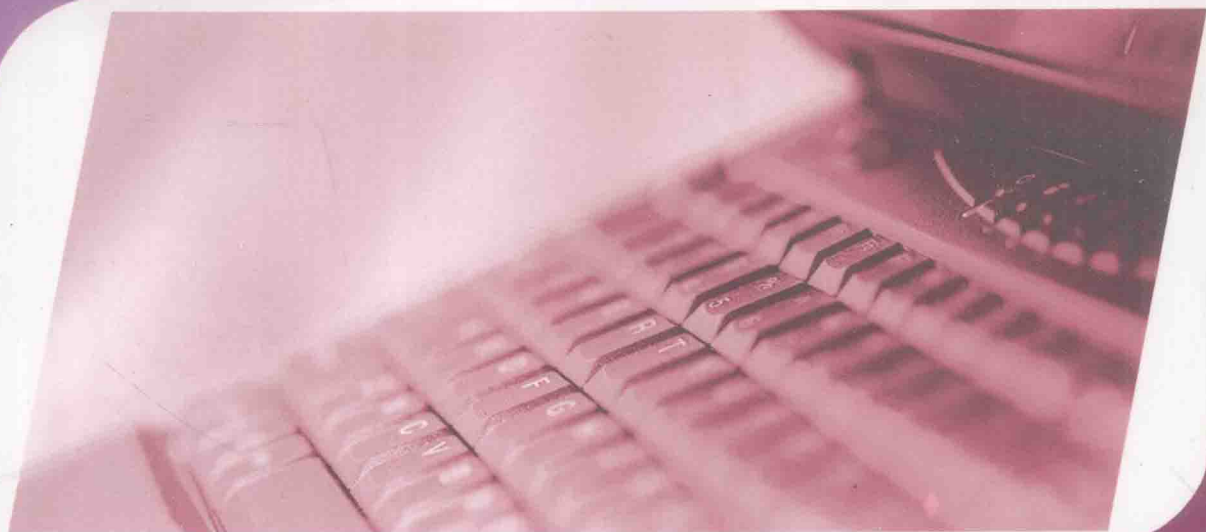




高职高专“十二五”规划教材——机械电子系列



计算机在材料科学 和工程中的应用

尹娜 曹书艳 ◎主编

JISUANJI ZAI CAILIAO KEXUE
HE GONGCHENG ZHONG DE YINGYONG



西苑出版社

高职高专“十二五”规划教材——机械电子系列

计算机在材料科学和 工程中的应用

主 编 尹 娜 曹书艳

副主编 王海荣 王燕梅



西苑出版社

XI YUAN PUBLISHING HOUSE

内 容 简 介

计算机作为一种现代工具在材料科学研究与工程中的应用越来越广泛,极大地促进了材料科学研究的深入和发展。本书系统地介绍了计算机及网络技术在材料科学研究及工程中的应用,使读者初步掌握在材料科学研究领域中更好地应用计算机的思路、方法和原理。

图书在版编目(CIP)数据

计算机在材料科学和工程中的应用/尹娜,曹书艳
主编. — 北京:西苑出版社,2011.7
ISBN 978-7-80210-679-9

I. ①计… II. ①尹… ②曹… III. ①计算机与材料科学—高等学校—教材 IV. ①P107

中国版本图书馆CIP数据核字(2011)第011029号

计算机在材料科学和工程中的应用

主 编 尹 娜 曹书艳

出版发行 西苑出版社

通讯地址 北京市海淀区阜石路15号

邮政编码:100143

电 话:010-88624971

传 真:010-88637120

网 址 www.xycbs.com

E-mail: xycbs8@126.com

印 刷 北京紫瑞利印刷有限公司

经 销 全国新华书店

开 本 787mm×1092mm 1/16

字 数 370千字

印 张 17

版 次 2011年7月第1版

印 次 2011年7月第1次印刷

书 号 ISBN 978-7-80210-679-9

定 价 36.00元

(凡西苑版图书如有缺漏页、残破等质量问题,本社邮购部负责调换)

版权所有 翻印必究

前 言

计算机作为一种现代工具在材料科学研究与工程中的应用越来越广泛，极大地促进了材料科学研究的深入和发展。本书系统地介绍了计算机及网络技术在材料科学研究及工程中的应用，使读者初步掌握在材料科学研究领域中更好地应用计算机的思路、方法和原理。

本书具有以下特点：

(1) 立足“材料学”大专业，加强读者对基础知识、基本方法的掌握，重在计算机的应用。在内容上既考虑材料学专业各研究方向的共性，又兼顾材料科学研究领域的广泛性和与多学科的相互渗透性，给计算机在材料科学中的应用带来的特殊性和复杂性。

(2) 计算机毕竟只是工具，我们试图通过计算机在材料科学研究中的应用实例，来加强学生利用计算机解决实际问题的能力。

(3) 结合材料科学领域的新方法、新技术中计算机的应用，培养和引导学生的创新意识。

本书共分 9 章，介绍了材料研究中数学模型的建立方法、常用的数值分析方法、新合金的计算机辅助设计；材料加工过程的计算机控制、计算机在材料性能检测方面的应用；材料科学研究中的计算机数据和图像分析、处理方法；互联网在材料科学研究中的应用。

在选材、内容、组织和编排方面力图保持全书的系统性和新颖性。本书可作为材料科学与工程专业高职高专院校基础课教材，也可供从事材料研究、开发和应用的工程技术人员参考。

本书由尹娜、曹书艳任主编，由王海荣、王燕梅任副主编，赵淑秀、李玲素参与编写。全书由尹娜统稿。

在编写过程中，作者翻阅了大量的资料，参考了许多专家及学者的研究成果，由于时间关系来不及与作者联系，在此向各位表示感谢！

由于编者水平有限，加之时间仓促，书中难免有不足与疏漏之处，敬请各位专家、学者及使用本书的师生批评指正。如在使用本书的过程中有其他意见或建议，恳请向我们 (bjlichunfeng@163.com) 提出宝贵意见。

编 者
2011 年 7 月

目 录

第一章 材料科学研究中的数学模型 1	
第一节 数学模型基础 1	
一、基本概念..... 1	
二、数学模型分类..... 2	
三、数学模型的作用..... 3	
第二节 建立数学模型的一般步骤和原则 4	
第三节 常用的数学建模方法 8	
一、理论分析法..... 8	
二、模拟方法..... 10	
三、类比分析法..... 14	
四、数据分析法..... 16	
第二章 材料科学研究中常用的数值分析方法 19	
第一节 有限差分法 19	
一、概述..... 19	
二、差分方程的建立..... 19	
三、差分方程的求解方法..... 22	
四、计算误差分析..... 25	
五、有限差分法解题示例..... 26	
第二节 有限元法 28	
一、有限元法的基本概念——直接刚度法..... 29	
二、有限元法的基本理论..... 36	
三、有限元程序的结构和特点..... 40	
四、有限元软件简介..... 41	
五、ANSYS 程序使用介绍..... 42	
第三章 材料科学研究中主要物理场的数值模拟 55	
第一节 温度场的计算 55	
一、导热方程..... 55	
二、初始条件与边界条件..... 56	
三、平面温度场的有限差分求解..... 57	
四、有限元法求解..... 62	
第二节 应力场计算 77	
一、弹性力学基础知识..... 77	
二、弹性问题分析..... 79	
第三节 浓度场计算 85	
一、扩散控制方程..... 85	
二、数值解法..... 86	
第四章 材料科学与行为工艺的计算机模拟 89	
第一节 组织转变的计算机模拟 89	
一、TTT 和 CCT 曲线..... 89	
二、采用连续冷却转变(CCT)曲线模拟..... 90	
三、采用等温转变(TTT)曲线模拟..... 91	
四、模拟程序设计..... 93	
五、现状和发展..... 94	
第二节 计算机相平衡计算方法 95	
一、热力学模型..... 95	
二、计算平衡相组成和绘制相图..... 96	
第三节 相图计算发展历程和计算软件介绍 99	
一、相图计算的过程和特点..... 99	
二、相图计算软件介绍..... 100	
三、用 Thermo-Calc 系统计算相图举例..... 101	
第四节 计算机模拟在材料科学中的应用 105	

一、材料的组成和结构 与计算机模拟.....	105	智能加工与智能控制.....	141
二、金属材料加工与计算机模拟.....	105	第六章 材料加工过程的计算机控制	143
三、塑料加工中的计算机模拟.....	106	第一节 计算机控制技术基础.....	143
四、计算机工艺模拟发展特点.....	106	一、计算机控制系统的概念.....	143
第五章 材料数据库和新材料、 新合金的设计	108	二、计算机工业控制系统的基本 功能及其结构与组成.....	150
第一节 数据库系统的组成与结构.....	108	三、计算机工业控制系统中 计算机的分类和选择.....	152
一、数据库系统概述.....	108	四、计算机控制系统的主要 特点和基本要求.....	155
二、数据库管理系统.....	108	第二节 计算机控制系统的 输入与输出.....	156
三、数据库系统结构.....	109	一、检测技术.....	157
四、数据库数据主要特征.....	109	二、控制仪表与装置.....	158
五、工程数据库的应用.....	110	三、输入输出过程通道.....	161
第二节 材料科学与工程数据库.....	111	第三节 材料加工的计算机控制.....	164
一、材料数据库的发展.....	111	一、高分子材料加工的计算机控制.....	164
二、材料数据库的应用举例.....	113	二、金属材料加工的计算机控制.....	172
第三节 专家系统.....	122	三、无机非金属材料烧成的 计算机控制.....	176
一、专家系统的历史和发展.....	122	第七章 计算机在材料检测中的应用	179
二、专家系统的工作原理.....	123	第一节 材料成分的检测.....	179
三、专家系统的类型.....	124	一、分析电子显微方法.....	179
四、典型专家系统分析.....	124	二、各种光谱仪方法.....	181
第四节 人工神经网络技术.....	130	第二节 材料组织结构的检测.....	183
一、人工神经网络.....	130	一、金相图像分析系统.....	183
二、神经网络的学习方法及规则.....	133	二、材料缺陷的计算机评定.....	188
三、误差反传神经网络构成 和学习方法.....	133	三、材料显微组织的计算机仿真.....	191
第五节 人工神经网络在材料 科学中的应用.....	135	第三节 材料力学性能的检测.....	192
一、用人工神经网络方法实现 材料设计与优化.....	135	一、万能材料试验机的计算机 辅助测试系统.....	193
二、人工神经网络实现材料 工艺优化.....	139	二、专项实验设备的计算机	
三、人工神经网络实现材料 性能预测.....	140		
四、基于人工神经网络的材料			

数据采集和处理系统.....	195	四、粒径大小测定原理.....	240
第四节 材料物理性能的测量.....	197	五、粒径分析中的图像处理 方法及算法.....	244
一、磁性测量中的计算机数据处理.....	197	六、粒径数据作图与分析.....	245
二、超导材料特性曲线计算机测量.....	199	七、图像处理在材料研究中的 应用举例.....	246
三、金属熔点附近热物性参数 的计算机测量.....	201	第九章 互联网在材料科学 研究中的应用.....	252
第八章 材料科学研究中的 数据与图像处理.....	204	第一节 Internet 概论.....	252
第一节 材料研究中的数据处理的.....	204	一、Internet 简介.....	252
一、Origin 软件的基本功能和 使用方法.....	204	二、Internet 的基本概念和技术.....	254
二、Origin 在材料科学研究中 的应用举例.....	218	三、Internet 的应用.....	256
三、材料研究科学中的数据处理的.....	226	第二节 互联网上材料科学信息 资源的检索和利用.....	258
四、结语.....	227	一、搜索引擎.....	258
第二节 材料科学研究中的 计算机图像分析与处理.....	228	二、材料科学专业网站.....	261
一、图像与图像处理.....	229	三、数据库资源.....	272
二、数字图像的获得途径.....	229	第三节 材料科学文献检索.....	277
三、采用常规软件进行 材料图像分析与处理.....	230	一、索引数据库检索.....	278
		二、全文数据库检索.....	284
		参考文献.....	291

第一节 数学模型基础

一、基本概念

科学的发展离不开数学,数学模型在其中又起着非常重要的作用。无论是自然科学还是社会科学的研究都离不开数学模型。

虽然我们还没有将数学模型作为一门课程来学习过,但实际上,在已经学习过的其他课程中已经多次接触到了数学模型。在物理学中,最典型的莫过于力学中的牛顿三定律。在物理化学中的热力学定律,在电子学中反映电路理论的基本规律的基尔霍夫定律,都是最精美的数学模型。此外在社会科学领域也存在着大量的数学模型,如马尔萨斯的人口模型、马克思的描述再生产基本规律的数学模型。这些反应某一类现象客观规律的数学式子就是这些现象的数学模型。

那么,怎样给数学模型下一个定义呢?

我们通常把客观存在的事物及其运动形态或称为实体,模型则是对实体的特

第一章 材料科学研究中的数学模型

现代科学技术发展的一个重要特征是各门科学技术与数学的结合越来越紧密。数学的应用使科学技术日益精确化、定量化，科学的数学化已成为当代科学发展的一个重要趋势。数学模型是数学科学连接其他非数学学科的中介和桥梁，它从定量的角度对实际问题进行数学描述，是对实际问题进行理论分析和科学研究的有力工具。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，抽象为一个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新的舞台，极大地推动了数学向其他技术科学的渗透。

材料科学作为 21 世纪的重要基础科学之一同样离不开数学。通过建立适当的数学模型对实际问题进行研究，已成为材料科学研究和应用的重要手段之一。从材料的合成、加工、性能表征到材料的应用都可以建立相应的数学模型。有关材料科学的许多研究论文都涉及到了数学模型的建立和求解，甚至产生了一门新的边缘学科——计算材料学 (Computational Materials Science)，正是这些数学手段才使材料研究脱离了原来的试错法 (Trial or Error) 研究，真正成为一门科学。

本章将介绍数学模型的基本概念，建立数学模型的基本步骤、原则和方法，同时给出一些与材料科学有关的具体建模实例。

第一节 数学模型基础

一、基本概念

科学的发展离不开数学，数学模型在其中又起着非常重要的作用。无论是自然科学还是社会科学的研究都离不开数学模型。

虽然我们还没有将数学模型作为一门课程来学习过，但实际上，在已经学习过的其他课程中已经多次接触到了数学模型。在物理学中，最典型的莫过于力学中的牛顿三定律。在物理化学中的热力学定律，在电子学中反映电路理论的基本规律的基尔霍夫定律，都是最精美的数学模型。此外在社会科学领域也存在着大量的数学模型，如马尔萨斯的人口模型、马克思的描述再生产基本规律的数学模型。这些反应某一类现象客观规律的数学式子就是这些现象的数学模型。

那么，怎样给数学模型下一个定义呢？

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对某种事物系统的特征和数量关系建立起来的符号系统。

数学模型有广义理解和狭义理解。按广义理解：凡是以相应的客观原型（即实体）作为背景加以一级抽象或多级抽象的数学概念、数学式子、数学理论等都叫做数学模型。按狭义理解：那些反映特定问题或特定事物系统的数学符号系统就叫做数学模型。在应用数学中所指的数学模型，通常是按狭义理解的，而且构造数学模型的目的仅在于解决具体的实际问题。

数学模型是为一定的目的对客观实际所作的一种抽象模拟，它用数学公式、数学符号、程序、图表等刻画客观事物的本质属性与内在联系，是对现实世界的抽象、简化而又本质的描述。它源于实践，却不是原型的简单复制，而是一种更高层次的抽象。它能够解释特定事物的各种显示形态，或者预测它将来的形态，或者能为控制某一事物的发展提供最优化策略，它的最终目标是解决实际问题。

二、数学模型分类

数学模型按照不同的分类标准有着多种分类。

1) 按照人们对实体的认识过程来分，数学模型可以分为描述性数学模型和解释性数学模型。

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抽象的数学结构之中。

解释性模型是由一般到特殊，从一般的公理系统出发，借助于数学壳体，对公理系统给出正确解释。

2) 按照建立模型的数学方法分，可以分为初等模型、图论模型、规划论模型、微分方程模型、最优控制模型、随机模型、模拟模型等。

初等模型指采用简单而且初等的方法建立问题的数学模型，该模型容易被更多的人理解接受和采用，更有价值。该模型包括代数法建模、图解法建模等。

图论模型指的是根据图论的方法，通过由点和边组成的图形为任何一个包含了某种二元关系的系统提供一个数学模型，并根据图的性质进行分析。如物质结构都可用点和边连接起来的图来模拟，有机化合物的分子结构、同分异构体的计算问题均可用图论中的树来研究。

微分方程模型指的是在所研究的现象或过程中取一局部或一瞬间，然后找出有关变量和未知变量的微分（或差分）之间的关系式，从而获得系统的数学模型。微分方程模型在材料研究中应用很广泛，如材料中的扩散问题、材料电子显微分析中的衍衬运动学、衍衬动力学理论等。

随机模型是根据概率论的方法讨论描述随机现象的数学模型。例如描述炮弹的运动轨迹和着弹点的数学模型、描述高分子材料链式化学反应的数学模型、多

晶材料晶粒生长模拟中基于 Monte Carlo 方法的 Ising、Q-State Potts 等模型。

模拟模型是用其他现象或过程来描述所研究的现象或过程，用模型的性质来代表原来的性质。例如可用电流模拟热流或流体的流动，用流体系统模拟车流等。在材料科学中的应用如采用非牛顿流体力学和流变学来描述高聚物加工过程、建立液晶高分子材料本构方程。已发展的有液晶高分子流体 B 模型、涉及聚合物熔体流动不稳定性（例如高聚物熔体由喷丝孔挤出时产生的拉伸共振、挤出物表面畸变、薄膜吹塑中产生的不稳定膜泡等现象）的扰动本构理论模型。

3) 按照模型的应用领域分，可以分为如人口模型、交通模型、环境模型、生态模型、水资源模型、再生资源利用模型、电气系统模型、传染病模型和污染模型等。

4) 按照模型的特征分，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，由于受到一些复杂而尚未完全搞清楚的因素的影响，使得系统在确定的输入时，得到的输出是不确定的，该系统称为随机系统，它的数学模型为随机模型。反之，系统有确定的输入时，系统的输出也是确定的，这样的系统称为确定系统，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，则称该系统为离散系统，其模型为离散模型。离散系统及离散模型描述了客观世界中很广泛的一类系统。由于计算机只能对离散数值进行运算，所以离散模型在应用上非常重要，连续性模型有时候也要转化成离散模型。当采用有限单元法和有限差分法研究材料某些性质时（比如材料的稳、瞬态热传导问题），连续性模型被转化成离散模型。

如果系统输入和输出呈线性关系，则该系统称为线性系统，线性系统的数学模型称为线性模型。与之相反，如果系统输入与输出呈非线性关系，则该系统称为非线性系统，非线性系统的数学模型称为非线性模型。

5) 按照对模型结构了解的程度可以分为白箱模型、灰箱模型和黑箱模型。它们分别代表人们对原型的内在机理了解得清楚、不太清楚和不清楚。

三、数学模型的作用

数学模型的根本作用在于它将客观原型进行抽象和简化，便于人们采用定量的方法去分析和解决实际问题。正因为如此，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、驾驭市场经济乃至个人高效工作和生活等众多方面发挥着特殊的重要作用。

一门学科精密化和科学化的重要表现之一便是能够采用精密的数学语言来分析和描述。材料科学从最早的试错法的手工操作成为当代重要科学支柱，数学的应用起着非常重要的作用。利用数学这一有效的工具，可以深刻认识客观现象的

本质规律，促进科学的发展。在材料研究和应用中，要对有关问题进行计算，就必须先建立该问题的数学模型。

当代计算机科学的发展和广泛应用，使得数学模型的方法如虎添翼，加速了数学向各个学科的渗透。在材料工程领域，实验是非常重要的手段，但现在认为，除了实验方法之外，数学模型是与其同样重要的，甚至是更好的一种方法。从材料设计上来看，要进行理论设计首先要建立正确的数学模型，这样才能设计出具有优良性能、工艺可行的材料。在生产过程中，为了分析和改进生产中出现的问题，先建立适当的数学模型，然后在计算机上进行模拟计算来代替实验，可以节约人力、物力和财力，还可以避免发生故障或危险，甚至完成实验不可能完成的任务。

第二节 建立数学模型的一般步骤和原则

数学模型的建立，简称数学建模。数学建模 (mathematical modeling) 是构造刻画客观事物原型的数学模型并用以分析、研究和解决实际问题的一种科学方法。运用这种科学方法，必须从实际问题出发，紧紧围绕着建模的目的，运用观察力、想像力和逻辑思维，对实际问题进行抽象、简化，反复探索、逐步完善，直到构造出一个能够用于分析、研究和解决实际问题的数学模型。因此，数学建模不仅是一种定量解决实际问题的科学方法，而且还是一种从无到有的创新活动过程。

数学建模没有固定的模式。按照建模过程，一般采用的建模基本步骤如下：

1. 建模准备

建模准备是确立建模课题的过程，就是要了解问题的实际背景，明确建模的目的。数学建模是一项创新活动，它所面临的课题是人们在生产和科研中为了认识和实践进一步发展必须解决的问题。找到了需要解决的实际问题，如果这些实际问题需要给出定量的分析和解答，那么就可以把这些实际问题确立为数学建模的课题。应该深入生产和科研实际以及社会生活实际，掌握与课题有关的第一手资料，汇集与课题有关的信息和数据，弄清问题的实际背景和建模的目的，进行建模筹划。

2. 建模假设

作为课题的原型往往都是复杂的、具体的。这样的原型，如果不经过抽象和简化，人们对其认识是困难的，也无法准确把握它的本质属性。而建模假设就是根据建模的目的对原型进行适当的抽象、简化，把那些反映问题本质属性的形态、量及其关系抽象出来，简化掉那些非本质的因素、使之摆脱原来的具体复杂形态，形成对建模有用的信息资源和前提条件。这是建立模型最关键的一步。

对原型的抽象、简化不是无条件的，必须按照假设的合理性原则进行。假设不合理或太简单，会导致模型的失败或部分失败；假设过于详细或考虑因素过多，会使模型太复杂而且会降低模型的通用性。假设合理性原则有以下几点：

(1) 目的性原则 从原型中抽象出与建模目的有关的因素，简化那些与建模目的无关的或关系不大的因素。

(2) 简明性原则 所给出的假设条件要简单、准确，有利于构造模型。

(3) 真实性原则 假设要科学，简化带来的误差应满足实际问题所能允许的误差范围。

(4) 全面性原则 对事物原型本身作出假设的同时，还要给出原型所处的环境条件。

3. 构造模型

在建模假设的基础上，进一步分析建模假设的内容，首先区分哪些是常量、哪些是变量，哪些是已知的量、哪些是未知的量，然后查明各种量所处的地位、作用和它们之间的关系，选择恰当的数学工具和构造模型的方法对其进行表征，构造出刻画实际问题的数学模型。

在构造模型时究竟采用什么数学工具，要根据问题的特征、建模的目的要求及建模人的数学特长而定。可以说，数学的任一分支在构造模型时都可能用到，而同一实际问题也可以构造出不同的数学模型。一般地，在能够达到预期目的的前提下，所用的数学工具越简单越好。

4. 模型求解

构造数学模型之后，根据已知条件和数据，分析模型的特征和模型的结构特点，设计或选择求解模型的数学方法和算法，然后编写计算机程序或运用与算法相适应的软件包，并借助计算机完成对模型的求解。

5. 模型分析

根据建模的目的要求，对模型求解的数字结果，或进行稳定性分析（指分析结果重复获得的可能性），或进行系统参数的灵敏度分析，或进行误差分析等。通过分析，如果不符合要求，就修改或增减建模假设条件，重新建模，直到符合要求。如果通过分析符合要求，还可以对模型进行评价、预测、优化等方面的分析和探讨。

6. 模型检验

模型分析符合要求之后，还必须回到客观实际中去对模型进行检验，看是否符合客观实际，若不符合，就修改或增减假设条件，重新建模。循环往复，不断完善，直到获得满意结果。

目前计算机技术已为进行模型分析、模型检验提供了先进的手段，充分利用这一手段，可以节约大量的时间、人力和经费。

7. 模型应用

模型应用是数学建模的宗旨，也是对模型的最客观、最公正的检验。一个成功的数学模型，必须根据建模的目的，将其用于分析、研究和解决实际问题，充分发挥数学模型在生产和科研中的特殊作用。

以上介绍的数学建模基本步骤应该根据具体问题灵活应用，或交叉进行，或平行进行，不必拘泥于一种模式，最大限度地发挥建模者的主观能动性和聪明才智。

例 以金属材料中空位形成能为例研究建模过程。

(1) 建模准备 原子能的发展对于金属研究提出了一个新的课题，即高能粒子对于金属材料性能的影响。反应堆中应用的金属材料都是在强辐照条件下工作的。辐照对于材料性能所引起的一些特殊效应就特别令人注意。固体受到辐照后产生的效应主要有三种类型：电离、蜕变和离位（产生空位和填隙原子），最后一种是金属中最主要的辐照效应，这说明对金属中空位研究是非常重要的。要研究空位，首先必须研究空位缺陷的形成能。

(2) 建模假设和构造模型 由于金属材料为晶体，以晶体作为研究对象，同时设想晶体为面心立方结构，原子间的相互作用限于最近邻。空位的形成能被定义为在晶体内取出一个原子放到晶体的表面（但不改变晶体的表面积）所需要的能量。为了不影响晶体的表面积，取出的原子应放在晶体表面的台阶处。空位形成模型如图 1-1 所示。

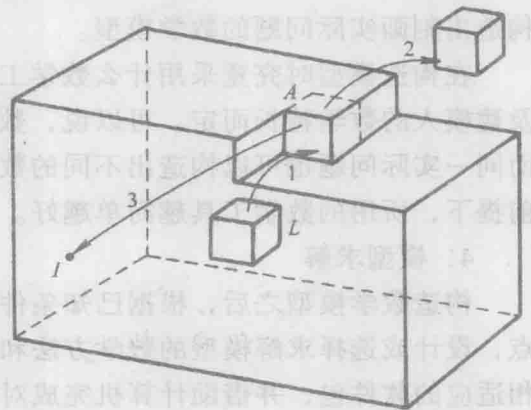


图 1-1 空位缺陷的形成

1—形成空位 2—蒸发 3—形成填隙原子

(3) 模型求解和模型分析 在面心立方晶体内取出一个原子要割断 12 个键（面心立方结构的配位数为 12），而在表面台阶处置放一原子，要形成 6 个键，因此净效应为割断 6 个键，且应和晶体的结合能（即升华能）相等。也就是说空位形成能和结合能之间有密切的关系，这是由该模型得出的结论。

(4) 模型检验 模型得出的结论——空位形成能和结合能之间有密切的关系是符合实验事实的：结合能愈大，熔点愈高，则空位的形成能也愈大。但事实上空位的形成能大约只为结合能的 $1/2 \sim 1/4$ ，显然，结论中形成能应和晶体结合能相等的观点是非常粗略的，原因在于没有考虑金属键的特征以及空位周围原子的位移。

重新建模、分析。设想按照下述的程序形成空位：

1) 将点阵中的一个正离子取出, 并将所带的正电荷均匀地散布在晶体中以抵消它的价电子, 使整个晶体仍保持电中性。空位的静电效应和一个零价的溶质原子相似, 在单价金属中, 空位的附加电荷为 $-Z_e$ (即 $Z = -1$), 引起导带电子的屏蔽效应。达到平衡状态后, 空位周围只保留局部的干扰电势 V_p 。设导带的电子浓度为 n , 静电能的增加就等于 nV_p 的体积积分:

$$E_1 = n \int_0^R 4\pi V_p r^2 dr \quad (1-1)$$

式中, r 表示积分元到空位中心的距离, R 表示积分区域的半径。根据电子屏蔽模型, V_p 与 Z 应满足下列关系:

$$-N_0(E_M) \int_0^R 4\pi V_p r^2 dr = Z = -1 \quad (1-2)$$

这里的 $N_0(E_M)$ 表示晶体导带在费米能级 E_M 处的能态密度。从式 (1-1) 和式 (1-2) 消去积分式, 即可求出

$$E_1 = \frac{n}{N_0(E_M)} \quad (1-3)$$

对于自由电子, 有

$$N_0(E) = CE^{\frac{1}{2}} \quad (1-4)$$

$$n = \int_0^{E_M} N_0(E) dE = C \int_0^{E_M} E^{\frac{1}{2}} dE = \frac{2}{3} CE_M^{\frac{3}{2}} \quad (1-5)$$

这里的 C 是一个常数。所以

$$E_1 = \frac{2}{3} E_M \quad (1-6)$$

2) 将取出的正离子放在表面台阶上, 由于自由电子气的膨胀, 造成费米能的下降。根据式 (1-5), E_M 可以表示为

$$E_M = \left(\frac{3}{2} \frac{N}{CV} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (1-7)$$

式中, N 为晶体中的原子数, V 为晶体的总体积。根据式 (1-7), 体积膨胀了 ΔV , 费米能级的变化为

$$\Delta E_M = -\frac{2}{3} E_M \frac{\Delta V}{V} \quad (1-8)$$

由模型可知, ΔV 等于一个原子体积, 而 $\frac{\Delta V}{V}$ 就等于 $\frac{1}{N}$; 自由电子的平均动能为 $\frac{3}{5} E_M$, 因此总的费米能的变化为

$$E_2 = -\frac{2}{3} \times \frac{3}{5} E_M = -\frac{2}{5} E_M \quad (1-9)$$

E_1 和 E_2 的迭加就等于空位的形成能 (忽略了畸变能), 即

$$E = E_1 + E_2 = \frac{4}{15} E_M \quad (1-10)$$

这样定出的 E ，大体上与实验的结果符合，只偏高一些，见表 1-1。如果考虑到空位周围的原子略有松弛，可能降低能量，因而有第三项 E_3 ，比如对铜的估计值为 -0.3eV 。这样， E_1 ， E_2 ， E_3 三项的迭加就接近于实验值。

表 1-1 空位的形成能 (实验值和理论值的对照)

金 属	U_f/eV (淬火)	U_f/eV (正电子湮灭)	U_f/eV (最佳值)	U_f/eV (理论计算值)
Cu	1.27	1.29	1.28	0.8~1.0
Ag	1.10	1.16	1.13	0.6~0.92
Au	0.94	0.97	0.95	0.6~0.77

(5) 模型应用 建立空位形成能计算模型后，根据自由能极小的条件，可以求出在热力学平衡状态下的空位浓度

$$c = \exp\left(-\frac{U_f - TS_f}{kT}\right) = A \exp\left(-\frac{U_f}{kT}\right) \quad (1-11)$$

式中， c 为平衡状态下的空位浓度； U_f 为空位形成能； S_f 为形成一个空位改变了周围的原子振动所引起的振动熵； k 为玻尔兹曼常数； T 为热力学温度。

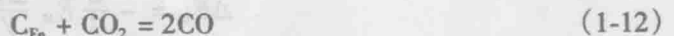
第三节 常用的数学建模方法

一、理论分析法

理论分析法是指应用自然科学中的定理和定律，对被研究系统的有关因素进行分析、演绎、归纳，从而建立系统的数学模型。理论分析法是人们在一切科学研究中广泛使用的方法。在工艺比较成熟、对机理比较了解时，可采用此法。根据问题的性质可直接建立模型。

例 在渗碳工艺过程中通过平衡理论找出控制参量与炉气碳势之间的理论关系式。

模型假设钢在炉气中发生如下反应：



式中， C_{Fe} 为钢中的碳。

可求出平衡常数 K_2 为

$$K_2 = \frac{P_{\text{CO}}^2}{P_{\text{CO}_2} \alpha_{\text{C}}} \quad (1-13)$$

式中， α_{C} 为碳在奥氏体中的活度； $\alpha_{\text{C}} = w_{\text{C}}/w_{\text{C}(\text{A})}$ ， $w_{\text{C}(\text{A})}$ 为奥氏体饱和碳含量，

w_c 为奥氏体中的实际碳含量； p_{CO} 和 p_{CO_2} 为平衡时 CO 和 CO_2 的分压。

$$\lg \alpha_c = \lg \frac{p_{CO}^2}{p_{CO_2}} - \lg K_2 \quad (1-14)$$

$$\lg (w_c / w_{c(A)}) = \lg \frac{p_{CO}^2}{p_{CO_2}} - \lg K_2 \quad (1-15)$$

$$\lg w_c = \lg \frac{p_{CO}^2}{p_{CO_2}} + \lg (w_{c(A)}) - \lg K_2 \quad (1-16)$$

将 $w_{c(A)}$ 和平衡常数 (K_2) 的计算式代入式 (1-16), 可求得碳势与炉气 CO、 CO_2 含量及温度之间的关系式。

在理论分析的基础上, 根据实验数据进行修正, 可得出实用的碳势控制数学模型。

下面介绍单参数碳势控制的数学模型的建立。

甲醇加煤油气氛渗碳中, 炉气碳势与 CO_2 含量的关系, 实际数据见表 1-2。

表 1-2 甲醇加煤油渗碳气氛 (930℃)

序号	φ_{CO_2} (%)	炉气碳势 C_c (%)
1	0.81	0.63
2	0.62	0.72
3	0.51	0.78
4	0.38	0.85
5	0.31	0.95
6	0.21	1.11

由前面炉气的化学反应得知:

$$K_2 = \frac{p_{CO}^2}{p_{CO_2} \alpha_c} = p \frac{\varphi_{CO}^2}{\varphi_{CO_2} \alpha_c} \quad (1-17)$$

式中, p 为总压, 设 $p = 1 \text{ atm}$ ($1 \text{ atm} = 101.325 \text{ kPa}$); p_{CO} 、 p_{CO_2} 分别为 CO、 CO_2 气体的分压; φ_{CO} 、 φ_{CO_2} 分别为 CO、 CO_2 的体积分数。

$$\alpha_c = \frac{1 \varphi_{CO}^2}{K_2 \varphi_{CO_2}} \quad (1-18)$$

$$\alpha_c = \frac{C_c}{C_{c(A)}} \quad (1-19)$$

式中, C_c 表示平衡碳浓度, 即炉气碳势; $C_{c(A)}$ 表示加热温度 T 时奥氏体中的饱和碳浓度。

同样, 可得

$$C_c = \frac{C_{c(A)} \varphi_{CO}^2}{K_2 \varphi_{CO_2}} \quad (1-20)$$

在温度一定时, $C_{(A)}$ 和 K_2 均为常数, 如不考虑 CO 及其他因素的影响, 将 φ_{CO} 等视为常数, 可得出

$$C_c = A \frac{1}{\varphi_{\text{CO}_2}} \quad (1-21)$$

式中, A 为常数。

对式 (1-21) 取对数, 得

$$\lg C_c = \lg A - b \lg \varphi_{\text{CO}_2} \quad (1-22)$$

设 $\lg C_c = Y$, $\lg A = a$, $\lg \varphi_{\text{CO}_2} = x$, 系数为 b , 可得

$$Y = a - bx \quad (1-23)$$

利用表中的实验数据进行回归, 求出回归方程为 $Y = -0.02278 - 0.3874x$

即

$$C_c = \frac{0.5918}{0.3874 \varphi_{\text{CO}_2}} \quad (1-24)$$

式 (1-24) 即为碳势控制的单参数数学模型。

二、模拟方法

模型的结构及性质已经了解, 但其数量描述及求解却相当麻烦。如果有另一种系统, 结构和性质与其相同, 而且构造出的模型也类似, 就可以把后一种模型看成是原来模型的模拟, 而对后一个模型去分析或实验并求得其结果。

例如, 研究钢铁材料中裂纹在外载荷作用下尖端的应力、应变分布, 可以通过弹塑性力学及断裂力学知识进行分析计算, 但求解非常麻烦。此时可以借助实验光测力学的手段来完成分析。首先, 根据一定比例, 采用模具将环氧树脂制备成具有同样结构的模型, 并根据钢铁材料中裂纹形式在环氧树脂模型加工出裂纹; 随后, 将环氧树脂模型放入恒温箱内, 对环氧树脂模型在冻结温度下加载, 并在载荷不变的条件下缓缓冷却到室温卸载; 将已冻结应力的环氧树脂模型在平面偏振光场或圆偏振光场下观察, 环氧树脂模型中将出现一定分布的条纹, 这些条纹反应了模型在受载时的应力、应变情况, 用照相法将条纹记录下来并确定条纹级数, 再根据条纹级数计算应力; 最后, 根据相似原理、材料等因素确定一定的比例系数, 将计算出的应力换算成钢铁材料中的应力, 从而获得了裂纹尖端的应力、应变分布。

以上是用实验模型来模拟理论模型, 分析时也可用相对简单理论模型来模拟、分析较复杂理论模型, 或用可求解的理论模型来分析尚不可求解的理论模型。

例如, 在研究材料相变的微观理论中, 统计理论是发展最早而且最为成熟的一个领域。20 世纪 20 年代 W. Lenz 与 E. Ising 提出了一种用以解释铁磁相变的简化统计模型, 称为 Ising 模型。多年来 Ising 模型的研究一直是相变统计理论的核心