太原科技大学

2019/2020　学年第　2　学期研究生课程考核­

（研 读 报 告）

考　核　科　目：现代材料制备方法

学生所在院(系)：材料科学工程学院

学科、专业：材料科学与工程

年　　　　级：2019级硕士研究生

学　　　 号：S20190401

姓　　　　名：张原硕

**计算机模拟技术在材料制备过程中的应用**

**摘要 ：**当今，对先进材料及创新型可持续材料制备方法的需求与日俱增。因此，理解不同材料及其制备过程至关重要。随着计算机硬件及软件的快速发展，计算机模拟技术在材料制备领域中的应用日益广泛。材料制备工艺的计算机模拟能比较准确地预测材料制备过程中的各种场变量、组织性能、缺陷信息及设备载荷等，实现对制备工艺的优化与设计，突破了以大量经验积累和简单循环试错为特征的“经验寻优”的传统研究模式[1]。

**关键词 ：**计算机模拟；材料制备；金属材料

&占位符&占位符&占位符

**引言：**历经数十年的发展，计算材料学已成为与实验和理论同等重要的研究手段。材料计算以实现跨越多时间尺度和空间尺度来研究材料的行为。计算模拟是一种根据研究的实际体系，在计算机上进行的模拟实验[2]。基本上不受实验条件、时间和空间的限制，具有极大的灵活性和随机性。在材料制备研究领域，可以依赖强大的计算能力、复杂的模拟手段和先进的数值算法实现对材料工艺、组织结构与性能的预测，进而优化材料的加工过程，获得较佳的材料性能等。虽然传统制备工艺的成形方法不同，但决定因素是一致的，即成分、工艺、组织与性能之间的协同关系，这为计算材料学在传统的材料制备工艺中的应用提供了巨大的发展潜力[1]。近年来提出的材料基因组计划把材料计算推向了新高度，它突出特征是材料的高通量计算。与材料高通量制备、高通量表征和数据库结合，从而实现材料设计与制备时间减半、成本减半的目的。通过过程可视化和工艺优化，计算机模拟将以往的“事后分析”提前到“事前预报”，进而最大限度地提高材料的合格率和材料利用率。而计算机硬件和运算速度的飞速发展为材料制备工艺的计算机模拟提供了保障。

&占位符&占位符&占位符

**1. 计算机模拟的基本原理**

&占位符&占位符&占位符

**1.1 统计力学**

计算机模拟使人们可以研究多粒子体系的性质。然而并非所有的性质都可以由模拟测定。与之相反，绝大多数可以在模拟中测定的量，并不真正对应于实验中测定的量。如，在液体水中的分子动力学模拟中，可以测得液体中全体分子的瞬时位置和速度，然而这种信息并不能与实验数据对比，因为没有一种实验能提供此类细节。而一个典型的实验只测定覆盖大量粒子以及测量时间的平均性质。如果想用计算机模拟作为实验数值对照结果，必须知道旨在计算何种平均值。统计力学的目的是研究宏观宏观物体的行为和性质所遵循的特殊一类规律性，它的一个重要任务是解释作为唯象理论的热力学。统计力学可由分子微观性质计算热力学量。而热力学描述了宏观系统中为数不多的几个可观测量，气体的压强、体积和温度之间的关系，唯翔刻画系统的整体行为[3]。

&占位符&占位符&占位符

**1.2 第一性原理**

第一性原理，是从量子力学理论出发的计算方法，仅需要原子精细机构常数、电子质量及带电量、原子核质量及电量、普朗克常量和光速这几个已知的参数，便可根据原子核和电子相互作用的原理及其基本运动规律，经过多个近似处理后直接求解薛定谔方程，进而得到材料所有的基态性质。狭义的第一性原理计算，是指基于Hatree-Fock自洽场计算方法的“从头算”，广义的第一性原理计算在此基础上还包含了密度泛函理论计算。在材料计算中，第一性原理方法常见于超晶胞、表面、界面、团簇等晶体结构模型，由于优化其几何结构、计算体系能量，得到能带结构、态密度、电荷分布等重要信息，进而对体系进行理论象化的分析。实际操作中，除了第一性原理要求的几个参数外，还常常加入一些“经验参数”，通常来自于第一性原理计算中的前人得出、已得到大量实例验证的规律，或者来自于实验领域最直接的结果，这样做的做法能有效地减少计算资源的损耗，进而保证计算工作在最优化的条件下进行。

&占位符&占位符&占位符

**1.3 分子动力学**

分子动力学，是从经典物理的统计力学出发的计算方法，它通过对原子间相互作用势函数及运动方程求解，分析其分子运动的行为规律，模拟体系的动力学演化过程，给出微观量与宏观量之间的关系，从而研究复合体系的平衡态性质和力学性质，是研究材料内部流体行为、通道运输等现象有效的研究手段。

体系中经典粒子受力为：

IMG_256

其中，F为粒子所受的力，a为粒子的加速度，m是粒子的质量。力可以表示为势能函数对坐标的一阶导数，加速度可以表示为速度对时间的一阶导数，可将上面方程改写为以下两组方程：

IMG_256

IMG_256

其中，v是粒子速度，U为相应的势能函数。通过给定势函数，赋予体系初始的坐标和速度，可以得到一系列包含了整个分子动力学过程的坐标与速度，在通过对坐标与速度的统计，得到需要的体系相应的热力学与动力学性质。分子动力学中每一个粒子的运动，取决于它所处的势函数，严格按照牛顿定律在相空间进行演化，得到的统计结果来自于“确定的”经典力学结果。

&占位符&占位符&占位符

**1.4 蒙特拉罗方法**

蒙特卡洛方法，是以概率论个数理统计为理论基础、使用随机数解决实际问题的一种随机抽样统计方法，它常用语求解一些带有“随机”性质的实际生活问题和研究一些带有现条件下难以观测的物理量试验。根据大数定律，要使得随机独立事件呈现出具有一定规律的统计结果，需要大量地进行重复试验，因此在计算机上运用蒙特卡洛方法进行模拟实验，本身就具有天然的优势。蒙特卡洛方法中每一个粒子的运动，取决于抽样所给定的概率分布，得到的统计结果来自于“随机的”概率统计结果。

&占位符&占位符&占位符

&占位符&占位符&占位符

**2. 计算机模拟的常用软件**

高性能计算在材料科学中的应用除了需要有计算机硬件之外，更重要的还要有优质高效的应用软件。材料科学应用中的计算一般都比较耗时，因而这一类软件一方面及时跟进利用物理、数学等领域的最新研究成果，一方面又要充分适应高性能计算软硬件的发展。对一个现实材料的理论模拟，考虑到研究成本和时间等因素，人们可以选择不同的体系模型，相应地采用不同精度的近似，或者选用不同的应用软件。量子力学软件，一般使用密度泛函理论，周期性边界条件，赝势方法或全电子轨道，比较常见的软件包有VASP、Materials Studio、CRYDTAL、WIEN2k等软件[4]。分子力学软件，不考虑电子的运动，使用粒子间相互作用势作为参数，通常针对某一类特定体系，从试验或第一性原理计算的到的力场参数，从而可以较快和较精确地求解某一特定类型的问题。常用的软件有Amber、NAMD、CHRMM、Lammps等[4]。现主要计算两种常用软件。

&占位符&占位符&占位符

**2.1 VASP**

VASP是研究材料电子结构比较成熟和广泛使用的软件包。它使用密度泛函理论，平面波基组，超软赝势或投影缀加波方法，以及周期性边界条件，可以研究多种体系，包括金属及其氧化物、半导体、晶体、掺杂体系、纳米材料、分子、团簇、表面体系和界面体系等。这个软件有如下优点：实现多种密度泛函和方法，功能比较齐全；官方提供比较精确的赝势；文档比较详尽，和物理性质联系得较好；以源码包形式发布；结构优化能力较强；新的功能和方法实现比较快。缺点可能有输入文件较多，参数定义不够直观，前后数据处理相对比较麻烦等。但它有很多第三方的可视化软件，如p4vasp，vaspview，等很多前后处理的工具。

&占位符&占位符&占位符

**2.2 Lammps**

Lammps是使用分子力学和分子动力学方法研究材料最流行的软件。它能够处理多种模型体系；实现了很多力场，特别是有可以描述化学键形成和断裂的反应性力场reaxff；支持多种系综，多种不同边界条件；能够有效率的并行；并且支持图形处理单元（GPU）的运用。它可以模拟很多比如压痕，拉伸，溅射，沉积，晶界等实验过程和更接近现实的模型，较多地用来计算力学性质，化学反应等。可以支持包括气态，液态或者固态相形态下、各种系综下、百万级的原子分子体系，并提供支持多种势函数。且LAMMPS有良好的并行扩展性。

&占位符&占位符&占位符

**3. 计算模拟技术应用于金属材料制备**

由于材料制备过程的复杂性以及现场测试条件的限制，计算机模拟已成为解析其过程现象和机理不可或缺的手段,自20世纪80年代以来,这种技术得到了飞速发展[5]。金属材料制备工艺过程涉及从上游的金属冶炼到下游构件成形的整个流程，是极其复杂的高温、动态与瞬时的物理冶金过程。在此过程中，材料会历经冶炼、铸造、锻造、焊接、热处理、热轧与冷轧等成形过程，涉及液/固与固/固相变等一系列复杂的物理化学转变。为了获得优质构件，就必须优化制备工艺使金属材料的成分、工艺、组织与性能处于最佳状态，同时控制缺陷至可接受的尺寸或者直接消除宏观缺陷。虽然传统制备工艺的成形方法不同，但决定因素是一致的，即成分、工艺、组织与性能之间的协同关系，这为计算材料学在传统的材料制备工艺中的应用提供了巨大的发展潜力。材料制备工艺的计算机模拟能比较准确地预测材料制备过程中的各种场变量、组织性能、缺陷信息及设备载荷等，实现对制备工艺的优化与设计，突破了以大量经验积累和简单循环试错为特征的“经验寻优”的传统研究模式[1]。在制造业，计算机模拟与仿真可以增加材料利用率25％，节约生产成本30％，产品设计至实际投产的时间缩短40％[9]。

&占位符&占位符&占位符

**3.1 铸造过程**

目前，凝固过程传热模拟、冲型过程流动场模拟、流动与传热耦合等模拟技术已进入实用化阶段，在不同的铸造方式如重力、低压、压铸等以及不同的合金如铸钢、铸铁、有色合金的铸件生产中都得到了很好地应用。应力应变、组织性能以及其他方面如汽化膜、射芯、偏析、熔炼及热处理等方面的模拟仿真技术也处于积极发展中[7]。目前采用计算机模拟技术可以实现对铸造工艺参数、设备和生产过程进行准确、快速的检测和控制。通过计算机模拟技术实现了优化成型方法和工艺，以及对材料制备成型和加工全过程的精确设计与控制。铸造工艺模拟是产品设计和铸造工艺开发的重要工具。铸造过程中的计算机模拟开展较早, 在技术上也比较成熟, 已由宏观模拟进入微观模拟阶段，从 20 个世纪 90 年代初期至今, 开展了微观组织形态的计算机模拟, 可以模拟形核、生长过程, 预报铸件凝固过程中的晶粒形貌。通过对铸件充型凝固过程的数值计算分析工艺参数，从而对铸件所设计的铸造工艺进行验证和优化,以获得合格的铸件。

&占位符&占位符&占位符

**3.2 焊接过程**

焊接是一个涉及许多学科的复杂的物理—化学过程。由于焊接过程涉及的变量数目繁多，单凭积累工艺试验数据来深入了解和控制焊接过程，既不切实际又成本昂贵和费时费力。随着计算机技术的发展，通过一组描述焊接基本物理过程的数学方程来模拟焊接过程，采用数值方法求解以获得焊接过程的定量认识，即焊接过程的计算机模拟，成为一种强有力的手段。计算机模拟方法为焊接科学技术的发展创造了有力的条件[8]。焊接过程的模拟与仿真主要围绕４个大的方面展开：

（１）焊接熔池中的流体动力学和热过程。

（２）热源与金属间的相互作用（焊接电弧物理、电弧作用于熔池表面的热能和压力分布、熔池表面的变形、液态金属的蒸发，还有氢、氮、氧在熔池及周围环境之间的配分等）。

（３）焊缝金属凝固和焊接接头的相变过程。

（４）焊接应力应变发展过程以及非均质焊接接头的力学行为（包括氢的扩散、裂纹的产生倾向等）[10]。

对金属液充型过程数值模拟的研究多数以 SOLA-VOF（solution algorithm）为基础，引入体积积函数处理自由表面，并在传热计算和流场修正等方面进行研究改进。相场模型（phase Field）引用相场函数，用以区分不同相的相区，避免了跟踪相界面的困难。相场模拟能清晰显示晶体生长和粗化过程，及凝固过程中枝晶生长的细节。通过计算机模拟技术在企业中取得的良好经济效益，出现了一些商品化的软件，其中最著名的软件公司是法国 ESIGroup 公司[6]。该公司最近推出的新焊接模拟软件 SYSWELD2000，能充分模拟连续焊接、电阻焊接、淬火、电磁硬化、热电化学处理和表面处理等过程。通过 SYSWELD 2000 软件中的新型工程技术资料库,用户可模拟真实焊接过程。

&占位符&占位符&占位符

**3.3 锻压过程**

对于精密锻造成形，成形工艺与模具设计往往依靠一些经验和直觉作为设计准则，在经过一次次试模、修正和改进后，才确定正确的工艺参数。这种常规方法具有很大的盲目性和试探性，并带来设备、材料和时间的浪费。这种缺乏科学性的经验方法，因其周期长、成本高、精度低，已不再适应现代制造业的发展要求。

目前锻造成形过程的计算机数值模拟的到广泛应用，利用数值数值模拟方法，可方便地确定塑性成形过程各个阶段所需的变形功和载荷，获得工件的内部应力、应变、温度分布，预测工件的成形状况、残余应力、缺陷、晶粒的粒度和取向分布，为精密锻造成形过程的模拟与优化设计提供了强有力的工具。将计算机模拟方法运用于精密锻造成形分析，主要有正向模拟技术和反向模拟技术。

&占位符&占位符&占位符

**3.4 热处理过程**

随着现代科学技术的发展，对机械零件的性能和可靠性的要求越来越高。金属零件的内在性能和质量，除材料成分特征外，主要是在热加工过程中形成的。热处理则是热加工过程的最后一道工序，起着举足轻重的作用。由于热处理过程中，零件内部温度分布不均，组织转变过程的不均匀而产生内应力，如淬火过程中的瞬时应力和最后形成的残余应力。如果处理不当，淬火应力或残余应力过大，不仅影响零件使用寿命、设备安全，甚至在淬火过程中产生裂纹或开裂而使零件报废[13]。

要在理论上对温度场、组织场、应力场耦合求解析解释很困难的。用物理模拟方法进行研究也有许多局限性，因为很难找到各种物理量都能满足相似原理的物理模型。计算机数值模拟是以物理型为基础，建立数学模型，通过计算机求解各种场。计算机求解多用离散化的方法求近似解。它虽然不能直接给出诸如相态分布、应力分布于工艺参数的函数关系，但能对温度场-组织场-应力场进行耦合计算，给出每一瞬时的温度场、组织场、应力场的信息，并直接观察到其在过程中变化的情况；它在计算中可以考虑个物性参数是温度和组织状态的函数关系；不像物理模拟方法时，要求各物理量都要满足相似原理，才能将小试样实测结果直接用到实物上。利用计算机数值模拟不仅可以对现行工艺进行校核，而且可以优化工艺方案和参数，从而使热处理工艺的制定建立在更可靠的科学基础上。

&占位符&占位符&占位符

**4. 结语**

随着计算机技术的发展，材料科学中的计算机模拟技术应用日益广泛。材料制备工艺的计算机模拟比较准确地预测材料制备过程中的各种场变量、组织性能、缺陷信息及设备载荷等，实现对制备工艺的优化与设计，突破了以大量经验积累和简单循环试错为特征的“经验寻优”的传统研究模式。

&占位符&占位符&占位符&占位符

&占位符&占位符&占位符&占位符

&占位符&占位符&占位符&占位符

&占位符&占位符&占位符&占位符

&占位符&占位符&占位符&占位符

&占位符&占位符&占位符&占位符

&占位符&占位符&占位符&占位符

&占位符&占位符&占位符&占位符

&占位符&占位符&占位符&占位符

# 参考文献

1. 李殿中. 集成材料计算模拟：金属制备工艺研究的新范式 2018
2. Leach A R. Molecular modeling principles andapplications. London: Addison Wesley Longman Limited, 1996.321
3. 郑伟谋. 关于统计力学的基本原理[J]. 物理, 2018, 47(10): 617-625
4. 胡双林. 材料科学中的高性能计算软件 2012
5. 朱苗勇 娄文涛 王微领. 炼钢与连铸过程数值模拟研究进展 金属学报(中文版), 2018, 54(2): 131-150
6. 李延君 王永宪. 计算机模拟技术在材料科学中的研究现状. 材料导报
7. 周建新. 铸造计算机模拟仿真技术现状及发展趋势. 铸造 2012,:1105
8. 宋天虎. 第八次全国焊接会议论文集, 机械工业出版社, 1997, 1-17
9. Liu Beicheng. The 4th International Conference on Fontiers of Design and Manufacturing, Hangzhou, June 17-19,2000,1-7.
10. 武传松. 焊接过程的计算机模拟
11. 王忠雷 赵国群. 精密锻造技术的研究现状及发展趋势, 精密成型工程, 2009, 1-1
12. 王陆军 张民 王瑞平. 热处理理论模拟计算及其工业实践中应用, 金属加热 2017,1-7
13. 刘庄 吴肇基 吴景之 张毅. 热处理过程的数值模拟, 科学出版社, 1996, 1-4