实例介绍了计算机在材料科学与工程中的应用以及相关软件的使用。主要内容有材料科学与工程中的数据处理方法、数值模拟基础及典型物理场的模拟方法,计算机辅助计算与设计,人工神经网络在材料科学与工程中的应用,材料数据库与专家系统,材料成型过程的计算机模拟等。

本书内容丰富实践性强,可作为高等学校材料科学与工程专业的本科生、硕士研究生的教材和教学参考资料,也可供相关科技人员或工程管理人员阅读参考。

图书在版编目(CIP)数据

计算机在材料工程中的应用/汤爱涛,胡红军,杨明波主编. —重庆:重庆大学出版社,2008.6
(材料科学工程专业本科系列教材)
ISBN 978-7-5624-4577-7

I. 计… II. ①汤…②胡…③杨… III. 计算机应用—材料科学—高等学校—教材 IV. TB3-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2008)第 097517 号

计算机在材料工程中的应用

汤爱涛 胡红军 杨明波 主 编

责任编辑:彭 宁 谢 芳 版式设计:彭 宁
责任校对:夏 宇 责任印制:赵 晟

*

重庆大学出版社出版发行

出版人:张鸽盛

社址:重庆市沙坪坝正街174号重庆大学(A区)内

邮编:400030

电话:(023) 65102378 65105781

传真:(023) 65103686 65105565

网址:<http://www.cqup.com.cn>

邮箱:fxk@cqup.com.cn(市场营销部)

全国新华书店经销

重庆东南印务有限责任公司印刷

*

开本:787×1092 1/16 印张:16 字数:399千

2008年6月第1版 2008年6月第1次印刷

印数:1—3 000

ISBN 978-7-5624-4577-7 定价:28.00元

本书如有印刷、装订等质量问题,本社负责调换
版权所有,请勿擅自翻印和用本书
制作各类出版物及配套用书,违者必究

前言

材料科学与工程是多学科交叉的新兴的发展不成熟的学科,目前对它的研究很大程度上还依赖于事实和经验的积累,系统地研究还需一个很长的过程。计算机作为一种现代工具,在当今世界的各个领域日益发挥巨大的作用,它已渗透到各门学科领域以及日常生活中成为现代化的标志。在材料科学与工程领域,计算机也正在逐渐成为极其重要的工具,计算机在材料科学与工程中的应用正是材料研究和开发飞速发展的重要原因之一。本书立足“材料科学与工程”一级学科,系统地介绍了计算机在材料科学与工程中的应用,使读者初步掌握如何在材料科学与工程的学习及研究中更好地利用计算机这一工具。本书的最大特点在于注重理论知识讲解的同时,结合计算机在材料科学与工程中的应用实例讲解来培养学生的实际动手能力和创新意识,同时介绍了较多的应用软件的使用方法,力求使读者尤其是初学者能较快地掌握应用的方法,并能迅速实践。

本书由重庆大学汤爱涛、重庆工学院胡红军和杨明波三位共同编写,博士生石宝东、刘彬同学参与了第5章和第6章部分编写工作,全书由汤爱涛统稿。

由于计算机技术发展日新月异,其在材料科学与工程中的应用发展也非常迅速,加之我们理论水平和实践经验都很不足,书中难免有出现错误和不妥的地方,恳请广大读者批评指正。

编者

2007年11月

2.3.2	规划求解	37
	思考题与上机操作实验题	38
第3章	材料科学与工程研究中的数学模型及数值计算	42
3.1	数学模型的基本知识	42
3.1.1	数学模型的分类	43
3.1.2	数学建模的过程	44
3.1.3	数学模型的特点	46
3.1.4	数学模型的建立方法	47
3.2	材料科学与工程研究中的数学模型	48
3.2.1	理论分析法	48
3.2.2	模拟方法	49
3.2.3	类比分析法	53
3.2.4	数据分析法	56
3.2.5	利用计算机软件(Origin 软件)建立数学模型	56
3.3	材料科学与工程中的数值计算方法	61
3.3.1	线性方程组的计算机计算	62
3.3.2	有限差分法求解	63
3.3.3	有限元法求解	70
	思考题与上机操作实验题	82
第4章	材料科学与工程中典型物理场的数值模拟	83
4.1	温度场的数学模型及求解	83
4.1.1	温度场的基本知识	84
4.1.2	温度场的数学模型	86
4.1.3	温度场的有限差分求解	91
4.2	应力场的数学模型及求解	113
4.2.1	应力场的基本理论与数学模型	113
4.2.2	基于 ANSYS 软件的应力场计算	117
4.3	浓度场的通用数学模型与计算	120
4.3.1	菲克第一定律	120
4.3.2	菲克第二定律	121
4.3.3	运用有限差分法求解渗碳浓度场	121
4.3.4	基于 MATLAB 的渗碳过程计算	127
4.4	铸件充型过程流场的通用数学模型	130
	思考题与上机操作实验题	132

第5章 材料科学与工程中的计算机辅助计算与设计技术

202	5.1 相图计算	135
202	5.1.1 相图计算的原理及计算方法	135
202	5.1.2 相图数据库与计算软件	136
202	5.1.3 Thermo-Calc 软件在相图计算中的应用	137
202	5.2 材料设计理论及实践	161
210	5.2.1 材料设计概论	161
214	5.2.2 Material Studio 软件及其在材料设计中的应用	166
214	思考题与上机操作实验题	172
215	第6章 人工神经网络及 Matlab 语言在材料科学与工程中的应用	173
215	6.1 人工神经网络的基本知识	173
222	6.1.1 人工神经网络的理论基础	173
222	6.1.2 人工神经元模型和网络结构	174
222	6.1.3 误差反向传播神经网络模型	175
222	6.2 人工神经网络在材料科学与工程中的应用	181
222	6.2.1 在材料设计和成分优化中的应用	181
230	6.2.2 在材料力学性能预测中的应用	181
230	6.2.3 在相变特性预报中的应用	182
232	6.2.4 人工神经网络用于材料的检测	183
232	6.3 Matlab 的基本使用方法	184
232	6.3.1 Matlab 的主要功能	184
242	6.3.2 基本操作	184
242	6.3.3 Matlab 语言基础	186
244	6.3.4 Matlab 程序设计初步	187
242	6.4 Matlab 神经网络工具箱及其使用	189
	6.4.1 概述	189
	6.4.2 神经网络工具箱通用函数	189
	6.4.3 BP 网络的神经网络工具箱函数	190
	6.4.4 BP 网络的 Matlab 实现	191
	6.5 应用举例:基于 BP 网络的镁合金 AZ61B 晶粒尺寸模型的构建及仿真	191
	6.5.1 数据收集及整理	191
	6.5.2 BP 网络模型的设计	192
	6.5.3 数据的预处理	192
	6.5.4 人工神经网络工具箱实现	194
	6.5.5 M 文件的方法求解	201

131	思考题与上机操作实验题	205
131	第7章 材料科学与工程中的数据库与专家系统应用	206
132	7.1 数据库在材料科学与工程中的应用	206
136	7.1.1 数据库的基本知识	206
137	7.1.2 材料数据库的发展	208
161	7.1.3 应用举例——基于 Web 的镁合金数据库的开发	210
161	7.2 专家系统在材料科学与工程中的应用	214
166	7.2.1 专家系统基本知识	214
175	7.2.2 材料科学与工程中专家系统的发展及应用	215
175	7.2.3 应用举例	217
175	思考题与上机操作实验题	221
175	第8章 材料成形过程的计算机模拟	222
174	8.1 概述	222
175	8.2 塑料注塑成形过程模拟软件 MoldFlow	223
181	8.2.1 MoldFlow 软件介绍	223
181	8.2.2 MoldFlow 软件操作步骤及分析实例	226
181	8.3 体积成形模拟软件 Deform	230
185	8.3.1 Deform 模拟分析软件介绍	230
185	8.3.2 Deform 软件操作步骤及应用实例	232
184	8.4 铸造成形过程模拟软件 ProCAST	237
184	8.4.1 ProCAST 简介	238
184	8.4.2 ProCAST 的模拟过程	242
186	8.4.3 ProCAST 软件应用实例	242
187	思考题与上机操作实验题	244
189	参考文献	245

第 1 章

绪 论

随着计算机技术的发展和材料科学的进步,二者之间的渗透和交叉已成为材料科学和计算机技术的重要研究领域之一。材料科学的发展是计算机技术更新和突破的基础,而计算机技术的发展以及在材料科学与工程中应用的不断扩展和完善,已为材料科学与工程提供了非常重要的不可缺少的工具。

1.1 计算机技术的发展

计算机自 20 世纪 40 年代诞生到目前虽只有短短的 60 多年,但发展迅速,不仅组成计算机元器件的硬件技术发展变化大,其软件技术和网络技术发展变化也非常惊人。计算机技术的迅速发展使其应用范围越来越广,越来越深入,极大地推动了材料科学与工程学科领域的发展。

1.1.1 计算机硬件技术的发展

在 20 世纪 40 年代中期开始的第一代计算机元器件主要由电子管构成,这一时期的计算机体积庞大,运算速度只有每秒几千次。进入 20 世纪 50 年代以后,随着科学技术、电子技术的发展,晶体管代替电子管,成为计算机的主要元件,且用快速磁芯存储器,每秒能完成 15 万次加法运算或 5 万次乘法运算,这个时期的电子计算机称为第二代计算机(晶体管)。20 世纪 60 年代以来,各自独立的电子器件(如电阻、电容、晶体管等)被组合起来,封装在一个元件里,称为中小规模集成电路,从此,计算机发展到了第三代。第三代计算机的特点是以集成电路取代了晶体管,其可靠性更高、功耗更少、体积微小、造价大幅下降、性能更强,每秒能运算 200 万次。随着集成电路技术的迅猛发展,到 20 世纪 70 年代初,众多的部件可集成在一块很小的硅晶片上,构成所谓的大规模集成电路和超大规模集成电路。计算机向“两极”分化:一极是微型机向微型化、网络化、高性能、多作用方向发展;另一极则是巨型机向更巨型化方向发展,巨型机每秒能运算一亿次以上。这个时期的电子计算机称为第四代计算机。20 世纪 80 年代以来,由于人工智能机的发展,它具有视觉、听觉、嗅觉等功能,同时能模仿人脑的思维、判断和推理,每秒能运算 5 亿次以上,计算机进入了第五代。上个世纪末到目前,世界上发达国家如美

国、日本、德国、俄罗斯等国都争先恐后地进行研究,开发第六代计算机——生物计算机。生物计算机的主要原材料是生物工程技术产生的蛋白质分子,并以此作为生物芯片。在这种芯片中,信息以波的形式传播并具有并行处理的功能,可以大大提高计算机的速度。

1.1.2 计算机软件技术的发展

软件是计算机应用的灵魂。从功能上讲,计算机软件大致可分为基础软件和应用软件。操作系统、编程语言属基础软件;而数据库、人工智能、计算机图形学、数据压缩等应用软件技术的发展则直接推动了计算机在不同领域的更加广泛深入的应用。

(1) 操作系统的发展

操作系统由早期的命令方式到现在的图形方式。界面越来越友好,用户操作越来越方便。

(2) 编程语言的发展

编程语言由最初的机器语言、汇编语言、算法语言到面向对象的程序设计语言。功能越来越强大,通用性越来越好。

(3) 数据库技术的发展

数据库技术是计算机科学技术中发展最快的领域之一,它是计算机信息系统与应用系统的核心技术和重要基础。数据库技术从20世纪60年代中期产生到今天仅仅有30多年的历史,却已经历了三代演变,第一代的网状、层次数据库系统,第二代的关系数据库系统,发展到第三代以面向对象模型为主要特征的数据库系统。

(4) 人工智能的发展

人工智能(AI)自1956年诞生至今已走过了40多个年头,就研究解释和模拟人类智能、智能行为及其规律这一总目标来说,某些领域已取得了相当的进展。20世纪70年代前后,人工智能进入飞速发展时期。这一阶段,人们通过计算机的启发式编程方法,按心理学和人类认知的过程来建立人类求解问题的过程模型。同时,人们成功地在计算机上建造了专家系统。与此同时,为实现和建造智能系统,人工智能学者给出了一系列方法如知识表示方法(一阶谓词逻辑、语义网络、框架表示方法等),人工智能进入了兴旺时期。80年代中期,人工智能开始面临重重困难,这些困难涉及人工智能研究的根本性问题,如交互(Interaction)问题和扩展(Scalingup)问题。至此,人工智能的发展进入了困境。人们开始寻找其他途径,并曾寄希望于80年代初的人工神经网络的连接方法以及80年代末面向现实环境的、无需表示和推理的“行为AI”。已有的人工智能方法仅限于在模拟人类智能活动中使用成功的经验知识所能处理的简单问题,人工智能学术界正从符号机理与神经网络机理的结合及引入Agent系统等方面进一步开展研究工作。90年代,所谓的符号主义、连接主义和行为主义3种方法并存。对此,中国学者提出了综合集成的方法,即不同的问题用不同的方法或用联合的方法来解决,再加上人工智能系统引入交互机制,系统的智能水平将会大为提高。

(5) 计算机图形学的发展历史

20世纪50年代,最初的计算机图形生成技术就出现了,但用户不能对图形进行交互操作;60年代,尽管有了交互图形技术,但计算机图形学的应用进展不快;70年代,尽管出现了小型计算机和存储管式显示器,但图形学的应用仍局限在某些专门领域,属于计算机图形学初创阶段;70年代末至80年代,计算机图形学技术高速发展时期,出现了图形处理功能很强的工作站,推动了计算机图形学在计算机辅助设计和绘图、办公自动化、电子出版、地理信息系统领

域的广泛应用;进入20世纪末到本世纪初,计算机图形学技术开始走向成熟,其重要标志是在许多图形学领域出现了一批商品化软件。

(6) 多媒体数据压缩技术的发展

对于多媒体数据压缩技术的发展,有两方面因素影响较大:一是技术使用目的,二是数据模型。就使用目的而言,可以有面向存储的技术和面向传输的技术。面向存储的技术对压缩能力非常看重;面向传输的技术则对编、解码算法实现的实时性和成本非常敏感。在实际应用中,经常需要我们在压缩算法方面的压缩能力、实现复杂性与成本等方面进行平衡与折中。数据模型的选择和参数优化对于压缩算法的进步也十分关键。如果从数据来源的不同对数据进行分类,可以把多媒体数据分为三类:数字化数据、文本数据和计算机生成数据。多媒体数据压缩技术按照数据来源的不同,可以通过使用不同的数据模型和算法组合得到最有效的压缩效果。

1.1.3 计算机网络技术的发展

第一代网络主要是美国军方为了处理防空信息。它主要是把收集到的信息处理后再送到终端设备,这种以单机为中心,面向终端设备的网络结构成为第一代计算机网络。第二代网络的成功典型就是美国国防部高级研究计划署(Advanced Research Project Agency)建成的ARPA网。第二代网络是以分组交换网为中心的计算机网络,各用户必须经过交换机。分组交换是一种存储—交换模式,它将到达交换机的数据送到交换机存储器内暂时存储和处理,等到相应的输出电路有空时再输出。20世纪70年代,第二代网络结构大量出现,但是彼此之间却很难进行设备的联通,为此国际标准化组织ISO提出了著名的开放系统参考模型OSI(Open System Standard Organization),这种体系结构标准化的计算机网络成为第三代计算机网络。20世纪90年代,Internet的建立即出现了万维网(WWW),它把分散在各地的网络连接起来,形成了一个跨国界,覆盖全球的网络。它已经成为人类最重要最大的知识宝库。网络互联和高速计算机网络的发展,使计算机网络进入了第四代。21世纪初,更奇妙的网络技术闪亮登场,将互联网技术的发展推向了新的高峰,网络将所有的计算机资源连接起来,实现真正意义上的计算机资源共享,消除信息孤岛,让人们像用电和水一样方便,更加快捷地获取和使用计算机信息资源。

1.2 材料科学与工程的基本概念与发展

材料科学与工程是研究有关材料的成分、结构和制造工艺与其性能和使用性能间相互关系的知识及这些知识的应用,是一门应用基础科学。发展至今已形成了自己的知识体系,涉及许多概念。这门学科在进入20世纪以后,由于各学科的交叉,尤其是计算机技术的应用使其发展迅速。

1.2.1 材料科学与工程的基本概念

(1) 涵盖的基本内容

材料科学是一门科学,它着重于材料本质的发现、分析方面的研究,它的目的在于提供材料结构的统一描绘,或给出模型,并解释这种结构与材料性能之间的关系。材料科学为发展新

型材料,充分发挥材料的作用奠定了理论基础。

材料工程属于技术的范畴,目的在于采用经济而又能为社会所接受的生产工艺、加工工艺控制材料的结构、性能和形状以达到使用要求。所谓“为社会所接受”指的是材料制备过程中要考虑到与生态环境的协调共存,简言之,就是要控制环境污染。材料工程水平的提高可以大大促进材料的发展。

(2) 材料的分类

材料分类方法很多。根据其组成与结构可以分为金属材料、无机非金属材料、有机高分子材料和复合材料等;根据其性能特征和作用分为结构材料和功能材料;根据用途还可以分为建筑材料和能源材料、电子材料、耐火材料、医用材料和耐腐蚀材料等。

(3) 材料的性能

材料的性能是材料对电、磁、光、热、机械载荷的反应,而这些性能主要取决于材料的组成与结构。

材料使用性能是材料在使用状态下表现出来的行为,它与设计和工程环境密切相关,还包括可靠性、耐用性、寿命预测和延寿措施。

(4) 基本要素

材料的成分和结构、制造工艺、性能以及使用性能被认为是材料科学与工程中的4个基本要素。其相互关系如图1.1所示。

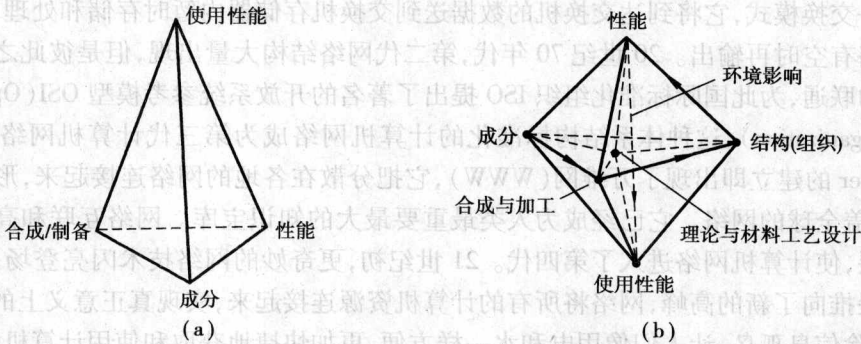


图 1.1 材料科学基本要素之间的关系

1.2.2 材料科学与工程的发展

随着科学技术的发展和人类社会的进步,材料科学与工程这门学科也在不断地发展,尤其是近几十年来,其发展更为迅速,主要表现在以下几个方面。

(1) 传统材料的发展

传统材料的发展一方面主要体现在性能不断提高、生产成本不断下降、生产工艺注重与环境的协调。另一方面主要体现在不断开发传统材料的新用途,充分发掘其应用潜力,例如近两年镁合金材料的大力发展。

(2) 新材料不断出现

进入 20 世纪后,各类新型材料的出现大大地促进了材料科学与工程的发展,主要有超导材料、纳米材料、生物医用材料和能源材料等。

1) 超导材料

超导材料是20世纪人类最伟大的发现之一。超导体具有零电阻和完全抗磁性的特点,对电流传输无能量损耗,是一种理想的导电材料。超导材料有低温超导材料和高温超导材料之分。低温超导材料要在液氮温度(4.2 K)才能显示超导性,目前已发现有近70种单质元素和5千多种合金、化合物具有超导性,其中NbTi合金和 Nb_3Sn 化合物的超导性能最好,已经用于大型工程项目。高温超导材料是1986年才发现的一种新型超导体,在液氮温度(77 K)就显现超导特性。液氮比液氦资源丰富,容易制取,因此高温超导材料比低温超导材料更易被工程使用接受。高温超导材料多数是含铜的氧化物陶瓷,以TiBa-CaCuO系的转变温度最高(160 K,但有毒性)。在已发现的数十种高温超导材料中, $YBa_2Cu_3O_7$ 和 $Bi_2Sr_2Ca_2CuO$ 具有最好的综合超导性能,已经在工程项目中开始试用。

2) 纳米材料

纳米材料几何尺寸达到纳米级,并且具有特殊性能的材料。自20世纪70年代纳米颗粒材料问世以来,20世纪80年代中期在实验室合成了纳米块体材料,至今已有30多年的历史,但真正成为材料科学和凝聚态物理研究的前沿热点是在20世纪80年代中期以后。从发展的内涵和特点大致可划分为3个阶段。

第一阶段(1990年以前):主要是在实验室探索用各种手段制各种材料的纳米颗粒粉体,合成块体(包括薄膜),研究评估表征的方法,探索纳米材料不同于传统常规材料的特殊性能。

第二阶段(1994年前):人们关注的热点是如何利用纳米材料已挖掘出来的奇特物理、化学和力学性能,设计纳米复合材料,通常采用纳米微粒与纳米微粒复合,纳米微粒与常规块体复合。发展复合材料的合成及物性的探索一度成为纳米材料研究的主导方向。

第三阶段(从1994年到现在):纳米组装体系、人工组装合成的纳米结构的材料体系越来越受到人们的关注,正在成为纳米材料研究的新的热点。

3) 生物医用材料

生物医用材料(Biomedical Materials)又称为生物材料(Biomedical Materials),是指以医疗为目的,用于诊断、治疗、修复或替换人体组织器官或增进其功能的材料。生物医用材料由高分子、金属、陶瓷、天然材料、复合材料等材料组成。从20世纪60年代开始经历了三代。

第一代:20世纪60—80年代,在对工业化的材料进行生物相容性研究基础上,开发了第一代生物医用材料及其产品,例如体内固定用骨钉和骨板、人工关节、人工心脏瓣膜、人工血管、人工晶体和人工肾等,被应用于临床。这一代生物材料具有一个普遍的共性:生物惰性,即生物医用材料发展所遵循的原则是尽量将受体对植入器械的异物反应降到最低。

第二代:20世纪80—90年代,生物医用材料领域的重点逐渐由生物惰性转向生物活性,开发了第二代生物医用材料及产品。这种具有活性的材料能够在生理条件下发生可控的反应,并作用于人体。以生物活性玻璃(由 $Na_2O-CaO-P_2O_5-SiO_2$ 组成)为例,它与组织的作用机制包含了一系列共11个反应步骤。其中,最初的5个反应发生于材料表面,后6个反应包含了成骨细胞的增殖与分化,并最终在新生骨上形成一个具有足够机械强度的表面。在20世纪80年代中期,生物活性玻璃、生物陶瓷、玻璃-陶瓷及其复合物等多种生物活性材料开始应用于整形外科和牙科。除具有活性外,第二代生物医用材料的另一个优势在于材料具有可控的降解性。随着机体组织的逐渐生长,植入的材料不断被降解,并最终被新生组织所取代,在植入位置和宿主组织间将不再有明显的界面区分。

第三代: 20 世纪 90 年代后期, 开始研究能在分子水平上刺激细胞产生特殊应答反应的第三代生物医用材料。这类生物医用材料将生物活性材料与可降解材料这两个独立的概念结合起来, 在可降解材料上进行分子修饰, 引起细胞整合素的相互作用, 诱导细胞增殖、分化, 以及细胞外基质的合成与组装, 从而启动机体的再生系统, 也属于再生医学的范畴。

4) 能源材料

能源材料是近 10 年来发展起来的一类新型材料, 它是各类能源中的关键组成部分, 包括储能材料、节能材料、能量转换材料和核能材料等, 主要有以下几大类。

①相变储热材料 能通过控制相变可逆的吸放热过程达到储热的目的的材料。目前所用的相变储热材料主要有固—液(s—l)相变储热材料。固—固(s—s)相变储热材料。固—固相变储热材料主要是通过晶体有序—无序结构转变进行可逆地吸、放热。它主要有有机和无机两大类。如能将金属固—固相变温度降低到 20 °C 左右, 并使相变热达到 100 kJ/kg, 将会使其在空调整能中得到广泛的应用。固—液相变储热材料主要是通过固—液相变进行可逆的吸、放热。它主要有熔盐结晶水合盐、石蜡、共晶 Al-Si 合金。其中共晶 Al-Si 合金为高温相变储热材料, 其相变温度可达到 500 °C 以上, 可用于高温储热。

②高效节能电热膜材料 电加热在工业及民用中占有很大的比例。传统的电阻丝发热加热技术, 由于采用对流换热加热技术, 加热速度慢, 电热转换效率低、能耗大。而电热膜材料用热传导式加热技术, 电热转换效率可达到 95%, 加热速度快, 因此在大面积加热中发挥了较大的作用。主要的电热膜材料有半导体膜、有机和无机复合电热膜(主要有以金属粉或石墨粉为导体, 以树脂和硅酸盐及磷酸盐为黏接剂所组成的复合半导体膜)。前者工艺复杂, 成本较高; 后者工艺简单, 成本低, 可采用涂刷喷涂等工艺附着在基体上, 应用前景较好, 目前已有专利。

③吸附材料及贮氢材料 在太阳能空调中, 需要通过吸附效应产生能量交换, 或通过贮氢材料的吸、放氢过程实现能量转换。目前使用和研究的吸附材料主要有活性炭用于吸附甲醇, CaCl_2 和 SrCl_2 用于吸附 NH_3 , 其中 CaCl_2 和 SrCl_2 吸附量大, 制冷量达 1000 kJ/kg 以上, 但使用寿命不高。贮氢材料主要有金属基贮氢材料(如 Pd-Ag、LaNi₅、La₂Mg₁₇、TiMn 等)、纳米贮氢合金和纳米复合贮氢合金等类型。

④燃料电池材料 氢能发电是通过燃料电池进行的电化学反应, 能量转换效率可高达 90% 以上。目前所用的一类质子交换膜燃料电池是由阴极和阳极以及阳极与阴极之间的一层固体离子电解质所组成。其中阳极和阴极是由铂和碳组成的复杂多孔电极。对此类材料的研究还处于初期阶段, 下一步会得到较大的开发和研究, 并投入应用。

1.3 计算机技术在材料科学与工程中的应用

如今, 在材料的冶炼、铸造、冷热加工、热处理、焊接等各个环节的科学研究和工业应用中都离不开计算机的成功应用, 计算机技术在材料科学与工程中的应用也相当广泛, 这里主要介绍以下几个方面。

1.3.1 计算机模拟在材料科学与工程中的应用

(1) 材料固相冷却过程中的计算机模拟

该方面的工作重点国内外主要集中在淬火冷却过程中的计算机模拟,模拟计算和分析的重点是温度场和应力场,其表现形式还包括冷却转变曲线(CCT曲线和TTT曲线)的预测和绘制。

1) 淬火过程的计算机模拟概况

淬火冷却的计算机模拟在世界各国备受关注,近年来涌现大量文献,其特点是研究淬火过程中工件内瞬态温度场、相变、机械效应以及它们之间的交互作用,预测淬火后工件内部的组织分布、性能分布、内应力和淬火畸变。为了较好地反映实际生产中诸多复杂因素,不同作者建立了相当复杂的数学模型。其中,三维有限元模型可以模拟形态复杂的零件(如带孔的凸缘、轮毂、螺旋齿轮等)的淬火过程,并给出直观的温度场、组织分布、应力场合畸变的三维图像;界面条件突变非线性化模型可用于模拟预冷淬火和间歇淬火等实际操作。

在应力和应变的模拟方面广泛应用热弹塑性理论和增量模型。Tinoue 等人在整体加热淬火和感应加热淬火计算机模拟研究中,比较全面地考虑了热膨胀、相变的体积效应、塑性变形、硬化因子、蠕变和相变塑性等复杂因素,用循环迭代算法研究热—相变—应力应变之间的耦合,其模拟结果与实测值基本吻合,计算机模拟技术已在淬火和畸变的研究中发挥重要作用。

2) 组织转变的动力学模拟

一般情况下,工件淬冷时既不是等温又不是等速连续冷却。解决实际热处理问题时,70年代初多用等速连续冷却 CCT 曲线作为依据,70年代末 Hidenwall 运用 Scheil 叠加法则成功地解决了以等温 TTT 曲线模拟的难题后,TTT 曲线在组织模拟中迅速得到推广。

实践表明,计算中若不考虑应力对相变动力学的影响,计算值一般要比实测值偏小,不能准确反映出工件残余应力急剧变化的特征。

近年来对应力影响淬冷相变提出的各种数学模型都是在原有相变公式的基础上加以修改。珠光体、贝氏体转变用 Avrami 公式,马氏体转变用 Koisitinen-Marburger 公式:

$$\zeta = 1 - \exp(-bt^n)$$

$$\zeta = 1 - \exp[-c(Ms - T)]$$

修正时或将式中常数 b 、 n 、 c 、 Ms 修正为应力的函数,或增加含应力的附加项。虽然有的作者就某种具体材料给出了具体数值,但通用性差,对不同材料要通过实验得到,积累必要的数据得出规律是当务之急。而且在区分平均应力与偏应力的影响方面尚不成熟。

淬火模拟计算表明,只有考虑相变塑性时,计算值才与实测值符合较好,否则偏差很大。目前对相变塑性的看法不同,一般多采用 Greenwood-Johnson 模型:

$$\varepsilon^p = k\sigma\zeta(2 - \zeta)$$

式中 ε ——相变塑性;

ζ ——相变过程新相的体积分;

σ ——外加载荷;

k ——材料常数。

(2) 材料原子层次的计算机模拟

1) 相变过程中的原子层次的计算机模拟

在原子层次模拟相变过程主要有分子动力学法(简称 MD 法)和蒙特—卡罗法(Monte-Carlo)(简称 M-C 法)。

在 MD 法中,将 n 个粒子组成的体系抽象成 n 个互相作用的质点。给出 n 个质点间的相互作用势。然后对运动方程求数值解,求得各粒子的轨迹。可以给出系统随时间的动态变化过程。MC 法的关键是给出势函数。其中镶嵌原子法(Embedded Atom Method)在考虑粒子间偶势能的同时引入反映粒子多体相互作用的镶嵌能。相关文献用 EAM 法进行马氏体相变的计算机模拟,取得很多有意义的结果,相关文献模拟金属的熔化、玻璃转化和一级相变,得到的热力学参数可以同实验结果比较,求得对应于结晶和玻璃转化的冷却速度。由于分子动力学模拟能跟踪真实时间和空间中原子运动的轨迹,得到不同状态(固态、液态、非晶态)的原子组态,从而对金属相变的微观机制研究提供了必不可少的数据。分子动力学法已经应用于模拟原子的扩散、级联碰撞、离子注入、熔化、薄膜生长、相变、晶体缺陷及材料的力学行为等过程。

M-C 法是计算机对大自由度系统性质模拟的一种普遍方法。可用 M-C 法进行马氏体相变动力学模拟。采用二维模型,假设固体的弹性模量各相同性,马氏体相变可用 Bain 切变描述,则可计算由于形成马氏体而引起的应变自由能和界面能,得出马氏体绝热转变曲线。模拟的结果与马氏体相变的实验规律相符。此外,M-C 法在合金的有序—无序、一级相变、晶粒生长和晶界偏析、薄膜生长等材料科学研究中已得到许多应用。

2) 晶体点缺陷的计算机模拟

高温淬火、辐照损伤以及塑性变形是给金属中引入大量非平衡缺陷的主要方式,特别是中子辐照损伤的模拟研究受到人们的关注。计算内容涉及材料中原子的位移阈能(Displacement Threshold Energy, E_d)、位移级联(Displacement Cascade, DC)的过程的研究。

目前,绝大多数有关辐照损伤的模拟研究是针对纯金属进行的,其中,Cu 的位移阈能和级联过程备受人们的注目。Gibson 早在 1960 年就采用 Born-Mayer 势计算了 Cu 的阈能和 DC 过程,Foreman 等采用 F-S 模型计算了 $\langle 100 \rangle$ 和 $\langle 110 \rangle$ 方向 Cu 的阈能。Gao 等详细讨论了 Al 和 Ni 原子的 E_d 。

然而,从技术和实际应用的角度讲,对合金的模拟要计算更复杂的结构和缺陷构型。利用计算机模拟方法,可以大大减少以往在合金设计以及性能改进方面存在的盲目性。

点缺陷的稳定构型及其形成是点缺陷计算的一个重要内容。一般而言,空位的构型比较简单,而间歇原子通常有 3 种构型:①间歇构型,如八面体间隙等;②哑铃构型(Dumbbell);③挤列子构型(Crowdion)。通常情况下,间歇原子的形成能大于空位的形成能,在热平衡状态下,间歇原子的浓度远小于空位的浓度。另外,对于 fcc 金属,间歇原子的哑铃构型和挤列子构型的形成能相对较小。

早期的有关研究工作主要是针对 fcc 和 bcc 结构的纯金属,计算空位和间歇原子的形成能。hcp 结构的金属点缺陷计算相对困难,Bacon 就对势模型计算 hcp 金属点缺陷性质的研究工作进行了综述。

有关点缺陷相互机制作用的计算机模拟研究目前也有大量的报道,Kuramoto 利用计算机模拟的方法研究了间歇原子与刃位错的相互作用,Nakamura 等计算了间歇原子与螺位错的相互作用,Kuramoto 等模拟了辐照缺陷与位错间的动力学相互作用。

关于点缺陷的复合机制,人们最希望能够通过计算机模拟观察到空位和间歇原子由于热涨落而自发地迁移、相遇并复合的全过程。然而,目前只能通过计算缺陷的迁移激活能、缺陷

之间的相互作用来考察缺陷复合的可能性。

(3) 金属凝固过程的计算机模拟

1) 微观模拟

早在1966年,研发者 Oldfield 就尝试着对铸件凝固组织进行模拟。之后近几十年里,由于铸件凝固过程宏观模拟尚在发展之中,微观模拟一直未能取得很大进展。进入80年代,随着铸件凝固过程宏观模拟范畴计算机模拟的逐渐完善,在微观模拟方面也发展了等轴枝晶和共晶合金的生长模型。综观各方面的研究者的工作,形核和长大模型大致可分为两类:①确定模型;②概率模型。确定模型是指在给定时刻,一定体积熔体内晶粒的形核密度和生长速率是确定的函数(例如,是过冷度的函数)。概率模型则主要采用概率方法来研究晶粒的形核和长大,包括形核位置的随机分布和晶粒晶向的随机选择。

最初的形核和长大模型大都采用确定模型。如 Oldfield 提出的连续形核模型, Hunt 的瞬时形核模型等。夏威夷大学的 Wang 和爱荷华大学的 Beckermann 采用体积元模型,为建立晶粒生长的确定模型提供了崭新的思想。20世纪80年代末,晶粒生长的概率模型逐渐兴起。有代表性的如英国 Swansea 大学的 Brown 和 Spittle,以及加拿大皇后大学的 Zhu 和 Smith 等人采用的蒙特卡罗方法。进入90年代,瑞士联邦洛桑理工学院 Rappz 和 Gandin 综合确定模型和概率模型,提出单元自动控制(Cellular Automaton(CA))模型。之后, Gandin 和 Rappz 又结合宏观有限元(FE)热流计算和微观单元自动控制(CA)晶粒生长模型,提出了 FE-CA 耦合算法模型,开创了宏观和微观结合计算的先河。

经过多年的研究,随着铸件凝固过程宏观模拟的日臻成熟,以及许多合金的凝固热动力学规律被揭示,再加上计算机技术的发展,微观模拟在晶粒形核和长大、碰撞、液体中溶质再分配等各方面都有了很大的进展。但为了进一步完善铸件凝固过程的微观模拟技术,将其用于生产,还急需解决以下两个问题:①建立实际合金的晶粒生长模型,包括多元合金,模型中要考虑对流、偏析等因素对微观组织形成的影响;②要完善模型,优化算法,尽量减少计算量,以能够计算形状复杂的实际铸件。可以说,减少凝固过程微观模拟计算量是使微观模拟能够应用于实践的关键。

2) 宏观模拟

相对于微观模拟而言,国内外对宏观模拟的研究已做了大量的工作。宏观模拟是从传热学观点研究金属或合金的固态的状态变化过程,研究铸件与铸型热交换规律所确定的温度场,在存在相变的情况下求得连续性方程的解析解或数值解并预测宏观缺陷。凝固过程中不仅有显热释放,还涉及结晶潜热的释放问题,对潜热的处理通常有等价比热法、热焓法和温度回算法3种。

以导热偏微分方程为基础的铸件凝固温度场数值模拟始于20世纪60年代。1962年,丹麦学者 Forsund 第一次把有限差分法用于铸件凝固过程的传热计算。1965年,美国通用电器公司应用瞬态传热通用程序对9t重的汽轮机缸体铸件进行了数值模拟,获得了与实测结果相近的计算温度场。1966年,美国铸造学会与传热学会委员会制定了一项研究铸件凝固数值模拟技术的长期规划,并以 Michigan 大学的 Pehlke 教授为首展开研究。70年代以来,继美国之后,日本在铸造过程数值模拟技术研究方面很活跃。日本关于铸件缩孔、缩松的形成与铸件温度场间关系的研究,对数值模拟技术走向使用化起到了重要的推动作用。随着对数值模拟技术认识的加深,瑞典、丹麦、德国、加拿大等国也相继开展了这方面的研究。